



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



AVALIAÇÃO DE POLÍTICAS DE OPERAÇÃO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

JOSIAS JOSÉ JUNGES

ORIENTADOR: PROF. DR. RAFAEL DE PELEGRINI SOARES

PORTO ALEGRE

DEZEMBRO DE 2010

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	iii
LISTA DE TABELAS	iv
LISTA DE SÍMBOLOS.....	v
RESUMO	vi
1 INTRODUÇÃO	1
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1 Destilação em Batelada	3
2.2 Operação de colunas em batelada	6
2.2.1 Políticas de operação	6
2.2.2 Otimização da política de operação.....	7
2.3.3 Influência do acúmulo de líquido nos pratos.....	10
3 ESTUDO DE CASO	12
3.1 Descrição do processo.....	12
3.2 Modelagem	13
3.2.1 Modelagem matemática	14
3.3 Simulação	17
3.3.1 Parâmetros da Simulação	17
3.3.2 Determinação das condições iniciais	18
3.3.3 Propriedades físicas e termodinâmicas	19
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	20
4.1 Estado estacionário do refluxo total	20
4.2 Avaliação das políticas de operação	21
4.2.1 Política de operação heurística.....	21
4.2.2 Política de operação de refluxo constante	22
4.2.3 Política de operação com controlador.....	23
4.2.4 Comparação das políticas	23
4.3 Influência do acúmulo de líquido.....	25
5 CONCLUSÃO.....	27
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	28
ANEXOS	29

LISTA DE FIGURAS

Figura 1– Esquema convencional de uma coluna de destilação em batelada para um sistema ternário (Mutjaba, 2004).	5
Figura 2 – Perfil de composição do destilado na destilação em batelada de um sistema quaternário (Perry, 1999).	5
Figura 3 – Modos de operação de uma coluna de destilação em batelada (Fileti,1993).	7
Figura 4 - Política de operação de otimizada (Mutjaba, 2004).	8
Figura 5 – Política ótima de refluxo e grau de pureza.	9
Figura 6 – Efeito do acúmulo de líquido na coluna sobre o tempo mínimo de batelada (Mutjaba,2004).	11
Figura 7 – Representação esquemática do processo (Klingberg, 2000).	12
Figura 8 – Perfil de temperatura da condição inicial até o estado estacionário.	19
Figura 9 – Perfis de temperatura e composição da coluna no estado estacionário a refluxo total.	20
Figura 10 – Variação da composição do destilado e da razão de refluxo no tempo.....	21
Figura 11 – Variação da composição do destilado e da razão de refluxo no tempo.....	22
Figura 12 – Variação da composição do destilado e da razão de refluxo no tempo.....	23
Figura 13 – Comparação das estratégias de operação.	24
Figura 14 – Efeito do acúmulo de líquido na coluna no tempo de batelada.	25

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros da simulação.	18
Tabela 2 - Composição da mistura utilizada na simulação.	18
Tabela 3 - Política de operação heurística.....	21
Tabela 4 - Resultados da política heurística.	22
Tabela 5 - Resultados da política de refluxo constante.....	22
Tabela 6 - Resultados da política com controlador.	23

LISTA DE SÍMBOLOS

$\varphi_p^{j,L}$ - Coeficiente de fugacidade do componente j na fase líquida do prato p

$\varphi_p^{j,V}$ - Coeficiente de fugacidade do componente j na fase vapor do prato p

C – Número de componentes

D - Vazão molar de destilado (mol/s)

D_{ta}^j - Acúmulo de destilado do componente j no tanque ta (mol)

Dt_{ta} - Acúmulo molar no tanque ta (mol)

H_c - Acúmulo molar de líquido no condensador (mol)

H_p - Acúmulo molar de líquido no prato p (mol)

J – Função objetivo

M - Acúmulo molar no refeedor (mol)

N – Número de estágios

P - Pressão (Pa)

R - Razão de refluxo

s_{ta} – Chave de acionamento do tanque ta

t - Tempo (s)

T_p - Temperatura no prato p (K)

V - Taxa de vaporização (mol/s)

V_t - Número total de mols vaporizados (mol)

x_D – Fração molar do destilado

x_p^j - Fração molar do componente j no líquido do prato p

x_r^j - Fração molar do componente j no líquido do refeedor

x_{ta}^j – Fração molar do componente j no tanque ta

y_p^j - Fração molar do componente j no vapor do prato p

y_r^j - Fração molar do componente j no vapor do refeedor

RESUMO

A destilação em batelada ainda é um importante processo de separação utilizado na indústria, apesar de ter sido considerada ultrapassada pelo surgimento da destilação contínua. Essa importância é devida, principalmente, à sua flexibilidade de operação. O processo de destilação em batelada é caracterizado pelo seu comportamento dinâmico, o que torna a sua operação complexa. Muitos estudos têm sido dedicados à determinação de políticas ótimas de operação desta categoria de equipamentos. O presente trabalho avalia e compara três políticas de operação, utilizando-se da simulação dinâmica de processos. A base para o trabalho é uma coluna de pratos real para a separação de uma mistura multicomponente encontrada na literatura. Uma modelagem de complexidade intermediária foi desenvolvida e implementada no simulador de processos EMSO. Os resultados mostraram que o tempo de batelada e o custo energético para uma política de operação com um controlador de composição são 29,2% menores em relação à política heurística presente na literatura. Adicionalmente, avaliou-se o efeito do acúmulo de líquido na coluna na sua operação, verificando uma influência prejudicial para elevados acúmulos.

Palavras-chave: destilação em batelada, simulação, modelagem, operação, otimização

1 INTRODUÇÃO

A destilação em batelada é um dos mais antigos processos de separação utilizados na indústria química. No entanto, apesar de ter sido considerada ultrapassada pelo surgimento das colunas de destilação contínuas, o significativo crescimento da indústria de química fina e a necessidade de recuperação de produtos a partir de resíduos industriais renovaram o interesse pelas colunas descontínuas.

O modo de operação desse tipo de coluna permite que “N” componentes sejam separados em somente uma coluna, enquanto que, destilando-se esta mesma mistura de “N” componentes de forma contínua, seriam necessárias “N-1” colunas. Nota-se também que a versatilidade de operação deste equipamento é uma qualidade indispensável em situações nas quais a composição da alimentação varia freqüentemente ou quando pequenas quantidades de diferentes misturas são manipuladas.

Neste contexto, é interessante notar que a destilação é um dos processos mais energeticamente intensivos da indústria química. Para algumas separações, uma redução modesta no tempo total da batelada pode corresponder a uma diminuição significativa nos custos operacionais envolvidos.

Sendo assim, é encontrada na literatura uma constante preocupação dos pesquisadores com a otimização operacional das colunas de destilação em batelada. Por conseguinte, a determinação de uma política de operação ótima acabou por receber uma atenção considerável.

Para atingir essa otimização, é necessário a modelagem matemática do processo e sua simulação. Muitos trabalhos foram desenvolvidos nesta área, havendo desde modelos muito simplificados até modelos mais rigorosos. Como a destilação em batelada é um processo caracterizado pela condição transiente, a simulação utilizada deve ser dinâmica.

Juntamente com o problema da avaliação da melhor estratégia de operação, surge a questão do efeito acúmulo de líquido na coluna no seu desempenho. Há diversas considerações a respeito do tema na literatura sendo, muitas vezes, controversas.

Portanto, objetivamos avaliar políticas de operação de colunas de batelada, através de sua simulação dinâmica. Para isso, iremos revisar as principais políticas de operação, construiremos um modelo para misturas multicomponente e implementaremos esse modelo no simulador dinâmico de processos EMSO. Feito isso, simularemos a operação de uma coluna real encontrada na literatura, obtendo resultados para refluxo total e perfis da

simulação dinâmica. Ao final, iremos implementar as diversas políticas e comparar os resultados, além de avaliar a influência do acúmulo de líquido no desempenho da coluna.

Este trabalho está estruturado em cinco capítulos. O Capítulo 1 faz uma breve introdução e trata dos objetivos do trabalho. No Capítulo 2, apresentamos conceitos fundamentais de destilação e uma revisão da literatura sobre as políticas de operação de colunas de batelada. O Capítulo 3 descreve a coluna do nosso estudo de caso, mostra o desenvolvimento da modelagem matemática e os principais parâmetros da simulação. No Capítulo 4, são apresentados e discutidos os resultados das simulações. Por fim, no Capítulo 5, realizam-se as conclusões do trabalho, assim como sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nos anos cinqüenta, os engenheiros químicos tinham a impressão que sua missão era transformar os antigos processos em batelada nos modernos processos contínuos. Com essa perspectiva é surpreendente descobrir que, hoje em dia, cinqüenta anos depois, uma parte significativa da produção mundial da indústria química por volume e, numa proporção ainda maior, por valor é produzida em processos em batelada e é improvável que essa proporção diminua num futuro próximo (Mutjaba, 2004).

A produção em batelada ocorre geralmente em equipamentos padronizados, que podem facilmente ser adaptados e reconfigurados para outros produtos. Esse tipo de produção é especialmente adequado para produtos de baixo volume e alto valor, tais como produtos farmacêuticos, poliméricos, biotecnológicos e da química fina, cuja demanda anual pode ser fabricada em poucos dias ou em poucas bateladas. A flexibilidade desse arranjo produtivo também é adequada para as flutuações e rápidas mudanças na demanda, o que é característico de produtos desse tipo. Outros fatores que favorecem os processos em batelada são a necessidade de produtos adaptados às especificidades de cada cliente e a sazonalidade da demanda de certos produtos.

