

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Energia Requerida para a Separação como
Ferramenta de Otimização Operacional e
Controle de Colunas de Destilação**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

GUSTAVO HENRIQUE MÜLLER

Porto Alegre

2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Energia Requerida para a Separação como Ferramenta de Otimização Operacional e Controle de Colunas de Destilação

GUSTAVO HENRIQUE MÜLLER

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de
Mestre em Engenharia

Área de concentração: Controle de Processos

Orientadores:

Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Prof. Dr. Eng. Pedro Rafael Fernandes

Porto Alegre

2012

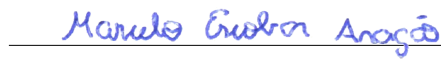
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Energia Requerida para a Separação como Ferramenta de Otimização Operacional e Controle de Colunas de Destilação*, elaborada por Gustavo Henrique Müller, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:



Dr. Luís Gustavo Longhi



Dr. Marcelo Escobar



Prof. Dr. André Muniz

Agradecimentos

O primeiro agradecimento eu faço ao Prof. Dr. Jorge Trierweiler. A sua orientação e motivação durante todo este tempo foram muito importantes para a finalização deste projeto. O seu entusiasmo e disposição são motivos de inspiração para mim.

Agradeço ao Prof. Dr. Eng. Pedro Fernandes de quem eu tive o prazer de ser colega de trabalho e com quem continuo aprendendo.

Agradeço à TriSolutions por proporcionar a realização desse trabalho. Sou muito feliz por fazer parte desta família.

Agradeço à Engenheira Química Carolina Kornelius pela oportunidade de retomar este trabalho e aplicá-lo em um caso real.

À minha família. Meus amores.

À minha Crika por encher meu mundo de cores.

Resumo

Com o aumento da competitividade no mercado nos últimos anos, a busca por alternativas que permitam a redução dos custos de produção tem sido constante. Este fato, aliado aos custos crescentes da energia e a preocupação cada vez maior com o impacto ambiental dos processos, tornam indispensável o controle e o aumento da eficiência dos mesmos, assim como o maior aproveitamento possível da energia.

No presente trabalho, uma nova metodologia para a otimização da eficiência energética em colunas de destilação é proposta. A partir de uma simulação estacionária de um processo de separação, desenvolvida em Aspen Plus[®], e validada com dados do processo real, foram obtidos modelos empíricos de curvas de operação baseadas na energia requerida para atingir a especificação dos produtos.

A metodologia proposta foi avaliada no estudo de caso de uma coluna de separação de benzeno, tolueno e xileno (*BTX*). Com o modelo de energia requerida identificado para o processo, duas condições operacionais distintas do processo real foram avaliadas com relação à sua eficiência. A partir da redução na vazão de vapor no refeedor, verificou-se um aumento na eficiência energética do processo de 75 para cerca de 100%, indicando a operação muito próxima do ponto ótimo.

Para avaliar a utilização do modelo de energia requerida no controle de processos, duas estratégias alternativas foram propostas a partir de uma simulação dinâmica da unidade, desenvolvida em Aspen Dynamics[®]. A configuração de bloco de cálculo em conjunto com um controlador de composição apresentou o melhor desempenho entre as configurações avaliadas. A utilização do modelo permite que apenas a energia requerida seja efetivamente utilizada, enquanto que o controle de composição garante a especificação do produto de topo nestas situações. Com esta configuração, seria possível obter um incremento na vazão desta corrente da ordem de 92 t/ano a partir da incorporação de inertes.

Abstract

With the competitive and global business environment, the search for opportunities to reduce the production costs has been constant. This fact associated with higher energy costs and the concern about the environmental impact of the processes, makes it essential to control and increase their efficiency.

In this work, a new methodology for optimizing the energy efficiency in distillation columns is proposed. From a steady state simulation of a separation process, implemented in Aspen Plus[®] and validated against process data, models for the required energy were obtained.

The methodology was evaluated for a case study of a benzene, toluene and xylene separation column (*BTX*). With the required energy model identified, two distinct operational conditions of the real process were evaluated regarding their efficiency. After a vapor flow reduction in the reboiler, there was an increase in process efficiency from 75% to about 100, indicating the operation condition very close to the optimum.

To evaluate the use of the energy required model in process control, two strategies were proposed from a dynamic simulation of the process in Aspen Dynamics[®]. The configuration of a calculation block along with a composition controller showed the best performance among the alternatives tested. The use of the model allows only the required energy to be used, whereas the composition control ensures the top product specification in these situations. With this configuration, it would be possible to obtain an increase in the product flow of 92 t/year.

Simbologia e Nomenclatura

a, b, c, d, e	Parâmetros dos modelos de energia requerida
a', b'	Parâmetros do ajuste linear de a, b, c, d, e
B	Vazão total de produto de fundo da coluna de destilação
C_1	Condição original do processo BTX
C_2	Condição de menor vazão de vapor do processo BTX
C_3	Condição com bloco de cálculo de eficiência implementado no processo BTX
D	Vazão total de produto de topo da coluna de destilação
D_R	Coefficiente de distribuição do componente nos produtos da coluna de destilação
E	Constante neperiana
Ex^{loss}	Perda total de exergia em um processo de separação
F	Vazão total de alimentação na coluna de destilação
F_0	Vazão de alimentação sem levar em conta as vazões de benzeno, tolueno e xileno
F_j	Vazão total de alimentação no estágio j
F_i	Vazão de alimentação do componente i
H_{ij}	Entalpia do líquido do componente i no estágio de equilíbrio j
h_f	Entalpia da corrente de alimentação
$h_{v,sat}$	Entalpia do vapor saturado
K_i	Constante de equilíbrio líquido-vapor do componente i
K_P	Ganho proporcional do controlador
L	Vazão de refluxo no topo da coluna de destilação
L_i	Vazão de líquido em equilíbrio que deixa o estágio i
L_{min}	Vazão mínima de refluxo no topo da coluna de destilação
m	Vazão de vapor no refeedor da coluna de destilação
n	Referência do número do estágio na coluna de destilação
N	Número total de pratos da coluna de destilação
N_A	Número de raízes de Underwood ativas
N_C	Número total de componentes na mistura
N_D	Número de componentes distribuídos nos produtos na coluna de destilação
N_F	Número do prato de alimentação da coluna de destilação
P	Pressão total do sistema
P_i	Pressão de saturação do componente i
q	Fração vaporizada da corrente de alimentação
Q_C	Calor removido no condensador na coluna de destilação

Q_R	Calor fornecido ao refeedor na coluna de destilação
Q_R	Bloco de cálculo da energia requerida
r_i	Recuperação do componente i no topo da coluna
RR	Razão de refluxo no topo da coluna de destilação
R^2	Coefficiente de correlação entre dois conjuntos de dados
SP	Valor de referência (<i>setpoint</i>) do controlador
T	Temperatura de equilíbrio do sistema
T_D	Constante de tempo derivativo do controlador
T_I	Constante de tempo integral do controlador
V	Vazão de vapor no topo da coluna de destilação
V_i	Vazão de vapor em equilíbrio que deixa o estágio i
V_{min}	Vazão vaporizada mínima no fundo da coluna de destilação
w_i	Vazão resultante do componente i entre duas correntes
W_{min}	Trabalho mínimo requerido pela separação
x	Variável do modelo de energia requerida (especificação do produto)
x_{esp}	Especificação do produto de topo da coluna de destilação
x_i	Fração do componente i no líquido em equilíbrio
y	Variável do modelo de energia requerida (fração de benzeno na alimentação)
y_i	Fração do componente i no vapor em equilíbrio
z	Variável do modelo de energia requerida (fração de tolueno na alimentação)
z_i	Fração do componente i na alimentação

Símbolos Gregos

α_{ij}	Volatilidade relativa do componente i em relação ao j
ΔH_j	Varição de entalpia no estágio j pela adição ou remoção de calor
ΔH^{vap}	Entalpia de vaporização da mistura
ϕ	Raiz de Underwood na seção de esgotamento da coluna de destilação
Φ_i	Coefficiente de fugacidade do componente i
γ_i	Coefficiente de atividade do componente i
η	Índice de eficiência energética da coluna de destilação
η_{exe}	Eficiência exergética de um processo de separação
λ	Calor latente do vapor do refeedor na coluna de destilação
θ	Raiz comum de Underwood na coluna de destilação
ψ	Raiz de Underwood na seção de retificação da coluna de destilação

Abreviaturas

<i>BTX</i>	Coluna de separação benzeno, tolueno e xileno
<i>DWC</i>	Colunas de destilação divididas por parede (<i>Dividing Wall Columns</i>)
<i>NRTL</i>	Modelo para cálculo de propriedades termodinâmicas (<i>Non Random Two Liquid</i>)
<i>PID</i>	Controlador proporcional, integral e derivativo
<i>RGA</i>	Matriz de ganhos relativos
<i>RPN</i>	Número de desempenho robusto

Sumário

Capítulo 1 Introdução.....	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Estrutura da Dissertação.....	3
Capítulo 2 Revisão Bibliográfica.....	5
2.1 Destilação.....	5
2.2 Colunas de Destilação.....	5
2.2.1 Modelagem da Coluna.....	7
2.2.1.1 Equação de equilíbrio.....	8
2.2.1.2 Restrição das frações molares.....	9
2.2.1.3 Balanço material.....	10
2.2.1.4 Balanço de energia.....	10
2.2.2 Sistema binário.....	10
2.3 Cálculo da Energia Mínima para a Separação.....	13
2.3.1 Método de Underwood.....	14
2.3.2 Outros métodos.....	16
2.3.2.1 Diagramas V_{min}	17
2.4 Controle de Colunas de Destilação.....	19
2.4.1 Graus de liberdade.....	19
2.4.2 Controle de composição.....	21
2.4.2.1 Controle de temperatura.....	22
2.5 Aumento da Eficiência em Colunas de Destilação.....	23
2.5.1 Avaliação de exergia.....	23
2.5.2 Configurações alternativas de colunas de destilação.....	24
2.5.3 Colunas em operação.....	25
2.5.3.1 Otimização do sistema de controle.....	26
2.5.3.2 Otimização das vazões de refluxo e vapor.....	26
2.5.3.3 Condicionamento da alimentação.....	27
Capítulo 3 Estudo de Caso.....	29
3.1 Descrição da Unidade.....	29
3.2 Controle da Coluna <i>BTX</i>	30
3.2.1 Limitações da estratégia atual.....	31
3.3 Simulação Estacionária.....	32
3.3.1 Validação e ajuste da simulação.....	34
Capítulo 4 Metodologia Proposta.....	37
4.1 Cálculo da Energia Requerida.....	38
4.1.1 Geração de dados.....	39
4.1.2 Ajuste dos modelos.....	41
4.1.2.1 Energia como função de x_{esp}	41
4.1.2.2 Energia como função de x_{esp} e z_B	43
4.1.2.3 Energia como função de x_{esp} , z_B e z_T	48

4.2 Cálculo da Eficiência Energética.....	53
4.2.1 Cálculo da energia consumida.....	54
4.2.2 Cálculo da energia requerida.....	54
4.2.3 Cálculo da eficiência energética do processo.....	55
4.2.4 Energia mínima via método de Underwood.....	57
Capítulo 5 Estratégias de Controle Utilizando a Energia Requerida para a Separação.....	61
5.1 Simulação Dinâmica.....	61
5.2 Utilização da Energia Requerida.....	64
5.2.1 Estratégia alternativa.....	68
Capítulo 6 Conclusões.....	71
6.1 Sugestões para Trabalhos Futuros.....	72
Referências Bibliográficas.....	75