Quando é necessário produzir pequenas quantidades de diferentes produtos, geralmente é mais eficiente produzi-los, por exemplo, numa planta de batelada para múltiplos propósitos, do que operar uma planta diferente para cada produto.

2.1 Destilação em Batelada

A destilação é o método mais usado na indústria química e petroquímica para a separação dos constituintes de uma mistura líquida. O método baseia-se na diferença entre as volatilidades dos componentes da mistura. A separação é realizada através da vaporização parcial da mistura e subsequente recuperação do vapor e do resíduo líquido.

O processo de separação por destilação é realizado em equipamentos como colunas de pratos ou recheios, cujo objetivo principal é proporcionar o contato íntimo entre o líquido e o vapor de modo a permitir a transferência de massa entre as fases.

A destilação pode ser realizada de forma contínua ou em batelada. No primeiro caso, a alimentação da mistura a ser separada, assim com a remoção dos produtos destilados da coluna é feita de maneira contínua. Dada uma carga e condições operacionais fixas, passado o estado transiente no início da operação da coluna, as retiradas de líquido e vapor serão constantes. O mesmo acontece com as composições destas correntes, que

permanecem inalteradas com o tempo. A destilação contínua é usualmente empregada quando grandes quantidades de mistura a ser separada estão disponíveis a uma taxa e composição razoavelmente uniformes.

Por outro lado, na destilação em batelada uma carga líquida da mistura a ser separada é adicionada à coluna e a seguir é continuamente vaporizada. O vapor produzido é removido da coluna, condensado e armazenado em reservatórios. Ao longo da batelada a mistura original vai sendo consumida e as composições ao longo da coluna vão mudando continuamente. Variações nas temperaturas de toda a coluna acompanham as alterações de composição.

O processo em batelada requer consideravelmente mais trabalho e atenção do que o processo contínuo. Em geral é necessário parar, drenar e limpar a coluna cada vez que uma nova carga deve ser destilada, o que pode resultar num aumento substancial do tempo total do processo. Deste modo a destilação em batelada é normalmente utilizada quando um produto deve ser manufaturado somente em determinados períodos e onde um número de misturas diferentes devem ser separadas em diferentes períodos pela mesma coluna.

Em muitas plantas químicas as colunas de destilação em batelada são importantes partes destes processos, realizando separações e purificações de pequenos volumes de especialidades químicas de alto valor unitário.

Como grande vantagem do processo descontínuo, destaca-se o fato de que uma única coluna em batelada pode separar uma mistura de "N" componentes em seus componentes puros, enquanto em um processo contínuo seriam necessárias "N-1" colunas para realizar a mesma separação. Uma simples coluna pode processar uma grande faixa de composições de alimentação, um número variado de componentes e diferentes graus de dificuldade de separação.

A preferência por processos descontínuos está baseada em aspectos econômicos, uma vez que é necessário menos capital para o investimento inicial, e também na maior flexibilidade alcançada na operação deste processo. Em muitas situações onde a composição da alimentação pode mudar freqüentemente ou quando diferentes quantidades da carga inicial devem ser processadas, a versatilidade de uma unidade de destilação em batelada é excelente.

Um sistema de destilação em batelada consiste basicamente de: um refeedor, uma coluna de retificação, um condensador e reservatórios para a coleta de destilados. Um esquema típico é apresentado na Figura 1.

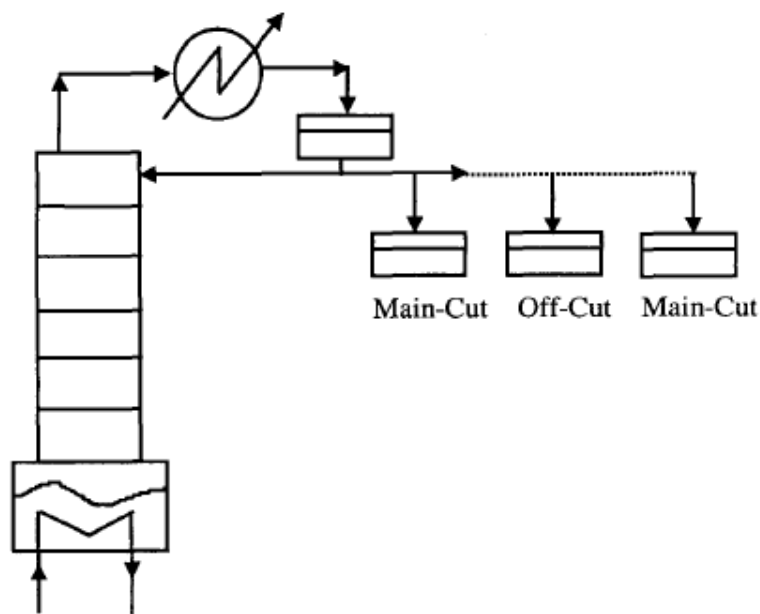


Figura 1 – Esquema convencional de uma coluna de destilação em batelada para um sistema ternário (Mutjaba, 2004).

Em operação, a carga líquida a ser separada é adicionada ao reator e então fracionada sob taxa de vaporização e refluxo controlados. Várias frações de destilado são coletadas em diferentes reservatórios no decorrer da destilação. Desde que não exista alimentação contínua para a coluna, a quantidade de carga líquida no reator vai diminuindo. Acompanhando essa variação, a composição do destilado varia à medida que a destilação progride.

A Figura 2 mostra a variação da composição do produto destilado durante a destilação, sob refluxo constante, para o caso de uma mistura de quatro componentes. A forma das curvas nessa figura depende da volatilidade dos componentes, da razão de refluxo e do número de estágios da coluna.

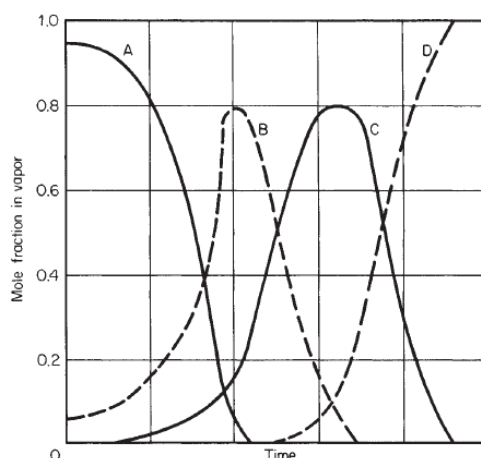


Figura 2 – Perfil de composição do destilado na destilação em batelada de um sistema quaternário (Perry, 1999).

Na destilação de sistemas binários, em geral, se obtém dois produtos e uma fração intermediária, enquanto que na destilação de um sistema ternário pode-se obter uma ou duas frações intermediárias e três produtos. Em geral, para sistemas com “N” componentes pode-se obter “N” produtos e “N-1” frações intermediárias.

2.2 Operação de colunas em batelada

A operação de uma coluna de destilação em batelada pode ser separada em três partes: a partida, a produção e a parada.

Na prática, uma coluna convencional de destilação em batelada pode ser partida na seguinte seqüência. O refeedor é carregado com a mistura a ser separada e calor é aplicado, de modo a trazer a carga ao seu ponto de bolha. Dependendo do calor aplicado, uma parte da carga é vaporizada e sobe através da coluna, atingindo quase que instantaneamente o condensador. Então, a válvula do condensador é aberta e o líquido condensado é armazenado no tanque do condensador. Após isso, a válvula do refluxo é aberta. O líquido começa a escoar pelos pratos, sendo retido pelos vertedouros, até atingir novamente o refeedor. A coluna opera então a refluxo total até que o estado estacionário seja atingido ou então até a composição do destilado atingir o grau de pureza necessário (Mutjaba, 2004). Em alguns casos, pode decorrer um longo período de tempo, até que alguma dessas condições seja satisfeita.

A fase da produção começa com o início da retirada de destilado. A operação nessa fase e sua duração dependem das especificações do produto e de fatores econômicos. As diversas políticas de operação serão tratadas posteriormente.

Ao final da produção, a coluna pode ser parada na seguinte seqüência: a fonte de calor da coluna é desligada, o acúmulo de líquido na coluna colapsa e é coletada no refeedor, e o acúmulo no condensador é misturado com o produto de topo ou com a carga do refeedor.

Para todos os tipos de configuração de colunas, esses procedimentos de partida, produção e parada serão praticamente iguais.

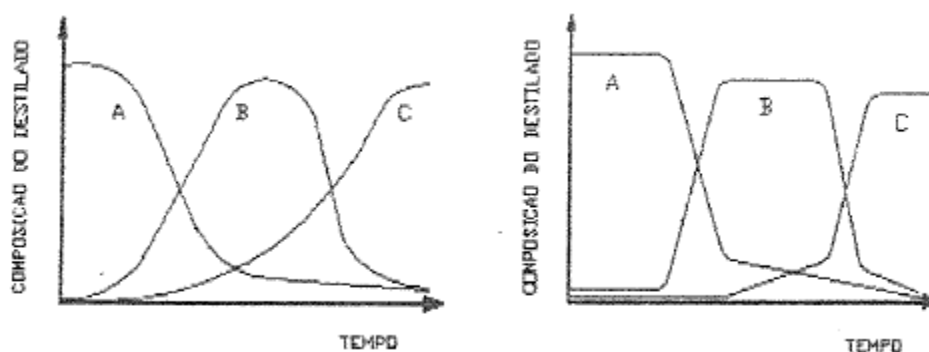
2.2.1 Políticas de operação

Uma coluna de destilação em batelada pode ser operada por diferentes maneiras. As três principais formas de operação são descritas a seguir:

1. Refluxo Constante: Neste caso a razão de refluxo é mantida constante durante a destilação. Uma vez que a composição do refeedor se modifica com o tempo, a composição do destilado também varia ao longo da destilação, sendo mais rica no

componente mais volátil no início do que no final da coleta de uma dada fração. Isso pode ser visualizado na Figura 3.

2. Composição de Destilado constante: Este modo de operação requer um aumento contínuo da razão de refluxo durante a destilação para manter a qualidade do produto - Figura 3. Quando a razão de refluxo torna-se muito alta – praticamente refluxo total - a coleta da fração é interrompida, e o refluxo é reduzido para a coleta da próxima fração. Este modo de operação requer ajuste automático do refluxo, de uma maneira pré-determinada ou pré-programada. Também deve ser notado que a implementação deste modo de operação requer um detector *on-line* de composição. Alternativamente pode-se acompanhar a temperatura como uma inferência da composição.
3. Outros modos de operação: Um procedimento cíclico pode ser usado para estabelecer a operação da coluna. A unidade opera a refluxo total até chegar ao equilíbrio. O destilado então é retirado com a totalidade da corrente de topo, durante um curto período de tempo. Após este período a coluna é novamente operada a refluxo total. O ciclo é repetido ao longo da destilação. Outra possibilidade é otimizar a taxa de refluxo para alcançar a separação desejada num tempo mínimo.



(a) Refluxo Constante (b) Composição de Destilado Constante

Figura 3 – Modos de operação de uma coluna de destilação em batelada (Fileti,1993).

As frações intermediárias recolhidas ao longo da destilação em batelada podem retornar ao processo de diferentes maneiras. Verifica-se então, a necessidade de escolha de uma estratégia de operação a fim de alcançar uma melhor separação em termos econômicos e de qualidade.

2.2.2 Otimização da política de operação

A destilação em batelada é um processo inerentemente dinâmico e, por isso, gera problemas de otimização dinâmica.

A política de controle ótimo de um processo pode ser definida como uma seqüência de ações de controle no tempo que, quando aplicada ao processo, irá resultar na operação ótima (Mutjaba, 2004). Na Figura 4, podemos ver uma política de operação com e sem otimização.

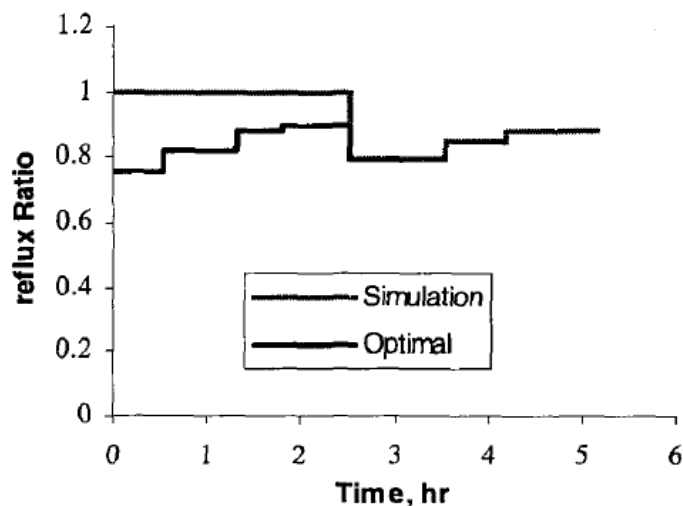


Figura 4 - Política de operação de otimizada (Mutjaba, 2004).

O critério para a otimização é definido em termos de uma função objetivo e restrições e o processo é caracterizado pelo modelo dinâmico. O critério de otimização na destilação em batelada pode assumir variadas formas, tais como, a maximização de uma função de lucro ou a minimização do tempo, sujeitos a qualquer restrição do sistema. As restrições mais comuns em destilação em batelada são a pureza e a quantidade de produto ao final do processo ou em um tempo intermediário. A variável do controle ótimo é geralmente a razão de refluxo, dado que a taxa de vaporização fica nos seus valores máximos, já que o objetivo passa, de uma forma ou de outra, pela minimização do tempo de batelada (Longsdon, Biegler, 1993).

Dois aspectos do processo de destilação em batelada têm recebido considerável atenção: a determinação de uma estratégia ótima para o refluxo líquido e a comparação entre o desempenho da coluna operando sob os modos de operação, taxa de refluxo constante e produto de topo com composição constante.

Perfis de controle foram definidos para vários estudos de otimização de acordo com as funções objetivos consideradas. Segundo Longsdon e Biegler (1993), os problemas encontrados na literatura são, normalmente, os seguintes:

1. Maximização do Destilado: maximizar a quantidade de destilado, de uma específica concentração num determinado intervalo de tempo.

2. Minimização do Tempo: minimizar do tempo de batelada necessário para produzir uma quantidade de destilado de uma pureza especificada.
3. Maximização do Lucro: maximizar a função lucro para uma determinada concentração de destilado.

Converse e Gross (1963) apud Brasil (1993) definiram a política ótima de refluxo como sendo aquela, sob a qual a máxima quantidade de destilado, de uma dada composição, é obtida em um determinado tempo a partir de condições iniciais de composição e tamanho de carga conhecidas. Uma formulação matemática para esse problema seria:

$$\text{Max } J(R(t)) = \int_0^{t^*} D dt = \int_0^{t^*} \frac{V}{R+1} dt \quad (1)$$

Sujeita a:

- $x_D \geq x_D^*$ (2)

- $t = t^*$ (3)

- Equações do Modelo

- Limites operacionais de R

Onde J é a função objetivo, D é a quantidade de destilado, R é a razão de refluxo, x_D^* é a especificação de pureza, t^* é o tempo determinado. Longsdon e Biegler (1993) utilizaram uma formulação análoga para o problema de maximização do destilado e obtiveram a política ótima de refluxo apresentada na Figura 5.

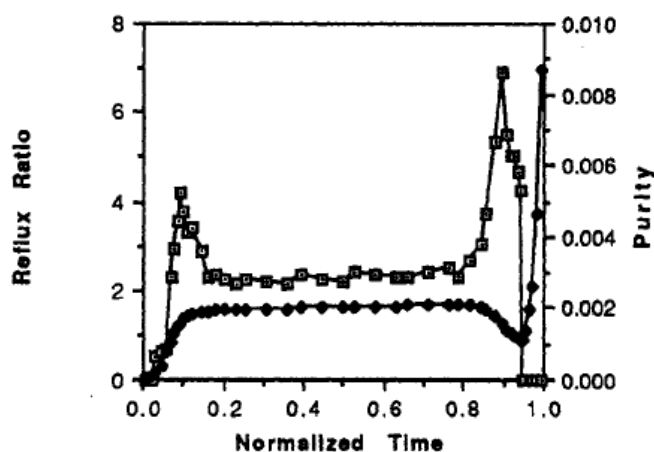


Figura 5 – Política ótima de refluxo (■) e grau de pureza (◆) (Longsdon, Biegler, 1993).

A maioria dos trabalhos encontrados na literatura são restritos a misturas binárias com aproximação de acúmulo molar constante nos pratos e com variáveis de projeto fixadas, tais como número de pratos e taxa de vaporização.

2.3.3 Influência do acúmulo de líquido nos pratos

Durante a destilação em batelada, uma certa porção da carga líquida permanece acumulada na unidade, na forma de refluxo, vapor ascendente, líquidos nos pratos ou recheio, no condensador e nas tubulações. Numa coluna de destilação contínua em estado estacionário, supondo mistura perfeita de líquido e vapor nos pratos, o acúmulo não tem efeito na análise, dado que nenhuma quantidade de líquido no sistema tem efeito nos balanços de massa do sistema. A destilação em batelada, no entanto, é um processo inerentemente transiente e o acúmulo de líquido no sistema influencia a taxa de mudança das vazões e, conseqüentemente, toda a resposta dinâmica do sistema. Este efeito pode ser prejudicial ou benéfico, dependendo do acúmulo e das condições de operação.

Quando a quantidade de material acumulado dentro da coluna não é desprezível comparada com a carga líquida no refeedor, a composição do destilado, sob refluxo constante, varia com o tempo de maneira diferente daquela quando o acúmulo não é grande. Isto ocorre por causa de dois efeitos opostos:

1. O primeiro efeito é causado pela concentração do componente mais volátil nas partes superiores da coluna devido ao acúmulo de material, reduzindo a porcentagem de componente mais volátil no refeedor e no vapor saindo do refeedor. Este efeito ocorre particularmente a altas razões de refluxo, quando a concentração do componente mais volátil é baixa, em comparação com aquela do material acumulado. O resultado é a redução na concentração do componente leve no produto destilado, quando comparada com aquela na ausência de acúmulo.
2. O segundo efeito é um “efeito de inércia” exercido pelo material acumulado, que impede a rápida mudança nas composições, aumentando o grau de separação em relação àquele na ausência de acúmulo. Este efeito é notado a baixas vazões de refluxo e grande acúmulo de material (Brasil, 1993).