Índice de Figuras

Figura 2.1: Estágio teórico n	6
Figura 2.2: Coluna de destilação genérica.....	7
Figura 2.3: Diagrama de McCabe-Thiele para uma separação binária	12
Figura 2.4: Relação entre taxa de refluxo e número de estágios.....	13
Figura 2.5: Diagrama V_{min} para um sistema ternário ABC	18
Figura 2.6: Graus de liberdade para o controle de uma coluna de destilação.....	20
Figura 2.7: Estratégias convencionais de controle de colunas de destilação.....	22
Figura 2.8: Configurações para separações ternárias.....	25
Figura 3.1: Coluna de separação de benzeno BTX	30
Figura 3.2: Estratégia de controle da coluna BTX	31
Figura 3.3: Estratégia proposta por DURAIKI <i>et al.</i> (1999) para a coluna BTX ...	32
Figura 3.4: Simulação da coluna BTX em Aspen Plus®.....	33
Figura 3.5: Comparação dos perfis de temperatura do processo real e simulação...	34
Figura 4.1: Conjunto de dados utilizados na simulação.....	40
Figura 4.2: Dados simulados e modelo para $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$, para $F_B = 22.000$ kg/h e $F_T = 11.000$ kg/h.....	43
Figura 4.3: Variação dos parâmetros a , b e c para $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ em função de z_B para $F_T = 11.000$ kg/h.....	44
Figura 4.4: Dados simulados (pontos pretos) e superfície modelada para $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ e $F_T = 11.000$ kg/h.....	46
Figura 4.5: Detalhe da Figura 4.4 para x_{esp} maiores que 0,99.....	47
Figura 4.6: Comparação entre os dados simulados e as curvas do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ para $F_T = 11.000$ kg/h.....	47
Figura 4.7: Dados simulados para Q_R a partir da variação de x_{esp} e F_B , para diferentes F_T	49
Figura 4.8: Variação dos parâmetros a , b , c e d para $Q_R = Q_R(x_{esp}, F_B)$ em função de F_T	50
Figura 4.9: Dados simulados e modelos de 8 parâmetros e 5 para $Q_R = Q_R(x_{esp}, F_B, F_T)$ com $F_T = 11.000$ kg/h.....	51
Figura 4.10: Detalhe da Figura 4.9 para x_{esp} maior que 0,994.....	52
Figura 4.11: Eficiência energética do processo BTX	56
Figura 4.12: Diagrama V_{min} do processo BTX e caracterização do sistema real para C_1 e C_2	59
Figura 5.1: Simulação dinâmica da coluna BTX em Aspen Dynamics®.....	62
Figura 5.2: Estratégia de controle da coluna BTX com bloco de energia requerida..	65

Figura 5.3: Sequência de distúrbios avaliados na simulação.....	65
Figura 5.4: Impacto dos distúrbios no produto de topo para C_1 (x_{B1}), C_2 (x_{B2}) e C_3 (x_{B3}).....	66
Figura 5.5: Energia utilizada no refeedor para C_1 (Q_{R1}), C_2 (Q_{R2}) e C_3 (Q_{R3}).....	66
Figura 5.6: Impacto dos distúrbios no produto do fundo para C_1 (x_{BFUN1}), C_2 (x_{BFUN2}) e C_3 (x_{BFUN3}).....	67
Figura 5.7: Estratégia de controle da coluna <i>BTX</i> com de energia requerida e estratégia alternativa.....	68
Figura 5.8: Impacto dos distúrbios nos produtos de topo e fundo para a configuração alternativa.....	69

Índice de Tabelas

Tabela 3.1: Propriedades da carga utilizada na simulação.....	48
Tabela 3.2: Composição da carga utilizada na simulação.....	48
Tabela 3.3: Especificações da coluna de destilação.....	50
Tabela 3.4: Especificação do condensador de topo.....	50
Tabela 3.5: Especificação do vaso de acúmulo.....	50
Tabela 3.6: Especificação da bomba de refluxo.....	50
Tabela 4.1: Conjunto de dados utilizados.....	54
Tabela 4.2: Especificações para geração de dados.....	55
Tabela 4.3: Ajuste das curvas de $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ para $F_B = 22.000$ kg/h e $F_T = 11.000$ kg/h.....	57
Tabela 4.4: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ para $F_B = 22.000$ kg/h e $F_T = 11.000$ kg/h.....	58
Tabela 4.5: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ para diferentes valores de z_B e $F_T = 11.000$ kg/h.....	59
Tabela 4.6: Parâmetros a' e b' para o ajuste linear de a e b para diferentes valores de z_B para $F_T = 11.000$ kg/h.....	60
Tabela 4.7: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ para $F_T = 11.000$ kg/h.....	60
Tabela 4.8: Correlação dos dados simulados com o modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$..	62
Tabela 4.9: Parâmetros do modelo $Q_R = Q_R(x_{esp}, F_B)$ para diferentes F_T	64
Tabela 4.10: Parâmetros a' e b' para o ajuste linear de a , b , c e d para diferentes valores de F_T	65
Tabela 4.11: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B, z_T)$	67
Tabela 4.12: Propriedades médias para os períodos C_1 e C_2	68
Tabela 4.13: Consumo de energia no processo para os períodos C_1 e C_2	69
Tabela 4.14: Energia requerida para os períodos C_1 e C_2	69
Tabela 4.15: Eficiência energética do processo para os períodos C_1 e C_2	70
Tabela 4.16: Propriedades do sistema <i>BTX</i> para o cálculo das raízes de Underwood.	71
Tabela 4.17: Resultado do método de Underwood para C_1 e C_2	72
Tabela 4.18: Pontos do diagrama V_{min} do processo <i>BTX</i>	73
Tabela 5.1: Especificações da coluna de destilação.....	78
Tabela 5.2: Especificação do permutador de topo.....	78
Tabela 5.3: Especificação do vaso de acúmulo.....	78
Tabela 5.4: Sintonias dos controladores utilizados na simulação dinâmica.....	79

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação

Com o aumento na competitividade no mercado nos últimos anos, a busca por alternativas que permitam a redução dos custos de produção tem sido constante. Este fato aliado aos custos crescentes da energia e a preocupação cada vez maior com o impacto ambiental dos processos, tornam indispensável o controle e o aumento da sua eficiência assim como a utilização de energia com o menor desperdício possível.

Estima-se que a destilação seja utilizada em 95% dos processos de separação de misturas (ENGELIEN & SKOGESTAD, 2005a). Apenas nos EUA, segundo LUCIA & MCCALLUM (2010), existem cerca de 40 mil torres de destilação em operação. KISTER (1992) afirma que esta predominância deve-se a razões cinéticas e termodinâmicas. Do ponto de vista cinético, a destilação garante elevadas taxas de transferência de massa, mesmo na presença de inertes, e, com isso, menores investimentos são necessários. Com relação à termodinâmica, a eficiência é da ordem de 10%, que é relativamente alta quando comparado com outros processos. Outra característica que favorece este tipo de separação é o fato de que, em uma destilação, elevados graus de pureza podem ser obtidos a partir de uma quantidade fixa de energia aumentando-se o número de estágios de equilíbrio (HALVORSEN & SKOGESTAD, 2000).

A sua vasta utilização torna a destilação uma das operações que mais demandam energia dentre os processos químicos. De acordo com ENGELIEN & SKOGESTAD (2005a) cerca de 3% de toda a energia consumida no mundo está associada à destilação. Nas refinarias, segundo estudo publicado pela Agência Norte Americana de Proteção Ambiental (EPA) em 2005, cerca de 50% do custo operacional está associado ao fornecimento de energia para transformar o petróleo em seus derivados (WORREL & GALITSKY, 2005). Este guia afirma também ser possível aumentar a eficiência energética destes processos entre 10 e 20%. Entre as áreas destes sistemas que possuem maior potencial de economia de energia, segundo estes autores, estão as de utilidades (30%), fornos (20%), otimização do processo (15%) e

trocadores de calor (15%).

Um exemplo do interesse no aumento da eficiência desta operação unitária é que, mesmo sendo uma tecnologia madura, novas configurações físicas de torres de destilação têm sido propostas nas últimas duas décadas para aumentar a sua eficiência aproximando-o de um processo reversível, e assim reduzir os custos de instalação e de operação. HALVORSEN & SKOGESTAD (2011) citam como exemplo de configuração alternativa consolidada a coluna dividida por paredes (*Dividing Wall Columns – DWC*). Segundo estes autores, por utilizar vazões internas menores, menos calor é necessário para garantir a separação, atingindo uma economia que chega a 30%. Outra alternativa investigada são as colunas diabáticas (SPASOJEVIĆ *et al.*, 2010). Nestas colunas trocadores de calor intermediários são utilizados ao longo da torre para reduzir a geração de entropia e maximizar a eficiência energética.

Em torres que estão em operação, muitas vezes a alteração da configuração da torre torna-se inviável e é possível aumentar a economia a partir da otimização da eficiência energética. De acordo com GLANZ & STICHLMAIR (1997) as colunas de destilação consomem normalmente entre 10 e 20% mais energia que o necessário para realizar as separações. WORREL & GALITSKY, (2005) e NEELIS *et al.* (2008) apresentam estudos detalhados e bastante amplos sobre o aumento da eficiência energética em refinarias e indústrias petroquímicas, respectivamente. Entre as recomendações para a otimização de colunas de destilação com baixos custos envolvidos estão a revisão de procedimentos operacionais, frente às alterações das condições de operação em relação às de projeto, além da otimização da taxa de refluxo para redução da superespecificação dos produtos. Para que isso seja possível a energia utilizada deve ser otimizada a partir de um valor de referência atualizado com a condição atual do processo.

O presente trabalho apresenta uma alternativa para a otimização energética de colunas de destilação que encontram-se em operação. Uma nova metodologia é proposta para o cálculo dos valores de referência para o consumo ótimo de energia através da determinação de curvas de operação. Este método é baseado na energia teórica requerida para alcançar a especificação de produto em uma coluna de destilação. Para obtenção destas curvas, uma simulação estacionária implementada no simulador Aspen Plus® é utilizada. A fim de mapear a energia requerida, diferentes condições de carga e especificação do produto são utilizadas e, para cada ponto, a energia requerida é calculada. Estes pontos são então relacionados por meio de uma função empírica.

A partir do equacionamento da energia requerida, é possível definir o índice de eficiência energética, indicador que compara a energia utilizada na condição atual com a requerida para garantir a separação. Este indicador pode ser usado como métrica de desempenho do sistema de separação ao comparar o desempenho atual com o máximo alcançável.

As curvas de operação obtidas, assim como a eficiência energética, podem ser

utilizadas em estratégias de controle avançado para otimizar o consumo energético em um processo de separação. A aplicação desta metodologia na avaliação de duas condições operacionais distintas, em um caso real, demonstra o seu potencial.

Uma vez conhecido a forma de dependência desta curva para um determinado tipo de coluna de destilação, o seu ajuste pode ser feito a partir de dados de planta. Esta característica pode permitir que estas curvas sejam utilizadas como ferramenta de otimização empírica sem a necessidade de um modelo do processo.

1.2 Estrutura da Dissertação

Este trabalho tem o objetivo de propor uma nova metodologia para a otimização da operação de colunas de destilação. Para embasar a proposição deste método e sua utilização, parte-se de uma revisão bibliográfica na seção 2, onde são discutidos os tópicos teóricos do processo de destilação e são apresentadas as equações que governam esta operação unitária. Nesta seção são apresentadas também algumas métricas para o cálculo da energia mínima requerida, tais como o método de Underwood.

Ainda na seção 2, são discutidas as estratégias convencionais para o controle de colunas de destilação e algumas alternativas para o aumento de eficiência do processo. São abordadas boas práticas para sistemas que estão em operação, como melhorias no sistema de controle, e configurações alternativas de torres desenvolvidas nos últimos anos a partir de análises de exergia e eficiência termodinâmica. Estas novas configurações aumentam o grau de reversibilidade do processo e reduzem o consumo de energia.

No capítulo 3 é apresentado o sistema real de separação de benzeno, tolueno e xileno (*BTX*), alvo do estudo de caso deste trabalho. São abordadas as características do processo e do seu sistema de controle regulatório, juntamente com as limitações das estratégias utilizadas. Além disso, neste capítulo são discutidas as considerações feitas para a representação adequada da coluna de destilação por uma simulação estacionária desenvolvida no simulador Aspen Plus®.