Como os dois efeitos ocorrem simultaneamente e mudam de importância durante o curso da destilação, é difícil prever se o efeito do acúmulo será prejudicial ou benéfico. É também difícil prever a grandeza do efeito de retenção.

Segundo Mutjaba (2004), o papel do acúmulo de líquido na coluna tem sido motivo de controvérsia entre diversos estudos. A maioria deles restritos a colunas de destilação em batelada convencionais e a misturas binárias. Alguns trabalhos concluíram que um aumento no acúmulo melhora a separação a baixas razões de refluxo, mas que isso não influenciaria a altas razões de refluxo. Converse e Huber (1965) *apud* Mutjaba (2004) mostraram que para uma dada quantidade de destilado e uma pureza, altos acúmulos de líquido aumentam

o tempo de batelada, sendo, portanto, prejudiciais. Um efeito pequeno, mas positivo do acúmulo também foi resultado de algumas pesquisas mencionadas por Mutjaba (2004).

A influência do acúmulo de líquido na coluna, dada uma quantidade de destilado e uma restrição de pureza, pode ser visualizada na Figura 6. O parâmetro q representa o grau de dificuldade de separação da mistura.

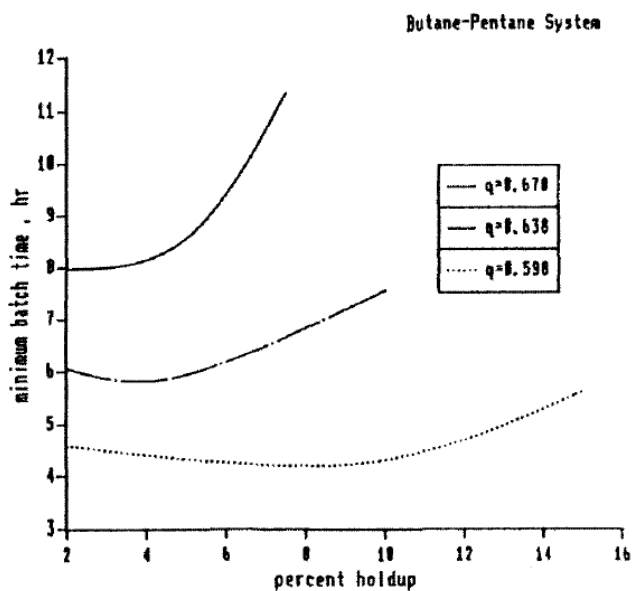


Figura 6 – Efeito do acúmulo de líquido na coluna sobre o tempo mínimo de batelada (Mutjaba,2004).

3 ESTUDO DE CASO

Para analisarmos os diferentes fatores que influenciam na determinação da política ótima de operação de uma coluna de destilação em batelada, estudaremos um caso real, encontrado na literatura. Trata-se de uma coluna da empresa Bayer AG, que opera industrialmente separando uma mistura de hidrocarbonetos e que foi descrita e simulada no trabalho de Klingberg (2001). Esta coluna será, portanto, a base para as simulações.

3.1 Descrição do processo

O objetivo do processo em questão é produzir C10 – n-decano -, a partir de uma carga de alimentação com mais de 30 componentes e concentração molar inicial de C10 em torno de 66%. O grau de pureza desejado no corte principal é de 99% de C10. Os demais cortes não possuem nenhuma especificação de pureza.

A separação original é realizada por uma coluna recheada e por uma coluna de pratos. Por questões de limitação de tempo, a coluna foi considerada composta por pratos no trabalho base (Klingberg, 2000). A coluna modelada consiste então em 40 pratos, tem uma altura de 13,5 metros e diâmetro de 1 metro. Cada prato possui em torno de 70 *bubble caps*.

Além disso, o sistema é constituído por um refeedor, um condensador e quatro tanques acumuladores. O refeedor é aquecido através de vapor d'água, cuja vazão é regulada por um controlador de pressão. O processo pode ser visualizado na Figura 7.

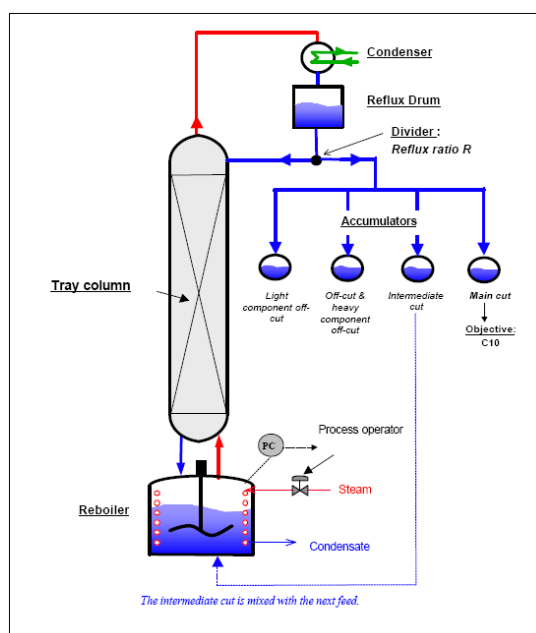


Figura 7 – Representação esquemática do processo (Klingberg, 2000).

A política de operação utilizada é de razão de refluxo constante segmentada, isto é, a razão de refluxo é fixada a determinados valores durante diferentes intervalos de tempo do processo. Este tipo de operação gera uma mudança na composição do destilado, a medida que a composição da mistura no refeedor varia.

O procedimento de operação consiste em cinco diferentes cortes, cada qual com uma razão de refluxo diferente:

1. *Off-cut* dos componentes leves: os componentes leves são evacuados, dura 5 horas e a razão de refluxo é 5.
2. *Off-cut*: o C4 é removido sem especificação e tem duração de 14 horas, a uma razão de refluxo 5.
3. Corte Intermediário: a fração molar de C10 deve atingir 99% no final dessa fase. Isso é atingido usando razão de refluxo 10, por 16 horas.
4. Corte principal: a composição molar de C10 precisa chegar a 99% no tanque acumulador ao final desse corte. A razão de refluxo é mantida a 5 por 7 horas e então é aumentada para 8 nas próximas 54 horas.
5. *Off-cut* dos componentes pesados: os componentes pesados são evacuados com pressão máxima e razão de refluxo mínima. Essa fase dura 4 horas.

Juntamente com a razão de refluxo, a diferença de pressão na coluna – medida entre o refeedor e o condensador- é usada como variável de controle para regular a operação da coluna. Quando a pressão diferencial é pequena, a vazão de vapor é aumentada pelo operador do processo. Essa diferença de pressão é mantida entre 0,8 e 1 bar.

3.2 Modelagem

A destilação é uma operação unitária complexa. Muitos estudos foram dedicados para a simulação de colunas com exatidão, considerando todos os fenômenos físicos envolvidos no processo. A literatura apresenta diferentes graus de complexidade, desde modelos muito rudimentares até os que consideram dinâmica de fluidos computacional. Porém, com o aumento do detalhamento e da exatidão do modelo, crescem a complexidade, o número de parâmetros a serem fornecidos e os problemas numéricos de resolução.

Os modelos *short-cut* foram amplamente empregados para os problemas de destilação em batelada. Eles consistem em correlações diretas entre a composição do refeedor e a composição do destilado, o que elimina a necessidade da modelagem individual dos pratos e reduz o tamanho do modelo significativamente. Esse tipo de modelo foi muito utilizado quando a capacidade de processamento dos computadores era limitada e atualmente estão em desuso.

Em um nível intermediário de sofisticação, muitos estudos foram feitos utilizando-se de modelos simplificados. Tais modelos são construídos sobre diversas considerações, como acúmulo constante de líquido nos pratos, acúmulo de vapor negligenciável, vazões internas constantes e estágios ideais de equilíbrio. Algumas dessas simplificações podem, no entanto, conduzir a resultados longe da realidade.

Para o estudo de caso considerado nesse trabalho, o modelo irá gerar um grande número de variáveis - 10 componentes e 20 pratos – e o simulador no qual este será implementado é orientado a equações. Para evitar problemas de convergência numérica, optou-se por um modelo de complexidade intermediária. Sendo assim, para a realização das simulações deste trabalho, será utilizado o modelo descrito por Domenech e Enjalbert (1980).

O modelo proposto tem como considerações fundamentais, no que tange ao balanço de massa do sistema, o acúmulo constante de líquido nos pratos e acúmulo de vapor negligenciável. Isto não é uma simplificação muito grosseira, considerando que a baixas pressões existe uma relação da ordem de mil vezes entre a massa específica do líquido e do vapor. Essas considerações geram vazões internas constantes e acabam com a necessidade de emprego de correlações de hidrodinâmica entre pratos. A taxa de vaporização foi tomada por constante no refeedor.

Adicionalmente, o balanço de energia será negligenciado, pois são assumidos calores de vaporização e capacidade caloríficas iguais para os componentes. Mesmo sem o balanço de energia, o perfil de temperatura é calculado como consequência do equilíbrio termodinâmico. Outras importantes suposições são: equilíbrio entre as fases, operação adiabática, mistura perfeita nos pratos, refeedor e condensador, condensação total e sem sub-resfriamento no condensador. Através destas simplificações, chega-se na modelagem matemática do processo.

Em se tratando de destilação batelada, a biblioteca de modelos do simulador EMSO continha um modelo para descrever apenas sistemas binários e, portanto, foi expandido para misturas multicomponentes. Além disso, houve a inserção dos tanques acumuladores dos diferentes cortes e de controladores.

3.2.1 Modelagem matemática

A modelagem do processo se dá basicamente através dos balanços de massa do sistema e relações de equilíbrio. O balanço de massa global é representado pela seguinte equação:

$$\frac{dM}{dt} = -D \quad (4)$$

Onde M é o acúmulo molar no refeedor e D é a vazão molar de retirada de destilado. Esta equação é consequência de acúmulos de líquido constantes nos pratos e acúmulo negligenciável no vapor. A vazão de destilado, por sua vez, é definida por:

$$D = \frac{V}{R+1} \quad (5)$$

Onde V é a taxa de vaporização e R é a razão de refluxo. O balanço molar por componente no refeedor é dado por:

$$\frac{dx_r^j}{dt} = \frac{V}{M} [x_r^j - y_r^j + \frac{R}{R+1} (x_1^j - y_r^j)] \quad j=1, 2, \dots, C-1 \quad (6)$$

Onde x_r^j é a fração molar do componente j no líquido do refeedor e y_r^j é a fração molar no vapor. Como foi assumido acúmulo de líquido constante nos pratos, torna-se necessário somente o balanço por componente, que é descrito pela equação:

$$\frac{dx_p^j}{dt} = \frac{V}{H_p} [y_{p-1}^j - y_p^j + \frac{R}{R+1} (x_{p+1}^j - x_p^j)] \quad p=1, 2, \dots, N \quad (7)$$

Onde H_p é o acúmulo molar de líquido no prato p . Por fim, apresentamos o balanço por componente no condensador:

$$\frac{dx_{N+1}^j}{dt} = \frac{V}{H_c} (y_N^j - x_{N+1}^j) \quad (8)$$

Onde H_c é o acúmulo molar de líquido no condensador.

Além disso, temos as restrições das frações molares, descritas em:

$$\sum_{j=1}^C x_p^j = 1 \quad (9)$$

$$\sum_{j=1}^C y_p^j = 1 \quad (10)$$

O equilíbrio termodinâmico pode ser visualizado na seguinte expressão:

$$\varphi_p^{j,L} \cdot x_p^j = \varphi_p^{j,V} \cdot y_p^j \quad (11)$$

$$\varphi_p^{j,L} = f(T_p, P, x_p^j) \quad (12)$$

$$\varphi_p^{j,V} = f(T_p, P, y_p^j) \quad (13)$$

Onde $\varphi_p^{j,L}$ é o coeficiente de fugacidade do componente j na fase líquida do prato p e $\varphi_p^{j,V}$ é o coeficiente de fugacidade do componente j na fase vapor do prato p . O coeficiente de

fugacidade é função da temperatura, pressão e composição e será calculado através de rotinas externas.

Para o nosso estudo posterior, foi necessária a modelagem dos tanques acumuladores dos cortes. As variáveis de interesse nestes equipamentos são somente a quantidade e a composição do corte. Por isso, modelou-se o sistema da maneira reduzida, através do seguinte integrador:

$$\frac{dD_{ta}^j}{dt} = D \cdot x_{N+1}^j \cdot s_{ta} \quad j=1, 2, \dots, C-1 \quad (14)$$

Onde D_{ta}^j é o acúmulo de destilado do componente j no tanque ta e s_{ta} é a chave de acionamento do mesmo. A variável auxiliar s_{ta} é zero quando o tanque não está sendo alimentado e 1 quando está recebendo alimentação. A composição e o acúmulo total foram expressados da seguinte forma:

$$x_{ta}^j = \frac{D_{ta}^j}{\sum_{j=0}^c D_{ta}^j} \quad (15)$$

$$Dt_{ta} = \sum_{j=0}^c D_{ta}^j \quad (16)$$

Onde x_{ta}^j é a composição do componente j no tanque ta e Dt_{ta} é o acúmulo molar global no tanque. Ao todo foram modelados quatro tanques acumuladores, para os seguintes cortes: *Off-Cut* dos componentes leves, *Off-Cut*, Corte Intermediário e Corte principal.

Um dos parâmetros utilizado no estudo é a energia total consumida no processo. Então, faz-se necessário a sua determinação, que é realizada através de um integrador energético, mostrado na equação:

$$\frac{dV_t}{dt} = V \quad (17)$$

Onde V_t é número total de mols vaporizados. As condições iniciais para as variáveis diferenciais tanto do tanque, quanto do integrador energético, são todas iguais a zero.

Para a simulação do sistema, foram inseridos dois tipos de controles: um tipo liga-desliga e um proporcional. O controle liga-desliga foi implementado para a determinação do modo de operação da coluna - *Off-cut* dos componentes leves, *Off-cut*, Corte Intermediário, entre outros. O modo de operação da coluna determina dois fatores: a seleção do tanque para a retirada de destilado e a razão de refluxo. A variável controlada é a composição no condensador. Caso a composição de um componente excede o valor máximo ou mínimo permitido para um determinado corte, tem-se uma mudança no modo de operação da coluna.

Já o controle proporcional foi adaptado para a determinação de uma política de operação otimizada. O controlador proporcional regula a composição do destilado no tanque acumulador manipulando a razão de refluxo. A ação de controle é reversa, pois uma diminuição da pureza acarreta um aumento do refluxo. O equacionamento dos controles pode ser visto no Apêndice 1.

3.3 Simulação

O modelo do processo foi implementado no simulador genérico de processos EMSO (Soares; Secchi, 2003). EMSO é a sigla para *Environment for Modeling, Simulation and Optimization*. Trata-se de um simulador de processos orientado a equações, adequado a simulações dinâmicas.

3.3.1 Parâmetros da Simulação

O modelo utilizado no caso base de Klingberg (2000) apresenta algumas diferenças em relação ao utilizado nesse trabalho. Além disso, muitos dos parâmetros utilizados no trabalho original não foram explicitados. Portanto, alguns dos parâmetros para a simulação tiveram que ser aproximados e estimados. São eles: carga inicial no refeedor, acúmulo molar de líquido nos pratos e condensador, taxa de vaporização e composição da carga.

A única informação sobre a carga inicial encontrada no trabalho foi o nível inicial do refeedor – 1 metro. Então, sabendo-se que o diâmetro da coluna é 1 metro, estimou-se o diâmetro do refeedor em 5 metros. A partir desse volume inicial, utilizando-se do volume molar da mistura líquida calculado pelo pacote termodinâmico VRTherm, chegou-se no valor aproximado de 59 Kmol.

O acúmulo molar de líquido nos pratos, por sua vez, foi determinado levando-se em conta o diâmetro da coluna -1 m. A altura do vertedouro foi estimada em 0,1 m e a área do prato tomada como 80% a área da coluna. Com o volume molar, aproximou-se o acúmulo molar de líquido no prato para 190 mol. O acúmulo no condensador foi considerado igual ao dos pratos.

Já a taxa de vaporização, constante no nosso modelo e variável no trabalho base, foi o parâmetro mais difícil de estimar e com a maior incerteza. Os únicos dados disponíveis eram a razão de refluxo em cada intervalo de tempo, o tempo total e a quantidade de destilado. Sendo assim, calculou-se a razão de refluxo média e tomou-se a seguinte relação expressa na Equação 5 para estimar a taxa de vaporização média em 4485 mol/h.

Um resumo dos parâmetros estimados pode ser visto na Tabela 1. Diferentemente do trabalho utilizado como base, a publicação destes parâmetros permitirá a reprodução do presente trabalho por outros autores.

Tabela 1 - Parâmetros da simulação.

Parâmetro	Valor
Carga inicial no Refevedor (mol)	59000
Acúmulo molar de líquido nos pratos e condensador (mol)	190
Taxa de vaporização média (mol/h)	4485

A pressão na coluna foi considerada constante e igual a 1 atm. A consideração de uma queda de pressão geraria resultados muito similares. Além disso, a coluna foi assumida com 20 pratos. Como estágios de equilíbrio do modelo são considerados ideais, era necessário uma redução significativa nesse número, para aproximarmos o comportamento real da coluna.

A mistura original do processo possui 30 componentes. Para fins de simulação e simplificação, porém, foram tomados apenas os 10 mais representativos constituintes e a composição normalizada. A composição simplificada é mostrada na Tabela 2.

Tabela 2 - Composição da mistura utilizada na simulação.

Componente	Fração Molar (%)
C1	0,12
C2	0,01
C4	9,75
C10	66,05
C11	0,70
C12	1,35
C13	0,31
C20	15,69
C21	0,92
C28	5,10

3.3.2 Determinação das condições iniciais

Conforme descrito anteriormente, o procedimento de partida de colunas batelada envolve, geralmente, operação em refluxo total até a obtenção do estado estacionário. Uma vez alcançado este estacionário, é iniciada a retirada de destilado. A simulação precisa do

procedimento de partida, porém, não faz parte deste trabalho. Entretanto, as condições iniciais das simulações serão obtidas da solução do estado estacionário do refluxo total. Como esse estado independe de como ele foi atingido, utilizou-se de um artifício matemático para a sua obtenção. As composições iniciais, tanto nos pratos, quanto no refeedor e no condensador, foram tomadas como iguais às da mistura a ser separada – Tabela 2. Então, simulou-se a coluna em refluxo total, até atingir o estado estacionário. O perfil de temperatura dos pratos da condição inicial até o estado estacionário pode ser visto na Figura 8.