No capítulo 4 é apresentada a metodologia proposta para o levantamento das curvas de operação baseadas na energia requerida. Nesta seção o processo real de separação *BTX* é utilizado como base para a aplicação da metodologia. São apresentados os modelos empíricos ajustados a partir dos dados gerados via simulação. Estes modelos são então utilizados para a avaliação da eficiência energética do processo real em duas diferentes condições de consumo de vapor no refeedor. Os valores de energia requerida calculados são comparados com o previsto pelo método de Underwood.

Após a apresentação da metodologia e do estudo de caso, a utilização da eficiência energética como variável de controle é discutida no capítulo 5. Para exemplificar a sua utilização, uma a simulação dinâmica do processo *BTX*, implementada em Aspen Dynamics®,

é avaliada com estruturas alternativas de controle. O capítulo 6 encerra este trabalho com o resumo dos principais resultados obtidos e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Destilação

A destilação é um processo de separação física de uma mistura em dois ou mais produtos com diferentes pontos de ebulição. Quando uma mistura líquida de dois componentes é aquecida, o vapor resultante terá maior concentração do componente mais volátil do que o líquido. Da mesma forma, se uma mistura na fase vapor é resfriada, o componente menos volátil tem a tendência a condensar em maior proporção que o mais volátil.

Um breve histórico da evolução desta operação unitária é apresentada em KISTER (1992). Segundo este autor ela é bastante antiga e separações de misturas líquidas deste tipo datam do século I na Alexandria, no antigo Egito. As primeiras aplicações que se tem notícia foram utilizadas para concentração de álcool em bebidas. A primeira coluna vertical de destilação contínua foi desenvolvida na França em 1813. Por volta de 1822 surgiram as primeiras versões de pratos com borbulhadores na Inglaterra, e o primeiro prato perfurado foi desenvolvido em 1830. O primeiro livro sobre fundamentos da destilação foi *La Rectification de l'alcohol* escrito por Ernest Sorel em 1893. Durante os primeiros 25 anos do século XX as aplicações da destilação se expandiram desde o uso para enriquecimento alcoólico de bebidas para a técnica de separação mais utilizada na indústria química.

2.2 Colunas de Destilação

Usualmente em aplicações práticas utiliza-se o conceito de estágio ideal para representar o equilíbrio entre as fases líquida e gasosa de uma mistura. Uma representação deste conceito é mostrada na Figura 2.1. Neste estágio, a fração molar na fase líquida, x , está em equilíbrio com a fração molar na fase vapor, y , à temperatura T e pressão P . Segundo KISTER (1992), este estágio possui as seguintes características:

- Opera em estado estacionário e possui um produto líquido e outro vapor;
- Todo o vapor e o líquido no volume de controle estão em contato íntimo e perfeitamente misturados;
- Todo o vapor que deixa o estágio está em equilíbrio com todo o líquido que deixa o estágio.

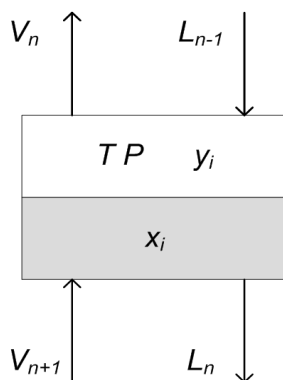


Figura 2.1: Estágio teórico n (adaptado de Kister, 1992).

Em uma coluna de destilação vários destes estágios, ou pratos, estão empilhados. Para que a separação possa ser alcançada, uma grande quantidade de energia é requerida, para vaporização da mistura no fundo da coluna, e para a condensação no topo. Para levar em conta o não atingimento do equilíbrio pelos processos reais, o conceito de eficiência pode ser utilizado e o número de estágios ideais será o número de estágios reais multiplicado por um fator de eficiência. A estrutura de uma coluna tradicional é apresentada na Figura 2.2.

O vapor gerado no refeedor percorre a coluna rumo ao topo movido pelo diferencial de pressão, enquanto que o líquido condensado no topo é conduzido ao fundo pela força da gravidade. Em cada estágio da coluna, ocorre o contato íntimo entre o líquido que escoar pela superfície do prato antes de seguir para o estágio seguinte, e o vapor oriundo do prato inferior. À medida que estas correntes entram em contato em cada prato, o vapor é enriquecido no componente mais volátil e o líquido, na fração menos volátil da mistura.

No topo da coluna o vapor enriquecido passa através de um condensador, antes de ser parcialmente recuperado como destilado. O condensado que não é removido retorna à coluna como refluxo. No fundo da torre, o líquido rico em componentes pesados é parcialmente recuperado como produto de fundo. Nesta seção parte do líquido é conduzido ao refeedor, onde recebe energia e retorna à torre como vapor. Entre estes extremos é alimentada a carga da torre, que é imediatamente incorporada às correntes.

Em uma destilação multicomponente as frações intermediárias entre o componente mais pesado (menos volátil) e o mais leve (mais volátil) estarão distribuídas entre os produtos de topo e fundo. Neste tipo de destilação ocorre a separação de dois componentes chave

principais, um leve e um pesado. O produto de topo será composto pelo componente chave leve e as frações mais leves da carga, enquanto que o produto de fundo será composto pelo componente chave pesado e as frações mais pesadas da carga. Dependendo do tipo dos componentes envolvidos, pode haver também a distribuição dos componentes em ambos os produtos da coluna.

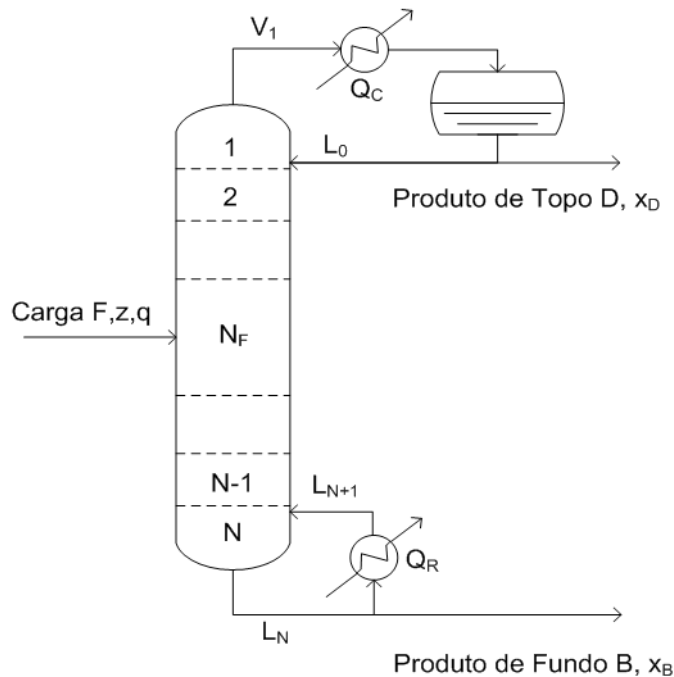


Figura 2.2: Coluna de destilação genérica.

Em uma coluna são definidas ainda as seções de esgotamento e retificação. A primeira delas refere-se ao conjunto de pratos abaixo da alimentação, e corresponde à região onde o líquido é enriquecido com as frações menos voláteis da carga. A segunda seção está associada aos pratos acima da entrada da carga, onde o vapor é enriquecido com as frações mais voláteis.

Os processos reais podem ser bem mais complexos dependendo da dificuldade de recuperação dos componentes, associada com a sua diferença de volatilidade. Múltiplas alimentações, retiradas laterais, colunas em série, com reação química, e diferentes tipos de estruturas de controle podem ser utilizadas. Além disso, diferentes tipos de estruturas de controle podem ser empregadas para controlar e otimizar a coluna.

2.2.1 Modelagem da Coluna

O cálculo de colunas de destilação passa pela resolução de um conjunto de equações com condições operacionais conhecidas, normalmente com a caracterização da carga, o número de pratos e o perfil de pressão. Independente da técnica de resolução as seguintes equações precisam ser satisfeitas:

- Equação de equilíbrio termodinâmico entre as fases;
- Restrição das frações molares;
- Balanço material por componente e global;
- Balanço de energia.

Estas equações são aplicadas para cada estágio e a solução da coluna é obtida a partir da resolução das equações para cada um dos componentes. Em uma destilação multicomponente com N_C componentes existirão $N_C - 1$ balanços de componente e $N_C - 1$ equações de equilíbrio em cada estágio. Para resolução deste sistema podem ser considerados $N_C - 1$ balanços de componente mais o global, ou ainda N_C balanços de componente. Mesmo que a solução computacional tenha eliminado a necessidade da resolução manual destes problemas, os métodos gráficos são capazes de fornecer soluções diretas e que podem ser usadas como boas estimativas iniciais para soluções numéricas (KISTER, 1992).

2.2.1.1 Equação de equilíbrio

O equilíbrio de fases implica que o potencial químico de um mesmo componente seja o mesmo em cada uma das fases de uma mistura. A partir das equações desta propriedade para as fases líquida e vapor, considerando-se o caso ideal, é possível obter-se a lei de Raoult, representada pela Equação 2.1. Esta equação relaciona as composições do componente i nas fases líquida e vapor. A partir desta, é possível observar-se que um componente que apresente sua pressão de saturação, P_i , maior que a pressão total do sistema, P , terá a composição na fase vapor maior do que na fase líquida.

$$Py_i = P_i x_i \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.1)$$

Para sistemas não ideais, a pressão na fase vapor é ponderada pelo coeficiente de fugacidade, Φ_i , e o efeito de mistura na fase líquida é modificado pelo coeficiente de atividade, γ_i . Com isso chega-se a expressão geral para o equilíbrio na Equação 2.2. Estes coeficientes são normalmente determinados por equações de estado e modelos de atividade, respectivamente.

$$P \Phi_i y_i = P_i \gamma_i x_i \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.2)$$

Na solução de problemas de destilação, a relação entre as composições nas fases vapor e líquida é representada pela constante do equilíbrio líquido-vapor, K_i , dada pela Equação 2.3.

$$K_i = \frac{\text{fração molar do componente } i \text{ na fase vapor } (y_i)}{\text{fração molar do componente } i \text{ na fase líquida } (x_i)} \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.3)$$

Ela indica a tendência que um componente tem de ser vaporizado, e quando é maior que a unidade, a concentração do componente será maior na fase vapor. Esta variável é uma função da temperatura, pressão e composição da mistura, conforme Equação 2.4, e para sistemas ideais a dependência com a composição pode ser removida, chegando-se à Equação 2.5.

$$K_i(T, P, x_i, y_i) = \frac{P_i^s y_i}{P \Phi_i} \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.4)$$

$$K_i(T, P) = \frac{P_i^s(T)}{P} \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.5)$$

No equilíbrio, de acordo com a regra de fases de Gibbs, quando uma destas três variáveis é fixada – pressão, temperatura ou composição da mistura – a segunda é calculada diretamente, ou seja, estas variáveis não são independentes. Para reduzir de forma aproximada a dependência com a temperatura, a volatilidade relativa (α_{ij}) pode ser utilizada, Equação 2.6.

$$\alpha_{ij} = \frac{y_i/x_i}{y_j/x_j} = \frac{K_i}{K_j} \quad i, j=1, \dots, N_C \quad (2.6)$$

Para sistemas ideais, as composições nas fases líquida e vapor são normalmente diferentes uma vez que as pressões de vapor dos componentes puros são raramente iguais a uma mesma temperatura. Esta análise muda quando sistemas não ideais são considerados. Quando a constante K_i é igual à unidade, a composição da fase vapor é igual à da fase líquida, e tem-se um chamado azeótropo. Estas misturas podem evaporar em uma temperatura superior à do componente puro mais pesado, ou inferior à do mais leve, sendo referenciadas como azeótropos de máximo e de mínimo, respectivamente.