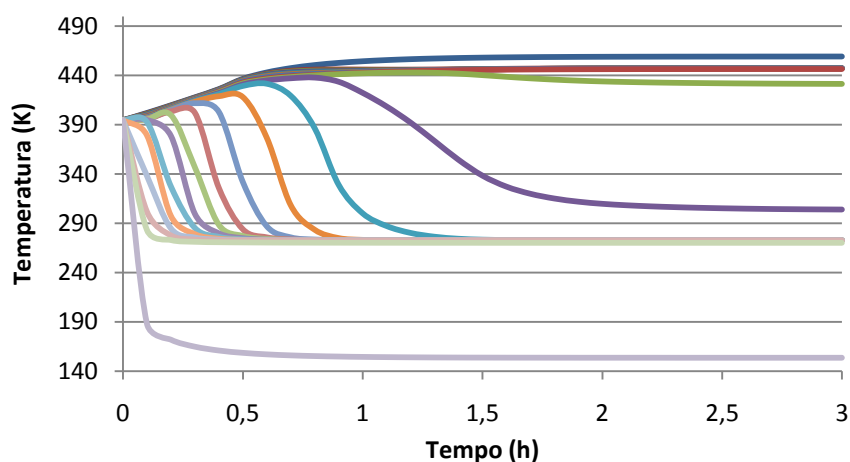


Figura 8 – Perfil de temperatura da condição inicial até o estado estacionário.

As condições desse estado estacionário foram assumidas como condições iniciais das simulações dinâmicas das bateladas. Uma análise mais detalhada dessas condições, é realizada no capítulo seguinte.

3.3.3 Propriedades físicas e termodinâmicas

As propriedades físicas termodinâmicas foram determinadas através de rotinas externas ao simulador EMSO. O aplicativo de *software* usado foi o VRTherm (VRTECH, 2005), capaz de prever propriedades termodinâmicas e propriedades físicas de misturas complexas. Para o cálculo das propriedades, foram escolhidos os modelos de vapor e líquido ideal. Esse modelo é adequado para a predição, pois estamos trabalhando com uma mistura de hidrocarbonetos a altas temperaturas e baixa pressão, ou seja, dentro da faixa de validade.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados das simulações são apresentados neste capítulo. Primeiramente, analisaremos os resultados da operação a refluxo total, cujo estado estacionário é o ponto de partida para as demais simulações. Após isso, serão mostrados e comparados os resultados de três políticas de operação. Por fim, será avaliada a influência do acúmulo de líquido no desempenho da coluna.

4.1 Estado estacionário do refluxo total

Os perfis de temperatura e composição da coluna operando no estado estacionário são apresentados na Figura 9. Podemos perceber que a mistura se encontra bem separada, havendo um predomínio de C4 na parte superior da coluna e um acúmulo de C10 na metade inferior. Um dos motivos para este resultado é a grande diferença de volatilidade entre o C4 e o C10.

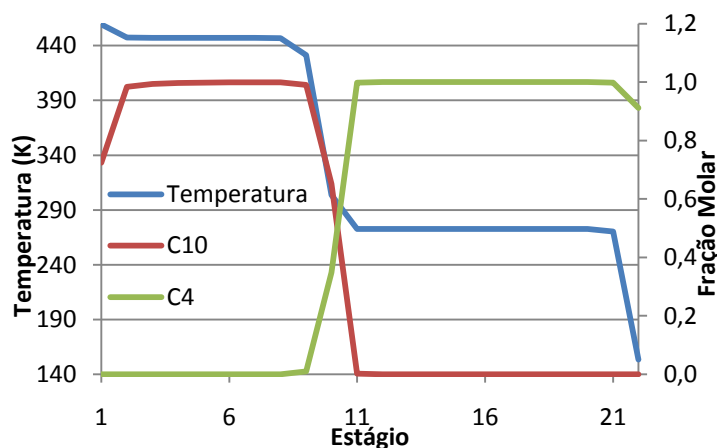


Figura 9 – Perfis de temperatura e composição da coluna no estado estacionário a refluxo total.

Outro ponto que chama a atenção é o perfil de temperatura. Há dois patamares nítidos e distantes. Isso é decorrente da natureza do nosso modelo, que calcula o perfil de temperatura a partir das composições. Por exemplo, como na metade superior há quase que somente C4, as temperaturas desses estágios se aproximam do seu ponto de ebulição. Além disso, notamos que a temperatura no condensador é baixa e distante de uma condição real. Essa temperatura é consequência da consideração de condensador total. Como há frações de C1 e C2 no vapor a ser condensado, podemos esperar uma temperatura próxima aos pontos de ebulição destes compostos.

4.2 Avaliação das políticas de operação

A comparação de diversas políticas de operação de uma coluna e a determinação da melhor é, também, objetivo desse trabalho. Para isso, foram simuladas três distintas políticas de operação: heurística, a refluxo constante e com o uso de controlador. As variáveis de interesse foram o tempo total da batelada, o custo energético, grau de pureza e a quantidade de destilado. Os resultados de cada simulação, assim como a comparação, encontram-se a seguir.

4.2.1 Política de operação heurística

A política heurística é a estratégia tradicional usada para operar a coluna do nosso trabalho base. Ela foi formulada e ajustada através dos anos de experiência na utilização da coluna para a separação da mistura em questão. Esse modo de operação consiste em diferentes estágios, cada qual com uma razão de refluxo diferente, e está apresentado na Tabela 3.

Tabela 3 - Política de operação heurística.

Estágio de operação	Razão de Refluxo
<i>Off-Cut</i> dos componentes leves	5
<i>Off-Cut</i>	5
Corte Intermediário	10
Corte Principal	5 nas primeiras 10h e 8 no restante

O modo de operação foi implementado e simulado e o perfil de composição do destilado encontra-se na Figura 10. Esse perfil de composição é semelhante ao encontrado no trabalho de Klingberg (2000), o que valida qualitativamente o modelo desenvolvido neste trabalho.

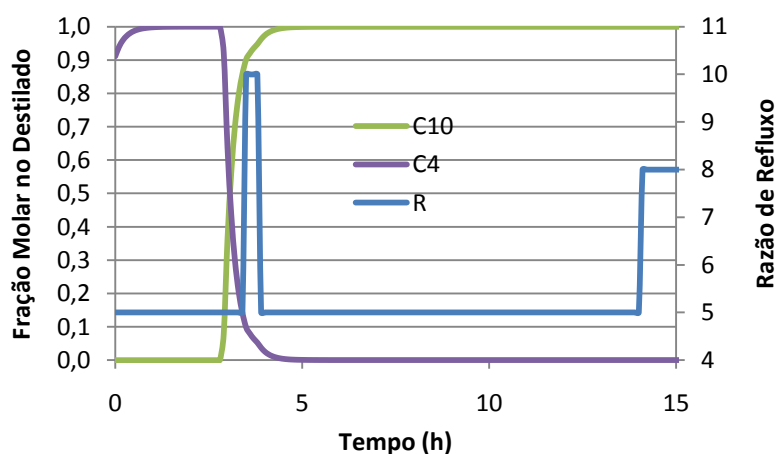


Figura 10 – Variação da composição do destilado e da razão de refluxo no tempo.

A simulação dessa estratégia resultou nos seguintes valores, apresentados na tabela abaixo:

Tabela 4 - Resultados da política heurística.

Variável	Resultado
Tempo total (h)	84,10
Custo energético (mol vap.)	377224
Grau de Pureza (%)	99,92
Quantidade de Destilado (mol)	42563

4.2.2 Política de operação de refluxo constante

Uma política de operação muito utilizada na indústria é a política a refluxo constante. Para avaliarmos o desempenho de um modo de operação deste tipo, foi simulada uma operação com razão de refluxo igual a 8, do início ao fim da batelada. Na Figura 11, são reproduzidos o perfil de composição e a razão de refluxo nas primeiras 15 horas de operação.

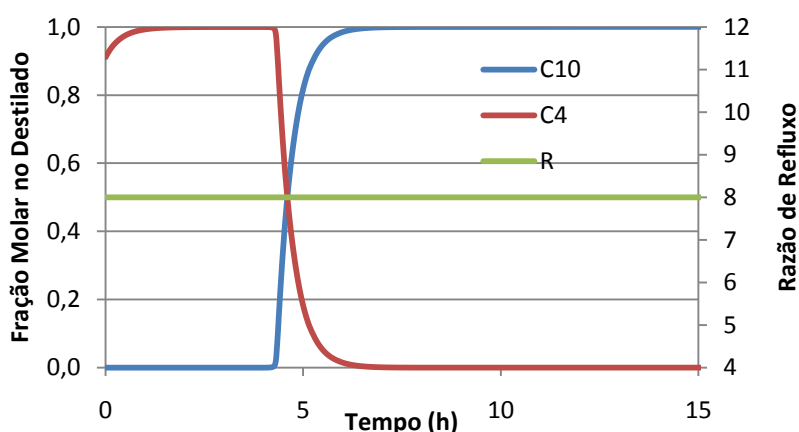


Figura 11 – Variação da composição do destilado e da razão de refluxo no tempo.

Encontram-se apresentados, na Tabela 5, os valores obtidos nessa simulação.

Tabela 5 - Resultados da política de refluxo constante.

Variável	Resultado
Tempo total (h)	91,22
Custo energético (mol vap.)	409150
Grau de Pureza (%)	99,92
Quantidade de Destilado (mol)	42720

4.2.3 Política de operação com controlador

Para otimizar a operação da coluna, foi proposto nesse trabalho a implementação de um controlador proporcional. O tipo de ação de controle escolhida é adequado ao sistema, pois este apresenta um pequeno tempo morto (FILETTI, 1993) e possui comportamento de um integrador. A variável controlada é a fração molar de C10 no tanque acumulador do corte principal e a manipulada é a razão de refluxo. O ganho do controlador K foi tomado como 20, o *setpoint* definido em 0,99 e o *bias* em 5.

Os perfis resultantes de composição de destilado e razão de refluxo são apresentados na Figura 12.

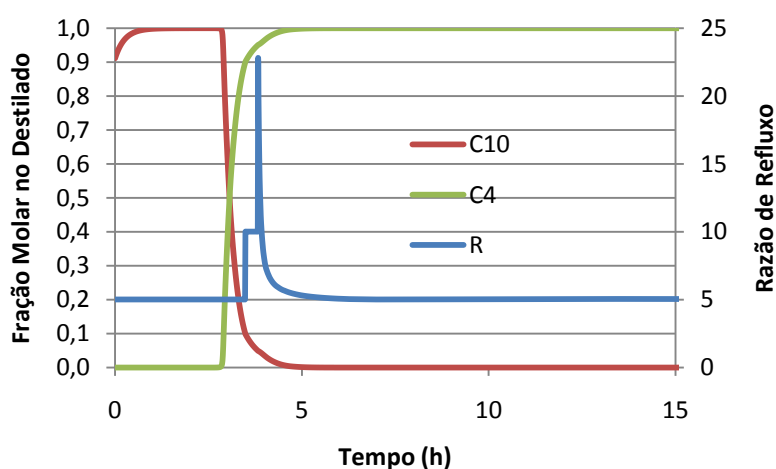


Figura 12 – Variação da composição do destilado e da razão de refluxo no tempo.

Os resultados das variáveis de interesse, para posterior comparação, são listados na Tabela 6.

Tabela 6 - Resultados da política com controlador.

Variável	Resultado
Tempo total (h)	59,50
Custo energético (mol vap.)	266993
Grau de Pureza (%)	99,92
Quantidade de Destilado (mol)	42727

4.2.4 Comparação das políticas

Para determinarmos a melhor estratégia de operação, iremos comparar os diferentes critérios de interesse. Nessas comparações, a heurística será sempre tomada por base. Visando uma melhor visualização, as diferentes estratégias de refluxo são apresentadas na Figura 13.

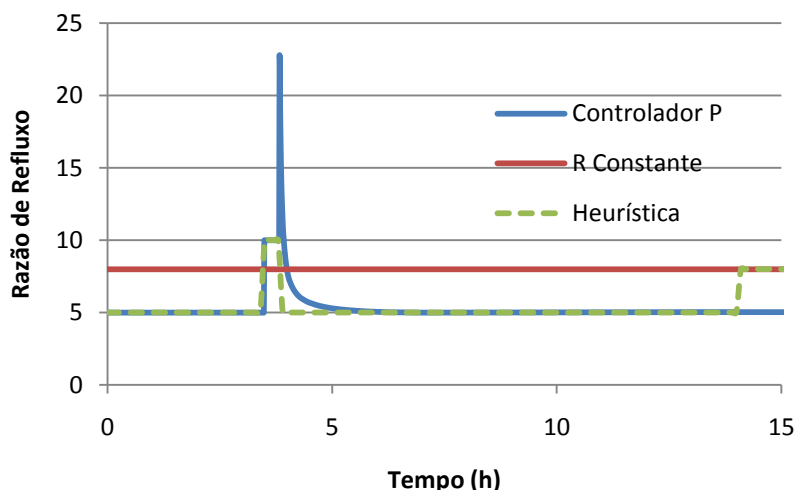


Figura 13 – Comparação das estratégias de operação.

O primeiro ponto a ser abordado é a questão da pureza do corte, pois esta é uma especificação comercial. De nada adianta produzir em menos tempo e com menos gasto energético, se este critério não for respeitado. Os resultados das simulações mostram que o grau de pureza foi superior ao limite especificado – 99% - e igual para todas as estratégias de operação, atingindo o valor de 99,92%. A razão desses valores constantes reside no controle de seleção do tanque acumulador. O destilado só foi escoado para o tanque do corte principal, quando a fração molar de C10 atendia o limite mínimo de pureza.

A quantidade de destilado recuperada no corte principal, por sua vez, é outro importante critério econômico que deve ser estudado. Ela também foi praticamente igual em todas as simulações. A estratégia a refluxo constante apresentou um aumento de 0,4% e a estratégia com controlador um ganho de 0,45% em relação à heurística. Dada as simplificações do modelo, tais diferenças não podem ser consideradas significativas. Portanto, verifica-se que a quantidade de destilado não foi alterada pela estratégia de operação.

Já o tempo total de batelada e o custo energético serão tratados conjuntamente. O custo energético é proporcional à quantidade de mols evaporados. Como a taxa de vaporização é constante, o custo energético e o tempo total de batelada são, também, proporcionais. Assim, uma diminuição no tempo de batelada gera uma queda no custo energético. As simulações mostram que a estratégia a refluxo constante teria um custo energético 8,5% maior que a heurística. A estratégia com controlador apresentou uma redução de 29,2% no tempo total e, por conseguinte, no custo energético. O melhor desempenho nesse quesito foi, portanto, o da estratégia com controlador.

Sendo assim, concluímos que a melhor política estudada foi a com controlador, pois esta reduziu consideravelmente o custo energético, sem afetar o rendimento de destilado e o grau de pureza. Porém, devem ser feitas algumas ressalvas em relação a essa conclusão.

O grau de separação atingido foi muito maior ao encontrado em uma coluna real. Isso é devido a diversos fatores, advindos das simplificações do modelo. Cada estágio foi considerado em equilíbrio ideal, o que distancia a simulação da realidade. A escolha dos modelos termodinâmicos ideais também insere um erro no modelo. Além disso, as simplificações referentes ao acúmulo de líquido no prato e às vazões internas influenciam fortemente a transferência de massa, e conseqüentemente a separação dos constituintes da mistura.

Notamos ainda, que a estratégia com controlador requer um pico de razão de refluxo que pode não ser factível fisicamente. Entretanto, como o alto valor de razão de refluxo foi utilizado por um curto espaço de tempo, haveria apenas um pequeno impacto se este valor fosse limitado.

4.3 Influência do acúmulo de líquido

O acúmulo de líquido na coluna influencia o seu desempenho. Para analisar essa influência, simulamos situações de acúmulo de líquido na coluna, numa faixa de 2 a 25% em relação à carga inicial – o acúmulo original da nossa coluna é 6,5%. O grau de pureza e a quantidade final de produto foram mantidos constantes, sendo o tempo de batelada a variável de comparação. Os resultados para as três políticas em estudo nesse trabalho são mostrados na Figura 14.

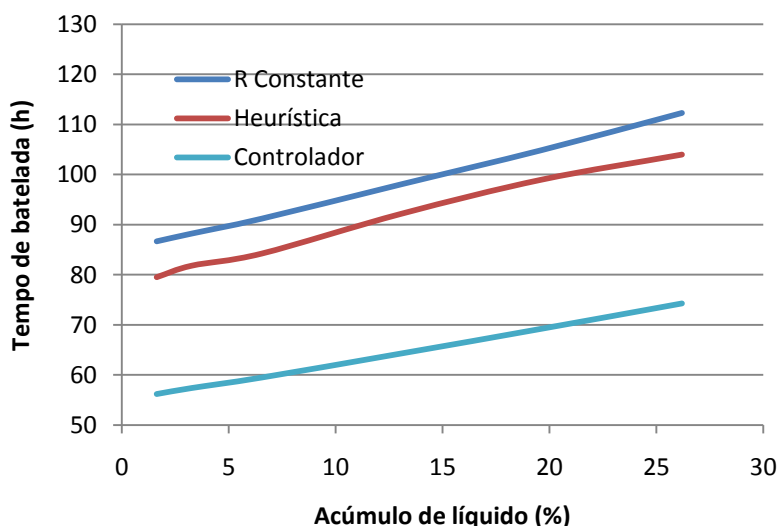


Figura 14 – Efeito do acúmulo de líquido na coluna no tempo de batelada.

Podemos notar que há um aumento linear do tempo de batelada como o aumento do acúmulo de líquido na coluna para todas as políticas. O efeito verificado é, portanto, prejudicial ao desempenho da planta. Esse resultado se aproxima com o apresentado por Converse e Huber (1965).

Como explicação para este resultado, temos que o acúmulo de líquido comanda diretamente a dinâmica do sistema, o que pode ser visto no nosso modelo. Além disso, para misturas de fácil separação, ou seja, que não necessitam de muita interface para a transferência de massa, é esperado esse efeito negativo.

5 CONCLUSÃO

A destilação em batelada encontra muitas aplicações industriais. Mesmo tendo sido considerada ultrapassada pelo surgimento da destilação contínua, verificamos que a grande flexibilidade de operação torna seu uso vantajoso.