2.2.1.2 Restrição das frações molares

A restrição de composição limita a soma das frações molares em cada estágio à unidade tanto na fase vapor, Equação 2.7, como na fase líquida, Equação 2.8. Para um sistema com N_C componentes, há $N_C - 1$ composições independentes.

$$\sum_{i=1}^{N_C} x_i - 1 = 0 \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.7)$$

$$\sum_{i=1}^{N_C} y_i - 1 = 0 \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.8)$$

2.2.1.3 Balanço material

No estado estacionário, o balanço de massa global indica que em um dos pratos totais da coluna, N , a soma das vazões da carga, F , com o líquido do prato superior, L_{n-1} , e o vapor do prato inferior, V_{n+1} , deve ser igual à soma das vazões de vapor e líquido retiradas deste prato, V_n e L_n , conforme representado pela Equação 2.9. Quando estas vazões são ponderadas pelas respectivas frações molares das correntes, chega-se ao balanço material por componente, na Equação 2.10, onde z_n , y_n e x_n representam as frações molares de cada componente no prato n na carga, no vapor e no líquido, respectivamente.

$$F_n + V_{n+1} + L_{n-1} = V_n + L_n \quad n = 1, \dots, N \quad (2.9)$$

$$F_n z_n + V_{n+1} y_{n+1} + L_{n-1} x_{n-1} = V_n y_n + L_n x_n \quad n = 1, \dots, N \quad (2.10)$$

2.2.1.4 Balanço de energia

O balanço de energia da torre é dado pela Equação 2.11. Ela mostra que no estado estacionário, a soma da energia que entra no estágio, seja pela entalpia das vazões de líquido (H_L) e vapor (H_V) das correntes internas ou de carga (H_F), seja pela adição ou remoção de calor (ΔH), deve ser igual à entalpia das correntes de saída. Esta variável é função da temperatura, pressão e composição da corrente, como mostra a Equação 2.12.

$$\begin{aligned} \Delta H_n + F_n H_{F,n} + V_{n+1} H_{V,n+1} + L_{n-1} H_{L,n-1} \\ = V_n H_{V,n} + L_n H_{L,n} \end{aligned} \quad n = 1, \dots, N \quad (2.11)$$

$$H_n = H_n(T_n, P_n, y_i) \quad i = 1, \dots, N_C, \quad n = 1, \dots, N \quad (2.12)$$

2.2.2 Sistema binário

Em um sistema binário, a volatilidade relativa, dada anteriormente na Equação 2.6, pode ser combinada com as restrições de composição nas fases líquida e vapor, Equações 2.7 e 2.8, respectivamente. Após esta substituição chega-se se à Equação 2.13, que pode ser rearranjada fornecendo a Equação 2.14.

$$\alpha_{1,2} = \frac{K_1}{K_2} = \frac{y_1(1-x_1)}{x_1(1-y_1)} \quad (2.13)$$

$$y_1 = \frac{\alpha_{1,2} x_1}{1 + (\alpha_{1,2} - 1) x_1} \quad (2.14)$$

Esta equação expressa a composição de um dos componentes na fase vapor como função da sua composição na fase líquida e da volatilidade relativa da mistura. Esta relação de

equilíbrio é comumente apresentada graficamente em um diagrama $x - y$.

Um método gráfico bastante conhecido para o projeto de colunas de misturas binárias é o proposto por McCABE & THIELE (1925). Nele as vazões internas de líquido e vapor são consideradas constantes ao longo de cada seção da coluna, Equação 2.15 e Equação 2.16 e o balanço de energia, Equação 2.11, pode ser negligenciado. Com esta simplificação as linhas de operação podem ser representadas por duas retas. Apesar de parecer simplista, estas considerações funcionam bem para misturas de componentes similares (KISTER, 1992; HALVORSEN & SKOSGESTAD, 2000).

$$L_0 = L_1 = L_2 = L_3 = \dots = L_n = L \quad (2.15)$$

$$V_1 = V_2 = V_3 = \dots = V_n = V_{n+1} = V \quad (2.16)$$

Com as vazões internas constantes, o balanço de componente pode ser reescrito para a seção de esgotamento, conforme Equação 2.17, onde V' e L' representam as vazões constantes de vapor e líquido, nesta seção. Para a retificação, o balanço pode ser escrito conforme Equação 2.18. Estas duas retas definem as linhas de operação do sistema, ou linhas de balanço, dos componentes.

$$y_n = \frac{L'}{V'} x_{n-1} - \frac{B}{V'} x_B \quad n=1, \dots, N \quad (2.17)$$

$$y_{n+1} = \frac{L}{V} x_n + \frac{D}{V} x_D \quad n=1, \dots, N \quad (2.18)$$

A partir da definição da razão de refluxo como a relação entre as vazões de retirada de produto e de refluxo, pela Equação 2.19, e sabendo-se que a vazão de vapor na seção de retificação é dada pela soma das vazões de retirada e de refluxo, Equação 2.20, a linha de balanço dos componentes para a parte superior da coluna, Equação 2.18, pode ser reescrita de acordo com a Equação 2.21. Nesta equação observa-se que a razão de refluxo está diretamente relacionada com a inclinação da linha de operação superior.

$$RR = \frac{L}{D} \quad (2.19)$$

$$V = L + D \quad (2.20)$$

$$y_{n+1} = \frac{RR}{RR+1} x_n + \frac{x_D}{RR+1} \quad n=1, \dots, N \quad (2.21)$$

A intersecção das linhas de operação define um ponto na linha q , juntamente com o estado físico da alimentação do sistema. Esta condição pode ser calculada pela Equação 2.22

a partir das entalpias do vapor saturado, $h_{v,sat}$, da alimentação, h_f , e da mistura ΔH^{vap} . Para $q = 1$ ou $q = 0$ tem-se uma alimentação saturada totalmente líquida ou vapor, respectivamente. Valores entre estes dois limites indicam uma mistura bifásica enquanto que valores maiores que um representam líquido subresfriado, e menores que zero caracterizam um vapor superaquecido.

$$q = \frac{h_{v,sat} - h_f}{\Delta H^{vap}} \quad (2.22)$$

A Figura 2.3 apresenta o diagrama de McCabe-Thiele para uma mistura binária. São mostradas as linhas de operação para as seções de retificação e esgotamento para diferentes razões de refluxo, RR . A intersecção destas ocorre sobre a linha determinada pela condição da carga. Nesta figura é possível observar que à medida que a razão de refluxo cresce, menos estágios são necessários para uma dada separação. Por outro lado, à medida que o refluxo atinge o valor mínimo, regiões de composição constante são desenvolvidas em torno do prato de alimentação. Estas regiões são denominadas *pinch* e são caracterizadas pela reduzida força motriz entre as fases. Nelas, alterações infinitesimais na composição necessitam de um grande número de estágios.

Em uma destilação simples, onde todos os componentes da alimentação estão distribuídos em ambos os produtos de topo e fundo, no refluxo mínimo existirá um ponto de *pinch* na região do prato de alimentação (SHIRAS *et al.*, 1950). Para sistemas multicomponentes, em geral na condição de refluxo mínimo, estas regiões de *pinch* são desenvolvidas em cada metade da coluna (KOEHLER *et al.*, 1995).

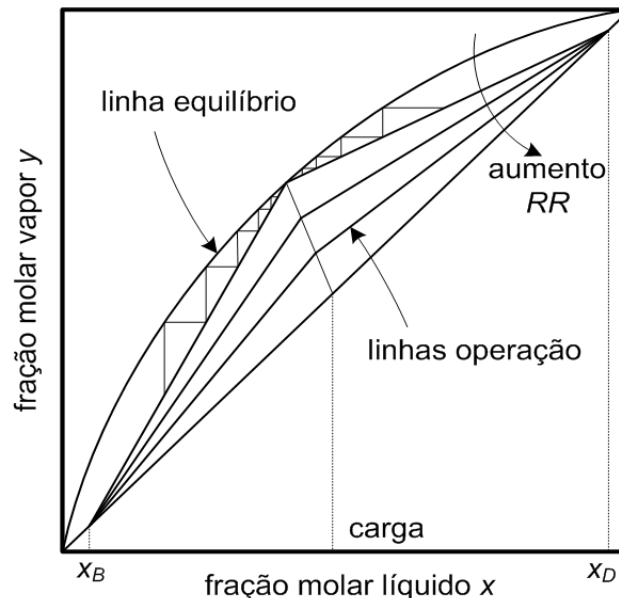


Figura 2.3: Diagrama de McCabe-Thiele para uma separação binária (adaptado de KISTER, 1992).

Um equacionamento similar ao proposto por McCABE & THIELE pode ser utilizado

para resolver sistemas multicomponentes. Neste caso pode-se utilizar o conceito de pseudo componente para agrupar os componentes da alimentação em uma fração leve e outra pesada (KISTER, 1992).

2.3 Cálculo da Energia Mínima para a Separação

Para uma dada coluna e uma dada vazão F de carga, conhecidos z e q e a pressão de operação da coluna, existem apenas dois graus de liberdade para uma coluna com produtos de topo e fundo, como a mostrada na Figura 2.2. Esta condição independe do número de componentes na alimentação (HALVORSEN & SKOSGESTAD, 2000). Como consequência, conhecendo-se, por exemplo, as vazões de refluxo e de vapor na coluna, todos os estados em todos os estágios, inclusive os produtos, são completamente determinados. Como a energia consumida pelo processo é dada basicamente pelo consumo de utilidades no refeedor e condensador, a energia mínima requerida será dada pelas menores vazões de vapor e refluxo necessários para uma dada separação.

A Figura 2.4 apresenta a relação entre a taxa de refluxo e o número de estágios para uma determinada separação. Uma coluna pode produzir a separação desejada entre os limites de mínimo refluxo e mínimo número de estágios. Em uma condição de mínimo refluxo, um número infinito de estágios é necessário, enquanto que com refluxo total, a menor quantidade possível de estágios pode ser utilizada. Estas condições não podem ser alcançadas por configurações reais e servem de limites de projeto.

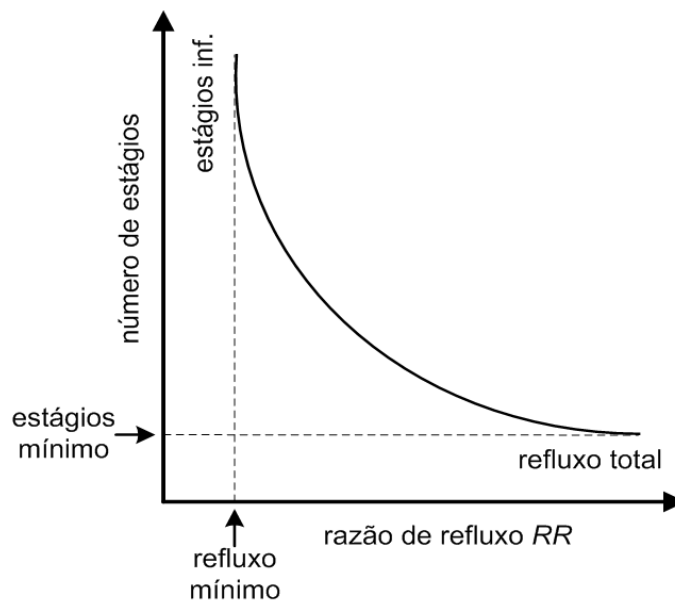


Figura 2.4: Relação entre taxa de refluxo e número de estágios para uma separação fixa (adaptado de BAHADORI & VUTHALURU, 2010).

Diversos métodos foram propostos para o cálculo destas condições extremas via correlações simplificadas ou rigorosas (BAHADORI & VUTHALURU, 2010), sendo que os

mais conhecidos são os propostos por Underwood, para o cálculo do refluxo mínimo, e por Fenske, para o cálculo do número mínimo de estágios (KISTER, 1992).

2.3.1 Método de Underwood

Um dos métodos mais conhecidos para o cálculo da energia mínima foi proposto por Underwood (1948). Este autor desenvolveu uma solução geral para o problema de avaliação da energia mínima requerida para separação de misturas, assumindo como constantes a volatilidade relativa entre os componentes e as vazões internas na torre. O ponto de partida do método de Underwood para misturas multicomponentes é a equação de balanço material em uma seção n qualquer da coluna, como mostrado na Equação 2.23. A vazão resultante que se desloca do estágio n para o estágio acima, $n - 1$, é dada pela diferença entre a vazão de vapor que deixa o estágio rumo ao topo e a do líquido proveniente do prato superior. No estado estacionário este fluxo, w_i , será constante ao longo da coluna.

$$w_i = V_n y_{i,n} - L_{n+1} x_{i,n+1} \quad i=1, \dots, N_C, \quad n=1, \dots, N \quad (2.23)$$

A Equação 2.23 pode ser manipulada algebricamente dividindo-se pela vazão vaporizada da mistura, V , e multiplicando-se pelo fator $\alpha_i/(\alpha_i - \phi)$ para chegar-se a Equação 2.24 após incluir-se o somatório em cada termo. As raízes de Underwood são definidas como os valores de ϕ que tornam o lado esquerdo desta equação igual à unidade.

$$\frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N_C} \frac{\alpha_i w_i}{(\alpha_i - \phi)} = \frac{\sum_{i=1}^{N_C} \alpha_i^2 \frac{x_{i,n}}{(\alpha_i - \phi)}}{\sum_{i=1}^{N_C} \alpha_i x_{i,n}} - \frac{L}{V} \sum_{i=1}^{N_C} \alpha_i \frac{x_{i,n+1}}{(\alpha_i - \phi)} \quad i=1, \dots, N_C, \quad n=1, \dots, N \quad (2.24)$$

Assim é possível chegar-se à Equação 2.25, sendo que o número de raízes de Underwood será igual ao número de componentes da mistura. Esta equação é válida para qualquer seção da coluna e, ao aplicá-la para o prato de retirada de produto de topo, por exemplo, obtém-se a Equação 2.26.

$$V = \sum_{i=1}^{N_C} \frac{\alpha_i w_i}{(\alpha_i - \phi)} \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.25)$$

$$V = \sum_{i=1}^{N_C} \frac{\alpha_i x_{i,D}}{(\alpha_i - \phi)} D \quad i=1, \dots, N_C \quad (2.26)$$

HALVORSEN & SKOGESTAD (2000), mostram algumas propriedades das raízes de Underwood. Para a seção de esgotamento da coluna, as raízes obedecem a relação mostrada na Equação 2.27. A mesma análise pode ser feita para a seção de retificação. Neste caso as

raízes são definidas como ψ e estão relacionadas conforme Equação 2.28. É possível observar que, para a seção de fundo, a menor raiz será menor que a menor volatilidade relativa, e para o topo, a menor raiz será maior que este valor.

$$\alpha_1 > \varphi_1 > \alpha_2 > \varphi_2 > \dots \alpha_{N_c} > \varphi_{N_c} \quad (2.27)$$

$$\psi_1 > \alpha_1 > \psi_2 > \alpha_2 > \dots \psi_{N_c} > \alpha_{N_c} \quad (2.28)$$

Em uma condição onde a vazão de vapor é diminuída, as raízes da seção de topo decrescem enquanto que as do fundo aumentam, até que para um sistema hipotético de refluxo mínimo, uma ou mais raízes coincidem. Neste caso é possível definir a raiz comum θ . A partir da definição da fração de líquido na carga, q , dada pela Equação 2.22, e subtraindo-se a Equação 2.26 para as seções de topo e fundo, chega-se à Equação 2.29, conhecida como equação de alimentação, já que depende apenas da caracterização desta corrente.

$$(1-q) = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{\alpha_i z_i}{(\alpha_i - \theta)} \quad i=1, \dots, N_c \quad (2.29)$$

A energia mínima para realizar uma dada separação será dada pela vazão de vapor mínima. Para obter este valor, inicialmente as volatilidades relativas são calculadas para a temperatura média da coluna, utilizando-se o componente chave pesado como referência. A raiz comum entre as volatilidades relativas dos componentes chave leve e pesado, $\alpha_j > \theta > \alpha_{j+1}$, é então obtida por tentativa e erro, e a energia mínima pode ser obtida via Equação 2.30. A partir da definição da recuperação do produto i na corrente de topo, Equação 2.31, a energia mínima pode ser obtida normalizada em função da carga, Equação 2.32.

$$V_{min} = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{\alpha_i x_{i,D}}{(\alpha_i - \theta)} D \quad i=1, \dots, N_c \quad (2.30)$$

$$r_i = \frac{x_{i,D} D}{z_i F} \quad i=1, \dots, N_c \quad (2.31)$$

$$\frac{V_{min}}{F} = \sum_{i=1}^{N_c} \frac{\alpha_i r_i z_i}{(\alpha_i - \theta)} \quad i=1, \dots, N_c \quad (2.32)$$

Em alguns casos, os componentes secundários da carga estão distribuídos em ambos os produtos de topo e fundo e uma região *pinch* é desenvolvida acima e abaixo do prato de carga. Para o cálculo da energia mínima nestes sistemas, após a identificação dos N_D componentes recuperados simultaneamente no topo e no fundo, $N_c - 1$ raízes da Equação 2.30 precisam ser determinadas. SHIRAS *et al.* (1950) desenvolveram uma equação para determinar quando um componente está distribuído nas condições de refluxo mínimo. A partir

da Equação 2.33, o coeficiente D_R é calculado para cada componente da mistura. Para valores maiores que um, tem-se que o componente é recuperado todo no destilado. Caso o coeficiente esteja entre zero e um, ele estará distribuído nos dois produtos, e para valores negativos, o componente aparecerá apenas no produto de fundo.

$$D_R = \frac{\alpha_i - 1}{\alpha_L - 1} \frac{D x_{L,D}}{F z_L} + \frac{\alpha_L - \alpha_i}{\alpha_L - 1} \frac{D x_{H,D}}{F z_H} \quad (2.33)$$

KISTER (1992) faz referências à aplicação do método de Underwood em sistemas onde a consideração das vazões internas constantes não pode ser aplicada. Além disso, são discutidos os impactos de configurações complexas de colunas, por exemplo aquelas com mais de uma corrente de alimentação, no cálculo do refluxo mínimo. MAY (1949), apresenta as equações de Underwood para sistemas multicomponentes, sem a simplificação dos componentes-chave. Segundo este autor, é possível se obter os valores de energia mínima para estes sistemas a partir da resolução de uma série de subsistemas binários. MONROY-LOPERENA & VARGAS-VILLAMIL (2001) propõem a representação das equações de Underwood em forma polinomial. Para uma mistura de N_C componentes, as raízes podem ser obtidas resolvendo-se um polinômio de ordem N_C .

A partir das equações de Underwood, é possível ainda obter a equação de King (KING, 1971) para o cálculo da energia mínima necessária de separação para um sistema binário e com alimentação totalmente líquida, $q = 1$. Para este caso, a raiz comum θ pode ser obtida diretamente pela Equação 2.34. Nesta equação, a volatilidade relativa α , é dada em função do componente pesado, enquanto que z , representa a composição do componente mais leve na carga. A partir da recuperação dos componentes chave leve e pesado, r_L e r_H , e da vazão de refluxo mínimo, L_{min} , na Equação 2.35, chega-se à equação de King, Equação 2.36. Esta equação pode ser aplicada em sistemas multicomponentes, neste caso o resultado encontrado é conservativo (HALVORSEN & SKOGESTAD, 2000).

$$\theta = \frac{\alpha}{1 + (\alpha - 1)z} \quad (2.34)$$

$$\frac{L_{min}}{F} = \frac{V_{min}}{F} - \frac{D}{F} \quad (2.35)$$

$$\frac{L_{min}}{F} = \frac{r_L - \alpha r_H}{\alpha - 1} \quad (2.36)$$

2.3.2 Outros métodos

Para processos de destilação simples, a energia mínima requerida para a separação corresponderá à menor razão de refluxo ou refervimento em um sistema hipotético com número infinito de estágios de equilíbrio. Nesta condição fictícia, a coluna de destilação

apresenta um ou mais pontos de *pinch*, e por isso a maioria dos métodos para determinação da energia mínima são métodos desenvolvidos para caracterizar este ponto (LUCIA *et al.*, 2008).

KOEHLER *et al.* (1995) fazem uma revisão de diversos métodos para o cálculo de energia mínima propostos até então. Eles mostram que a maioria dos métodos para o cálculo do ponto de *pinch* está diretamente relacionada com as equações de Underwood. Neste trabalho, os autores salientam que apesar das inúmeras tentativas, ainda não foi encontrado um método universal para o cálculo da energia mínima para qualquer sistema.

LUCIA *et al.* (2008) citam uma série de trabalhos para o cálculo da energia baseados na identificação dos pontos de *pinch*, e outros baseados no cálculo via simulação rigorosa. Estes trabalhos abordam diferentes tipos de separação, desde sistemas ideais, passando pela destilação reativa e por sistemas com azeótropos. Entre as metodologias estão o método de valor limite (*boundary value methods*), modelos de destilação reversível (*reversible distillation models*), cálculo de autovalores (*eigenvalue methods*) e o método do diagrama de vazão mínima de vapor, V_{min} . Estes autores apresentam ainda um novo procedimento chamada método da menor linha de separação (*shortest stripping lines method*) proposta anteriormente em LUCIA *et al.* (2006).

2.3.2.1 Diagramas V_{min}

As equações de Underwood foram utilizadas por HALVORSEN & SKOGESTAD (2003a) para a proposição de diagramas de energia mínima, V_{min} , em colunas de destilação para separações multicomponentes. A partir desta metodologia, é possível determinar a demanda energética de qualquer ponto de operação em uma coluna. Como existem apenas dois graus de liberdade para se caracterizar uma coluna de separação convencional, toda a faixa de operação pode ser representada em duas dimensões, independentemente do número de componentes na alimentação.

Para a construção destes diagramas, inicialmente são determinados os componentes da mistura distribuídos entre os produtos de topo e fundo. Determinados os N_D componentes nesta condição, $N_C - N_D$ recuperações são conhecidas, $r = 1$ para as frações leves recuperadas apenas no topo, e $r = 0$ para as frações pesadas retiradas no fundo. A partir da definição das equações de Underwood, tem-se que as raízes ativas serão aquelas cujos valores de volatilidade relativa encontram-se entre os valores dos componentes distribuídos, ou seja, $\alpha_{d1} > \theta_k > \alpha_{dND}$. Com isso, o número de raízes será $N_A = N_D - 1$.

Definindo-se o vetor X com as recuperações dos produtos de topo e vazão de vapor normalizada, conforme mostrado na Equação 2.37, a Equação 2.32 pode ser reescrita em forma matricial como uma equação linear, resultando na Equação 2.38.

$$X = \left[r_{d1}, r_{d2}, \dots, r_{dND}, \frac{V}{F} \right]^T \quad (2.37)$$

$$M \cdot X = Z \quad (2.38)$$

Os termos relativos aos componentes distribuídos são agrupados na matriz M , Equação 2.39, e cada elemento contém uma raiz ativa. O vetor Z , Equação 2.40, contém os termos leves não distribuídos. Este sistema contém $N_A = N_D - 1$ equações e $N_D + 1$ variáveis. Especificando duas destas variáveis tem-se $N_D - 1$ incógnitas que podem ser obtidas via resolução do sistema linear.

$$M = \begin{bmatrix} \frac{\alpha_{d1} z_{d1}}{\alpha_{d1} - \theta_{d1}} & \frac{\alpha_{d2} z_{d2}}{\alpha_{d2} - \theta_{d1}} & \dots & \frac{\alpha_{dND} z_{dND}}{\alpha_{d1} - \theta_{d1}} & -1 \\ \frac{\alpha_{d1} z_{d1}}{\alpha_{d1} - \theta_{d2}} & \frac{\alpha_{d2} z_{d2}}{\alpha_{d2} - \theta_{d2}} & \dots & \frac{\alpha_{dND} z_{dND}}{\alpha_{d2} - \theta_{d2}} & -1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & -1 \\ \frac{\alpha_{d1} z_{d1}}{\alpha_{d1} - \theta_{dND-1}} & \frac{\alpha_{d2} z_{d2}}{\alpha_{d2} - \theta_{dND-1}} & \dots & \frac{\alpha_{dND} z_{dND}}{\alpha_{d1} - \theta_{dND-1}} & -1 \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

$$Z = \left[-\sum_{i=1}^{d1-1} \frac{\alpha_i z_i}{(\alpha_i - \theta_{d1})} \quad -\sum_{i=1}^{d1-1} \frac{\alpha_i z_i}{(\alpha_i - \theta_{d2})} \quad \dots \quad -\sum_{i=1}^{d1-1} \frac{\alpha_i z_i}{(\alpha_i - \theta_{dND-1})} \right]^T \quad (2.40)$$

A solução do problema é apresentada na forma de um diagrama como o da Figura 2.5 para um sistema ternário com componentes A (mais volátil), B e C (menos volátil). Nesta figura, a fronteira $V = V_{min}$ indica que a vazão vaporizada no fundo da coluna, corresponde à mínima necessária para atingir a separação. Esta linha representa a região de aparecimento ou desaparecimento de um componente nos produtos, ou seja, a sua distribuição ou não.