Através de uma revisão bibliográfica, verificamos que existem vários modelos que descrevem o processo de destilação em batelada. Desde modelos mais sofisticados, que utilizam dinâmica de fluidos computacional até correlações simples. Um modelo de complexidade intermediária foi utilizado neste trabalho e implementado no simulador EMSO. As respostas obtidas com este modelo ficaram dentro do esperado e se aproximaram bastante da resposta de um modelo um pouco mais elaborado. Portanto, notamos que a utilização de uma modelagem muito rigorosa, nem sempre se faz necessária.

Dado o caráter dinâmico desse processo, vimos que a operação de uma coluna de destilação em batelada representa um desafio. Constatamos que há diversas políticas de operação, porém a determinação da melhor ainda é motivo de pesquisas. Nesse contexto, a simulação dinâmica de processos encontra aplicação.

Simulamos e comparamos três diferentes políticas de operação em uma coluna de destilação descrita na literatura. Os resultados mostraram que uma redução de 29,5% no tempo de batelada e no custo energético pode ser obtida com uma política de operação que usa um controlador, em relação a uma operação baseada apenas em experiência prévia - heurística. Assim como nesse caso, o modo de operação tradicional de qualquer processo na indústria pode não ser o mais adequado. Verificamos, então, uma grande oportunidade para a otimização de processos e redução de custos industriais utilizando-se da simulação.

Além disso, o efeito do acúmulo de líquido no desempenho de colunas de destilação batelada é assunto recorrente e controverso na literatura. Constatamos que, para o caso em questão, um aumento no acúmulo de líquido resulta em uma elevação no tempo de batelada, dada uma especificação de pureza e quantidade de produto. O resultado foi consoante com os resultados encontrados na literatura para uma mistura de fácil separação.

Para trabalhos futuros, propomos a simulação deste problema, através de uma modelagem rigorosa aplicado ao estudo de misturas com maiores desvios da idealidade. Além disso, a otimização da política de operação pode ser obtida utilizando-se algoritmos de otimização dinâmica. A modelagem e implementações desses algoritmos também é uma proposta para próximos trabalhos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BONNY, L. et al. *Optimal strategies for batch distillation campaign of different mixtures*. Chemical Engineering and Processing, v. 35, p. 349-36, 1996.
- BRASIL, A. B. *Análise dos Parâmetros Operacionais para o Projeto Ótimo de Colunas de Destilação em Batelada Multicomponente*. Dissertação - Universidade Estadual de Campinas, 1993.
- DIWEKAR, U. M. et al. *Optimal reflux rate policy determination for multicomponent batch distillation columns*. Computers and Chemical Engineering, v. 11, p. 629–637, 1987.
- DOMENECH, S.; ENJALBERT, M. *Program for Simulating Batch Rectification as a Unit Operation*. Computer and Chemical Engineering, v.5, p. 181, 1981.
- FILETI, A. M. F. *Estratégias de Controle em Destilação em Batelada*. Dissertação - Universidade Estadual de Campinas, 1993.
- KLINGBERG, A. *Modelling and Optimisation of Batch Distillation*. Dissertação - Lund Institute of Technology, 2000.
- LONGSDON, J. S.; BIEGLER, L. T. *Accurate Determination of Optimal Reflux Policies for the Maximum Distillate Problem in Batch Distillation*. Industrial and Engineering Chemistry Research, v.32, p. 692-700, 1993.
- MUTJABA, I.M. *Batch Distillation: Design and Operation*. 1 ed. Londres. Imperial College Press, 2004. 393 p.
- PERRY, H.R.; GREEN, D.W. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 7 ed. McGraw-Hill, 1999.
- POMMIER, S.; MASSEBEUF, B. *Heterogeneous batch distillation processes: Real system optimization*. Chemical Engineering and Processing, v.47, p.408–419, 2008.

ANEXOS

Anexo 1 - Codificação do modelo na linguagem do simulador EMSO

```

Model BatchColumn
PARAMETERS
outer PP as Plugin(Brief="Physical Properties", Type="PP");
outer NComp as Integer;
PARAMETERS
  Np as Integer(Brief="Number of Plates");
  purity as Real;
  Hi as Real;
  P as pressure;
VARIABLES
  H0 as Real(Default=1);
  x(NComp,Np+1) as Real(Default=0.55, Lower = -1e-6, Upper = 1.00001);
  y(NComp,Np+1) as Real(Default=0.3, Lower = -1e-6, Upper = 1.00001);
  T(Np+1) as temperature;
  R as Real(Default=1);
  V as Real;
  D as Real;
  Dlo(NComp) as Real;
  Dlot as Real;
  xDlo(NComp) as Real;
  Do(NComp) as Real;
  Dot as Real;
  xDo(NComp) as Real;
  Di(NComp) as Real;
  Dit as Real;
  xDi(NComp) as Real;
  Dm(NComp) as Real;
  Dmt as Real;
  xDm(NComp) as Real;
  slo as Real;
  so as Real;
  si as Real;
  sm as Real;
  sq as Real;
  Q as Real;
  c as Real;
  Qt as Real;
EQUATIONS
  "Balanço global da coluna"
  diff(H0)*'s' = -D;
  "Retirada de destilado"
  D = V/(R+1);
  for i in [1:NComp-1] do
    "Balanço por componente no refeededor"
    diff(x(i,1))*'s' = V/H0 * (x(i,1)-y(i,1) + R * ((x(i,2) -
x(i,1))/(R+1)));
    "Balanço demais pratos"
    diff(x(i,2:Np))*'s' = V/Hi * (y(i,1:Np-1) - y(i,2:Np) +
      (R * ( x(i,3:Np+1) - x(i,2:Np) ) / (R+1)));
    "Balanco do condensador"
    diff(x(i,Np+1))*'s' = V * ( y(i,Np) - x(i,Np+1) )/Hi;
  end

  for j in [1:Np+1] do
    "Metodo phi-phi"
    y(:,j)*PP.VapourFugacityCoefficient(T(j),P,y(:,j)) =

```

```

        x(:,j)*PP.LiquidFugacityCoefficient(T(j),P,x(:,j));
    end
    for i in [1:NComp] do
        "Tanques Acumuladores: Light off-cut"
        diff(Dlo(i))*'s'= D*x(i,Np+1)*slo;
        xDlo(i)=Dlo(i)/sum(Dlo(:));
        "Off-cut"
        diff(Do(i))*'s'= D*x(i,Np+1)*so;
        xDo(i)=Do(i)/sum(Do(:));
        "Intermediate cut"
        diff(Di(i))*'s'= D*x(i,Np+1)*si;
        xDi(i)=Di(i)/sum(Di(:));
        "Main cut"
        diff(Dm(i))*'s'= D*x(i,Np+1)*sm;
        xDm(i)=Dm(i)/sum(Dm(:));
    end
    Dlot=sum(Dlo(:));
    Dot=sum(Do(:));
    Dit=sum(Di(:));
    Dmt=sum(Dm(:));
    "Consumo energético"
    V=Q*c;
    diff(Qt)*'s' = V*sq;
    for j in [1:Np+1] do
        sum(y(:,j)) = 1;
        sum(x(:,j)) = 1;
    end
end
FlowSheet batch
PARAMETERS
PP as Plugin(Brief="Physical Properties",
    Type="PP",
    Components = ["methane","ethane","n-butane",
        "n-decane","n-undecane","n-dodecane","n-tridecane",
        "n-eicosane", "n-heneicosane", "n-octacosane"],
    LiquidModel = "IdealLiquid", VapourModel = "Ideal"
);
NComp as Integer;
Chave as Switcher ( Valid=["Light", "Off","Inter", "Main", "Heavy"],
Default="Light");
SET
NComp = PP.NumberOfComponents;
VARIABLES
K as Real (Brief="Controller Constant");
xsetm as Real;
bias as Real;
DEVICES
bc as BatchColumn;
SET
bc.Np = 21;
bc.P = 760 * 'mmHg';
bc.Hi = 190*1;
SPECIFY
bc.Q=4485/2;
bc.c=2;
bias=5;
K=10;
xsetm = 0.99;
EQUATIONS
switch Chave
    case "Light":

```

```

bc.slo=1;
bc.so=0;
bc.si=0;
bc.sm=0;
bc.R=5;
bc.sq=1;
when bc.x(3,22) < .66 switchto "Off";
case "Off":
bc.slo=0;
bc.so=1;
bc.si=0;
bc.sm=0;
bc.R=5;
bc.sq=1;
when bc.x(4,22) > .9 switchto "Inter";
case "Inter":
bc.slo=0;
bc.so=0;
bc.si=1;
bc.sm=0;
bc.R=10;
bc.sq=1;
when bc.x(4,22) > .95 switchto "Main";
case "Main":
bc.slo=0;
bc.so=0;
bc.si=0;
bc.sm=1;
bc.R=K*(xsetm-bc.xDm(4))+bias;
bc.sq=1;
when bc.x(4,22) < .95 switchto "Heavy";
case "Heavy":
bc.slo=0;
bc.so=0;
bc.si=0;
bc.sm=0;
bc.R=5;
bc.sq=0;
when bc.x(8,22) > 1 switchto "Off";
end
OPTIONS
TimeStep = .1;
TimeEnd = 100;
TimeUnit = 's';
InitialFile = "batch20_10comp.rlt";
Integration = "original";
DAESolver(
    File = "dasslc",
    RelativeAccuracy = 1e-4,
    AbsoluteAccuracy = 1e-8
);
end

```