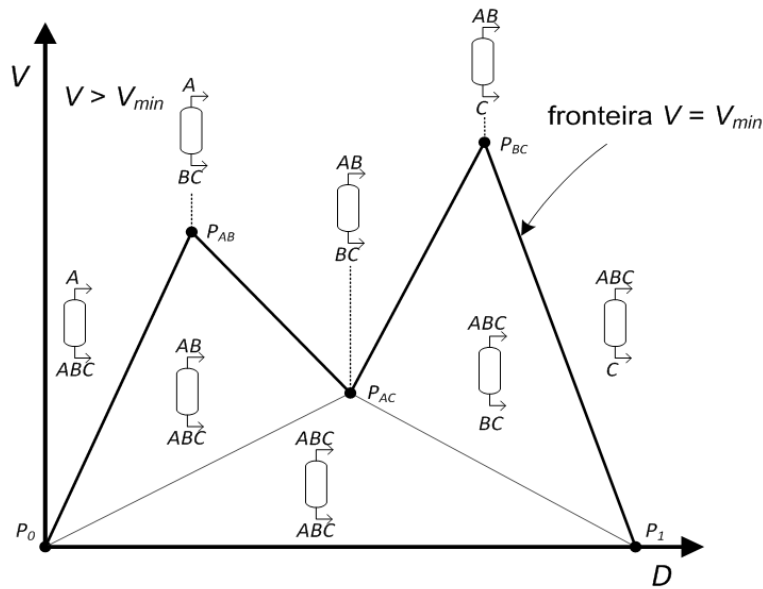


Figura 2.5: Diagrama V_{min} para um sistema ternário ABC (adaptado de HALVORSEN & SKOGESTAD, 2003a).

Os dois picos na Figura 2.5 correspondem à vazão mínima de vapor para uma separação completa entre A/B (P_{AB}) ou B/C (P_{BC}), sem a distribuição do terceiro componente, ou seja, $r_A = 1$ e $r_B = 0$, e $r_B = 1$ e $r_C = 0$. O vértice intermediário indica a mínima energia para a separação A/C (P_{AC}) com a distribuição de B entre os dois produtos, ou seja, $r_A = 1$ e $r_C = 0$. Abaixo desta linha, existem três polígonos para cada grau de distribuição dos componentes. Nestas regiões dois (AB ou BC) ou os três componentes são recuperados simultaneamente nas correntes de topo e fundo.

HALVORSEN & SKOGESTAD (2003a) mostram neste trabalho a derivação de expressões analíticas para o cálculo das assíntotas e dos vértices para sistemas binários, ternários e com cinco componentes na alimentação. Além disso, é apresentada a comparação entre o diagrama baseado nas equações de Underwood com o elaborado a partir de simulação rigorosa, para uma separação ternária. Segundo estes autores, o levantamento do diagrama de V_{min} com simuladores comerciais permite a sua utilização para sistemas para os quais as simplificações de idealidade não são representativas.

Este mesmo conceito foi estendido pelos autores para colunas com configurações complexas. HALVORSEN & SKOGESTAD (2003b) avaliam esta metodologia para colunas multiefeito do tipo Peatlyuk para sistemas com três produtos, e também para qualquer número de produtos (HALVORSEN & SKOGESTAD, 2003c). Para estas configurações alternativas, a energia total requerida será igual à equivalente para a separação mais difícil, maior pico do diagrama de V_{min} , calculada para uma coluna convencional. ENGELIEN & SKOGESTAD (2005a) apresentam diagramas para a vazão mínima de vapor para diversos tipos de coluna acopladas.

2.4 Controle de Colunas de Destilação

Tão importante quanto o projeto de colunas de destilação são as estratégias de controle utilizadas. Se a filosofia de controle não é definida corretamente ou se a sintonia dos controladores é feita sem critério, tanto o desempenho como a segurança dos processos podem ser afetados. Do ponto de vista operacional, sistemas de controle com desempenho ruim podem apresentar consumo excessivo de energia no refeedor e no condensador. Além disso, esta condição resulta em um fluxo interno maior na coluna, o que facilita a sua inundação e reduz a capacidade de processamento.

O controle de colunas de destilação é um assunto recorrente na literatura. Boas revisões sobre o tema são encontradas na literatura em KISTER (1990), LUYBEN *et al.* (1998), SKOSGESTAD (1987, 1992, 2007), entre outros.

2.4.1 Graus de liberdade

Para o controle de uma coluna de destilação tradicional têm-se normalmente seis graus de liberdade, como representa a Figura 2.6. Nestes sistemas, cada variável independente está

associado a um atuador, usualmente uma válvula de controle.

A primeira válvula controla a vazão de carga da unidade. O valor desta variável pode ser determinado pela disponibilidade de matéria-prima ou por questões operacionais. Esta válvula pode ser também configurada para controlar o nível da coluna. Dois outros graus de liberdade precisam ser utilizados para o controle do inventário, no fundo da coluna, e no vaso de acúmulo de topo. O nível deste vaso é controlado normalmente pela retirada de produto, vazão de refluxo ou carga térmica do permutador. Já o nível da torre costuma ser mantido pela retirada de produto de fundo, embora a carga térmica do refeedor, Q_R , ou mesmo a vazão de alimentação para a torre possam ser utilizados.

O quarto grau de liberdade é utilizado para o controle da pressão da coluna, sendo a variável manipulada mais comum a carga térmica do condensador, Q_C . Para sistemas nos quais o vaso de acúmulo opera completamente cheio, normalmente tem-se uma válvula adicional que atua alterando a área exposta do trocador.

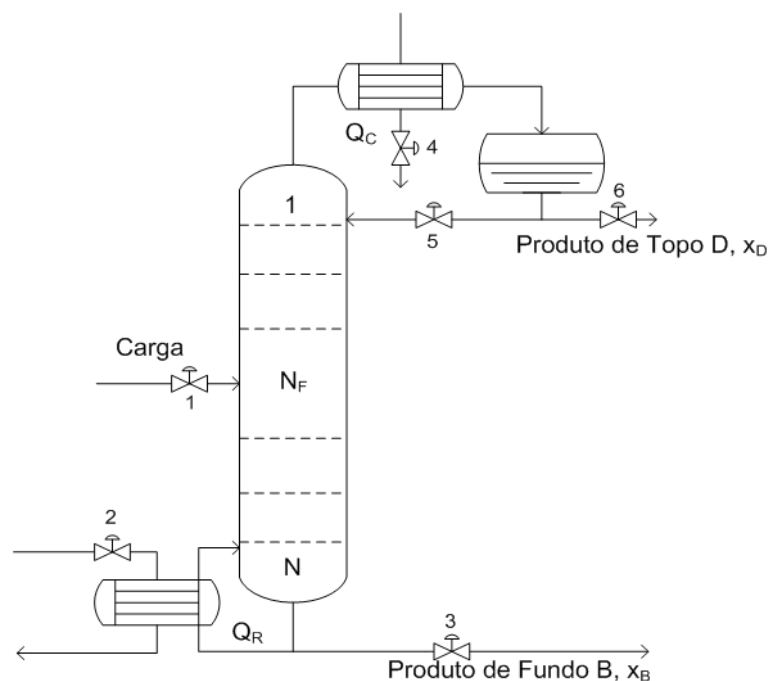


Figura 2.6: Graus de liberdade para o controle de uma coluna de destilação.

Existem dois graus de liberdade restantes, que podem ser usados para especificar os produtos de topo e fundo. Normalmente são controladas as composições dos produtos diretamente, ou duas temperaturas de referência, ou ainda uma vazão de retirada e uma temperatura. À medida que o número de retiradas aumenta em configurações mais complexas de colunas de destilação, novos graus de liberdade são inseridos.

Cabe salientar que algumas restrições devem ser levadas em conta para definir as variáveis que serão controladas. Em um sistema multicomponente, por exemplo, não é

possível definir a composição de dois produtos na mesma corrente. Outra limitação está associada ao controle de uma composição e de uma vazão de retirada de produto, B ou D . Para um distúrbio que ocorra na alimentação da torre, não é factível manter estas duas variáveis controladas simultaneamente.

2.4.2 Controle de composição

Em uma coluna convencional dois dos graus de liberdade podem ser usados em diferentes combinações para controlar as composições dos produtos de topo e fundo. As estratégias convencionais são referenciadas de acordo com as variáveis utilizadas. A estrutura $L-V$, por exemplo, indica uma estratégia onde a vazão de refluxo e a de vapor, dado indiretamente pela carga térmica do refeedor, controlam as composições. A Figura 2.7 ilustra quatro configurações típicas. LUYBEN *et al.* (1998) faz recomendações para a utilização destas estratégias. Segundo estes autores o tipo $L-V$, Figura 2.7 (a), é o mais utilizado na indústria, já que o refluxo e a vazão de vapor são as variáveis que mais têm impacto na composição dos produtos. Além disso, esta estratégia consegue garantir um desempenho satisfatório frente a distúrbios na carga.

Outra estrutura possível é a $D-V$, na Figura 2.7 (b), que utiliza a retirada de produto e a vazão de vapor para manter as composições de topo e fundo. Ela é recomendada para sistemas com elevada razão de refluxo já que neste caso, a retirada de produto seria insuficiente para manter o nível do vaso de acúmulo.

A terceira configuração típica utilizada para especificar os produtos da coluna é a $L-B$, Figura 2.7 (c), onde o topo é controlado pelo refluxo e o fundo pela retirada de produto. Esta estratégia é normalmente utilizada quando a razão de vaporização é muito alta. Outra possibilidade é manter a composição de topo através da razão de refluxo RR , utilizando a vazão de vapor para controlar o fundo, configurando a estratégia $RR-V$ na Figura 2.7 (d). Esta estratégia é conhecida também por $L/D-V$.

Embora seja possível o controle simultâneo da composição das correntes de topo e fundo, uma série de fatores dificultam a sua utilização na indústria. SKOGESTAD & MORARI (1987) destacam como principais dificuldades o comportamento fortemente não linear das composições, a resposta bastante lenta, o tempo morto elevado dos analisadores, além do forte acoplamento entre os dois controladores. SKOGESTAD (1997b) ressalta, no entanto, que o controle de ambos os produtos é o mais interessante economicamente já que em sistemas com apenas uma variável controlada normalmente os produtos são mantidos em uma concentração maior que a necessária, gerando desperdício de energia e redução da capacidade de processamento.

LUYBEN *et al.* (1998) fazem referência ao controle das composições dos produtos via medidas de temperatura. Segundo eles, normalmente análises em linha não estão disponíveis para ambas as correntes, ou não apresentam resultados confiáveis, e neste caso a qualidade

dos produtos pode ser inferida por temperaturas intermediárias. Porém, apenas uma temperatura na coluna costuma ser suficientemente sensível a alterações no processo para que seja controlada, e por isso normalmente estes processos mantêm um dos graus de liberdade fixos, como a vazão de refluxo, por exemplo, e controlam uma temperatura intermediária para especificar o produto de interesse.

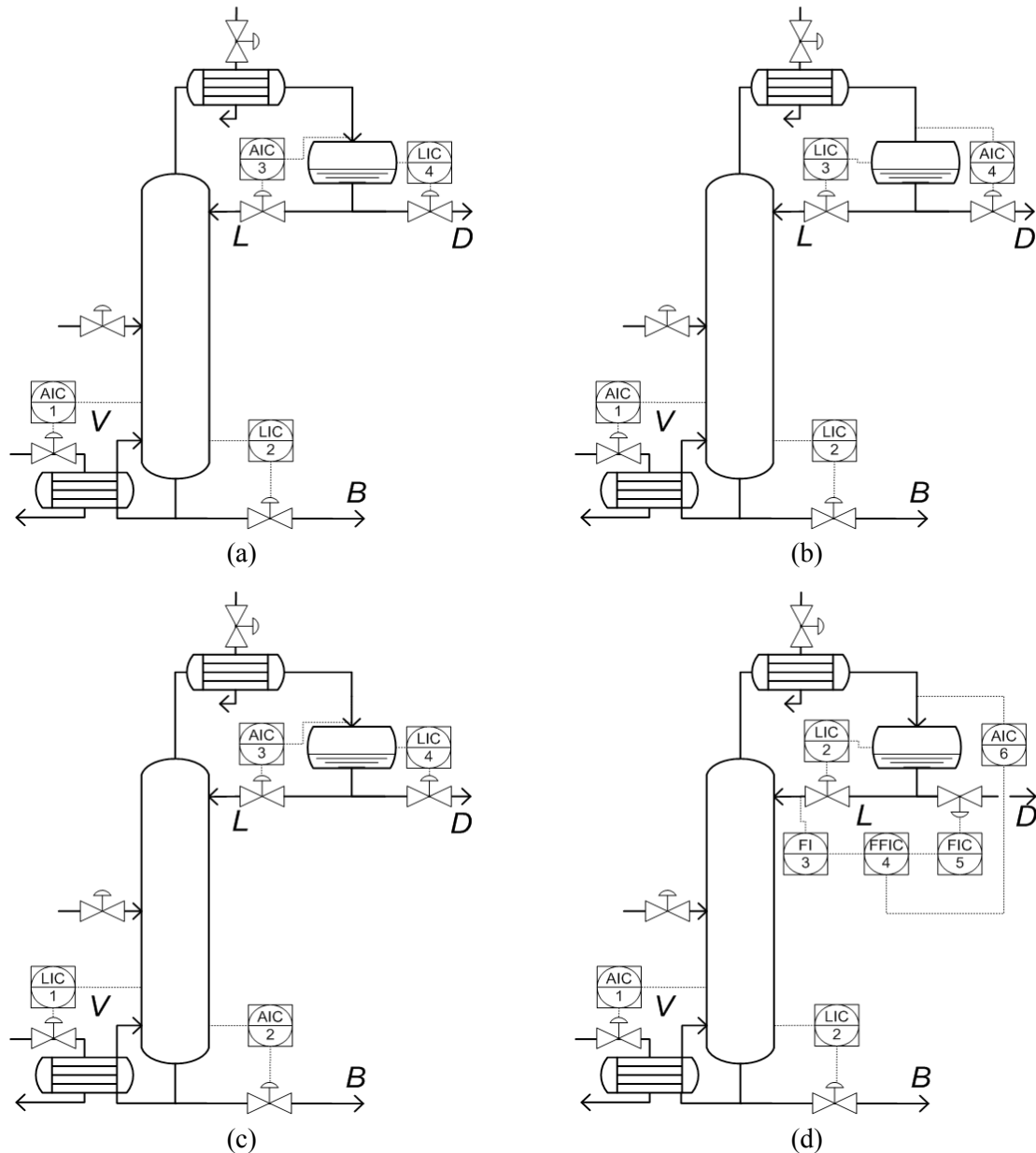


Figura 2.7: Estratégias convencionais de controle de colunas de destilação. Estruturas *L-V* (a), *D-V* (b), *L-B* (c) e *RR-V* (d).

2.4.2.1 Controle de temperatura

O controle de temperatura é o meio mais popular para controlar indiretamente a

composição dos produtos. Uma mudança na temperatura em determinado estágio de uma coluna está associada a uma variação na composição do produto. Embora a relação entre composição e temperatura, uma vez fixada a pressão da coluna, seja direta apenas para um sistema binário, esta alternativa é empregada satisfatoriamente em processos multicomponentes, principalmente pelo baixo custo e resposta rápida destes medidores.

Para que a temperatura controlada represente bem o perfil de composição na coluna, o estágio onde esta variável é mais sensível às alterações nas composições das correntes deve ser o escolhido para a estratégia de controle (KISTER, 1990; LUYBEN, 1992). Este levantamento pode ser feito a partir de testes na carga da unidade ou na variável manipulada. Outra alternativa é verificar os perfis de composição a partir de simuladores do processo. SKOGESTAD (1997b), sugere a utilização da temperatura logarítmica como variável para controle da composição. Segundo ele, esta relação reduz significativamente a dependência não linear das temperaturas, ou composições, ao longo da coluna, em função da região de operação, facilitando a sua utilização para controle.

Como alternativa para contrabalançar o efeito da pressão sobre a temperatura nos sistemas multicomponentes, é possível se utilizar um compensador no qual o efeito da pressão é levado em conta no cálculo da temperatura, obtendo-se assim uma inferência simplificada da composição. Outra alternativa é se utilizar um controle da diferença de temperatura entre dois estágios distintos da coluna. Embora as temperaturas sejam bastante sensíveis a variações na pressão, a diferença entre elas não é muito alterada. Nesta configuração, uma das temperaturas utilizadas é localizada em um prato que não sofre alteração de composição, normalmente próximo ao topo em colunas de alta pureza. Esta estratégia, no entanto, deve ser utilizada com precaução, uma vez que a diferença entre duas temperaturas pode não apresentar um comportamento monótono em relação à composição na coluna (LUYBEN *et al.*, 1998).

2.5 Aumento da Eficiência em Colunas de Destilação

Durante a etapa de projeto de uma unidade de separação, grandes esforços são empregados na determinação da configuração que exija os menores investimentos financeiros. Nesta etapa são avaliados o número de estágios da coluna ou altura de recheio, a localização do prato de alimentação e a pressão de operação, entre outras variáveis. O cálculo da energia mínima permite que o processo seja avaliado quanto à sua demanda energética e este procedimento é normalmente utilizado para comparação de diferentes configurações. Os valores calculados com as correlações convencionais, como a de Underwood, podem ser utilizados como ponto de partida de análises rigorosas (KISTER, 1992).

2.5.1 Avaliação de exergia

A análise de exergia é uma das ferramentas para a avaliação da eficiência energética de processos. O conteúdo exergético de um sistema é definido como a capacidade que este

sistema tem de produzir trabalho mecânico. Para uma dada transformação, o máximo de trabalho mecânico pode ser obtido com um processo que ocorre de forma reversível. À medida que o processo afasta-se da reversibilidade, o trabalho produzido é menor, ou seja, parte da exergia disponível é perdida. Desta forma, o termo exergia leva em conta a irreversibilidade de um processo devido à geração de entropia. Em uma coluna de destilação, a perda de exergia ocorre principalmente devido a três fatores. São eles: (i) a transferência de calor sob diferenças finitas de temperaturas; (ii) a mistura das correntes líquidas e de vapor; (iii) e a perda de calor ao longo da coluna (MUSTAPHA *et al.*, 2007).

De acordo com BANDYOPADHYAY (2002), a avaliação de exergia em colunas de destilação fornece o entendimento para o projeto de processo mais eficientes energeticamente. Ela é importante também para avaliar o impacto da integração da coluna com outros sistemas para melhor aproveitamento da energia. Além de determinar a perda de exergia, este autor ressalta a utilização da eficiência exérgica do processo para determinação do seu potencial de melhoria. KOEIJER & RIVERO (2003) apresentam este indicador conforme a Equação 2.41. Ele relaciona o trabalho mínimo requerido pela separação na temperatura de referência, W_{min} , com a perda total de exergia, Ex^{loss} . Estes autores apresentam também correlações para o cálculo da perda de exergia nos estágios de uma coluna e nos trocadores de calor.

$$\eta_{exe} = \frac{W_{min}}{W_{min} + Ex^{loss}} \quad (2.41)$$

2.5.2 Configurações alternativas de colunas de destilação

Mesmo sendo uma tecnologia madura, novas configurações de torres de destilação têm sido propostas para aumentar a eficiência destas operações. A partir de análises termodinâmicas busca-se uma aproximação do processo a um sistema reversível. São exemplos destas alternativas as colunas divididas por parede (*Dividing Wall Columns – DWC*) e as colunas multiefeito. A configuração *DWC* é uma implementação da coluna energeticamente acoplada, também conhecida como Petlyuk, e já é aplicada industrialmente em novas unidades e em projetos de desengargalamento (HALVORSEN & SKOGESTAD, 2011).

Segundo estes autores, as aplicações industriais de configurações *DWC* passam de uma centena, e quando operadas adequadamente, estes sistemas de separação proporcionam uma economia de até 40% de energia quando comparadas com a estrutura tradicional. Estas configurações alternativas necessitam de uma vazão menor de vapor nas torres e por isso tendem a ser mais compactas. Desta forma, é possível reduzir os custos de instalação juntamente com os de operação.

A Figura 2.8 exemplifica a aplicação destas configurações alternativas. Tradicionalmente, os três componentes de uma mistura ternária podem ser recuperadas em duas colunas operando em série, Figura 2.8 (a). Nesta configuração, um dos componentes é

separado na primeira torre e os outros dois no topo e fundo da torre seguinte. O acoplamento energético, ou Petlyuk, propõe a interligação de 3 torres para a recuperação dos produtos, Figura 2.8 (b). Esta teoria pode ser adaptada para a configuração *DWC*, onde apenas uma coluna é utilizada, na Figura 2.8 (c), reduzindo-se significativamente o custo do investimento.

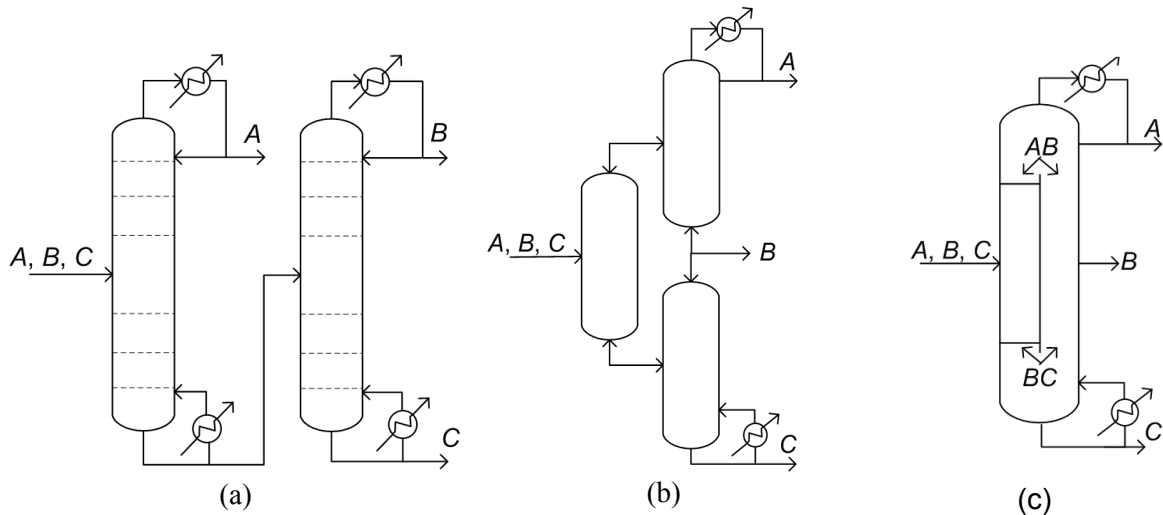


Figura 2.8: Configurações para separações ternárias. Tradicional com duas torres (a), Petlyuk (b), *DWC* (c) (adaptado de HALVORSEN & SKOGESTAD, 2011).

ENGELIEN & SKOGESTAD (2005b) apresentam este conceito em um caso industrial de uma unidade de separação de hidrocarbonetos. A partir da configuração inicial com quatro torres convencionais em série, diferentes alternativas são avaliadas a partir de diagramas de V_{min} . Estes autores mostram que, utilizando-se uma configuração integrada energeticamente na última torre, alterando-se apenas as condições operacionais, seria possível economizar até 43% da energia. Os custos envolvidos, assim como o impacto desta alteração no resto do processo, não são discutidos pelos autores.

2.5.3 Colunas em operação

Em torres que estão em operação, muitas vezes a alteração do projeto torna-se inviável e é possível aumentar a eficiência do processo a partir da otimização das suas condições operacionais. De acordo com GLANZ & STICHLMAIR (1997), as colunas de destilação consomem normalmente entre 10 e 20% mais energia que o necessário. WORREL & GALITSKY, (2005) e NEELIS *et al.* (2008) apresentam estudos detalhados e bastante amplos sobre o aumento da eficiência energética em refinarias e indústrias petroquímicas, respectivamente. Entre as recomendações para a otimização de colunas de destilação com baixos custos envolvidos estão a revisão de procedimentos operacionais frente às alterações das condições de projeto, além da otimização da razão de refluxo para redução da superespecificação dos produtos.

2.5.3.1 Otimização do sistema de controle

Os sistemas de controle são críticos no aumento da eficiência de uma coluna e os custos associados às modificações são normalmente baixos. A escolha das variáveis controladas e manipuladas, assim como a sintonia dos controladores, deve ser feita a partir da definição correta do seu objetivo. Eles devem ser definidos de forma que a atuação seja efetiva em malha fechada. Uma boa revisão sobre as melhores práticas para o controle de colunas de destilação é feita por SKOGESTAD (1997a, 1997b, 2007).

Para que os distúrbios do processo sejam absorvidos corretamente, por exemplo, os controles de nível podem ser configurados com sintonia “pulmão” (FRIEDMAN, 1994). Nesta estratégia, o efeito capacitor dos vasos e torres é utilizado para absorver as variações de carga, reduzindo assim a variabilidade das correntes de saída e, conseqüentemente, do processo à jusante.

Outras melhorias incluem controlar a qualidade dos produtos evitando a superespecificação desnecessária, reduzir a pressão de forma que menos vapor seja necessário no refeedor, automatizar procedimentos de transição e bateladas, entre outros. Além disso, inúmeras estratégias avançadas podem ser utilizadas, mas para que isso seja possível é necessário a operação a contento do sistema de controle básico.

2.5.3.2 Otimização das vazões de refluxo e vapor

A otimização da taxa de refluxo pode reduzir significativamente o consumo de energia em uma coluna. Caso as características da carga da unidade, ou a especificação dos produtos, sejam diferentes das previstas no projeto, as condições operacionais também devem ser adaptadas. Em uma unidade onde a exigência de purificação de um produto seja de 95%, por exemplo, não é atrativo economicamente recuperá-lo com 98% de pureza. Esta superespecificação implica em consumo desnecessário de energia no refeedor e no condensador da coluna, maior energia gasta em bombeamento, etc.

A adequação das vazões de refluxo e vapor reduz os fluxos internos da coluna e a possibilidade de inundação. Conseqüentemente, pode ser possível aumentar a capacidade de processamento na unidade. Outro benefício associado à redução do grau de superespecificação dos produtos é o aumento na vazão de retirada a partir da incorporação de contaminantes até o limite permitido. Para alcançar o ótimo econômico, no entanto, os valores dos produtos de topo e fundo, assim como o custo de energia devem ser levados em conta. O maior lucro equivale à recuperação do produto de maior valor com a máxima fração de impurezas, e qualquer acréscimo de energia será compensado pelo aumento na produção. Nesta situação, o produto de menor valor pode ser recuperado acima da especificação.

2.5.3.3 Condicionamento da alimentação

O condicionamento da carga da unidade é outra alternativa comum para reduzir o consumo de energia em uma coluna. O preaquecimento da alimentação pode reduzir a demanda do refeedor, mas o potencial de redução irá depender da relação entre as vazões dos produtos de topo e fundo. Em uma unidade onde a maior vazão de produto é no topo, alterando-se o estado da carga de líquido saturado para vapor saturado é possível reduzir-se significativamente a demanda de energia no refeedor. Este condicionamento da carga pode ser feito com a corrente de fundo da própria torre, por exemplo. Outra alternativa é utilizar vapor em um trocador de calor exclusivo.

Para uma coluna que utilize condensador com água de refrigeração, os altos custos deste equipamento reduzem a justificativa de preaquecimento da carga. Nesta situação, pode ser mais interessante resfriar-se a alimentação da coluna.

Capítulo 3

Estudo de Caso

A fim de avaliar a metodologia para a geração de curvas de operação e a utilização do índice de eficiência energética proposto como métrica para a otimização do processo, uma unidade real de fracionamento de aromáticos foi utilizada. Esta unidade é utilizada para recuperação de benzeno, tolueno, xilenos e solvente aromático através de processos consecutivos de separação por destilação fracionada.

3.1 Descrição da Unidade

Na unidade de separação de aromáticos, a recuperação dos diferentes produtos inicia-se na coluna fracionadora de benzeno, *BTX*. Nesta coluna, o benzeno é recuperado na porção superior da coluna, como corrente lateral, enquanto que a fração de tolueno e mais pesados seguem como produto de fundo para as colunas subsequentes do processo. Nas fracionadoras de tolueno, este aromático é recuperado como destilado no topo, enquanto que o produto de fundo segue para a terceira torre, onde são separados os xilenos do restante da mistura. O produto de fundo é então conduzido a última torre para recuperação do nonano aromático no topo, e o decano e frações mais pesadas no fundo.

A coluna *BTX* é apresentada na Figura 3.1. Esta torre é alimentada por uma vazão de cerca de 40 t/h de uma mistura de benzeno, tolueno e isômeros de xileno, além de uma fração menor de outros aromáticos e alifáticos mais pesados. Ela possui 55 pratos valvulados para a recuperação do benzeno do restante da mistura. O calor é fornecido no fundo por um refulvedor que utiliza vapor de alta pressão, e a coluna opera a uma pressão praticamente atmosférica no topo. A alimentação possui ainda uma fração de água, adicionada propositalmente para facilitar a separação do benzeno a partir da formação de um azeótropo entre estes componentes. Eles são condensados em um permutador com água de refrigeração e acumulados no vaso de topo, onde é promovida a separação da fase orgânica da aquosa. Enquanto que a primeira fase retorna para a coluna como refluxo, a água acumulada na bota retorna para a unidade de extração de aromáticos.

A corrente de produto é retirada como corrente lateral com pureza mínima de 99,9% em massa de benzeno. A coluna *BTX* conta com cromatógrafos em linha para caracterização da carga e do produto de topo. No fundo não existe um controle rígido de composição e a fração de benzeno é mantida em torno de 0,005% no topo das colunas fracionadoras de tolueno.

Maiores detalhes sobre o processo de separação *BTX* utilizado neste estudo de caso, assim como as condições operacionais deste sistema estão disponíveis em KORNELIUS (2011).

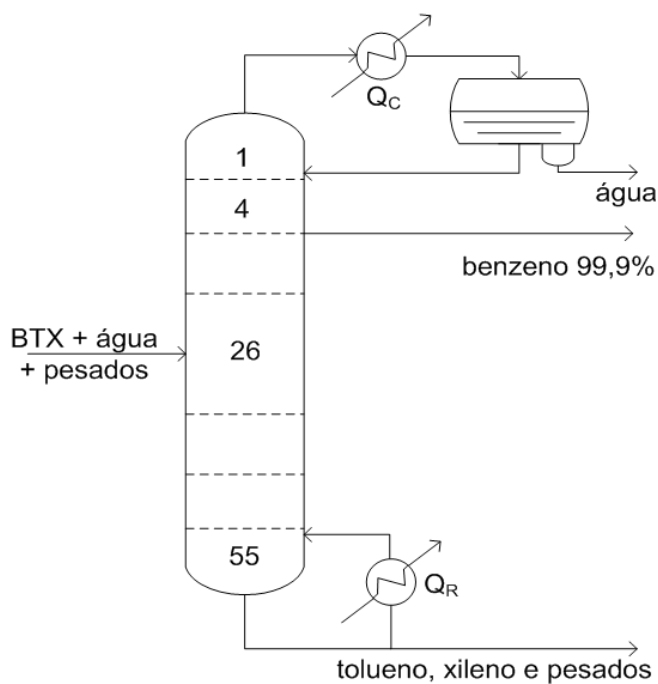


Figura 3.1: Coluna de separação de benzeno *BTX*.

3.2 Controle da Coluna *BTX*

A estratégia de controle utilizada na coluna real é apresentada na Figura 3.2. Neste sistema, a diferença entre duas temperaturas intermediárias é controlada automaticamente para garantir a especificação do produto de topo. Esta atua sobre a vazão de retirada de produto para manter constante em torno de 11°C a diferença de temperatura entre o prato abaixo da retirada de benzeno, 8, e acima da carga, 25. Um aumento no valor desta variável indica a subida de componentes mais pesados para o topo. Neste cenário, o controlador atua reduzindo a retirada lateral e, conseqüentemente, aumentando o refluxo no topo da torre. Um analisador em linha no produto auxilia no monitoramento da concentração de impurezas abaixo do limite máximo de 1.000 ppm entre não aromáticos e tolueno.

Além deste controle, a coluna opera com o seu inventário mantido por controladores de nível no fundo, atuando na vazão de retirada de fundo, e no vaso de acúmulo, com atuação

na vazão de refluxo. É interessante ressaltar que não há controle direto de pressão na coluna, e está variável é mantida indiretamente pelo controle da pressão no vaso de acúmulo no topo. A temperatura de fundo da torre, por sua vez, não tem controle automático e é mantida manualmente em torno de 135°C, a partir da atuação na vazão de vapor para o refeedor pela operação. A partir da definição desta vazão, o perfil de temperaturas é monitorado.

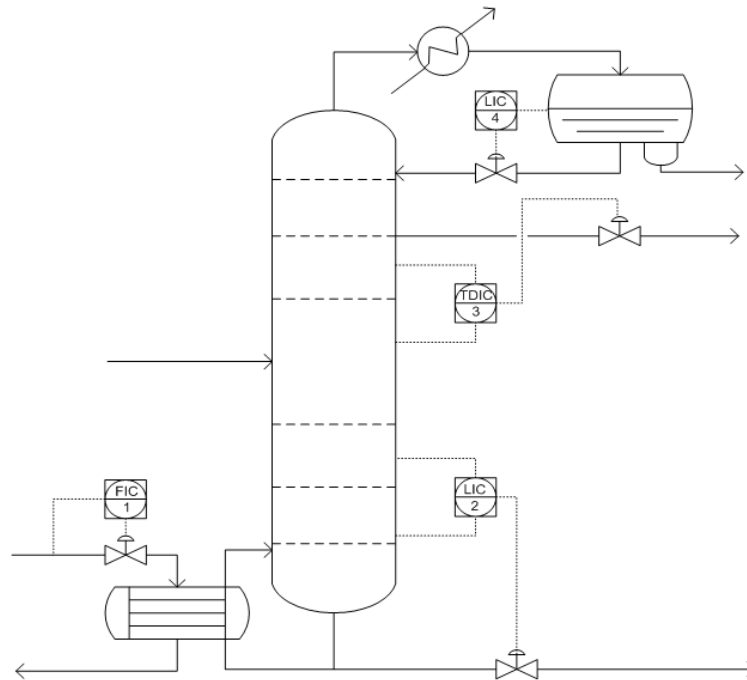


Figura 3.2: Estratégia de controle da coluna *BTX*.

3.2.1 Limitações da estratégia atual

Com a estratégia de controle atual, a coluna *BTX* possui apenas um controle de composição, ou seja, apenas um grau de liberdade é utilizado para especificar os produtos. Para operar a unidade em uma região de conforto, mais vapor do que o necessário é utilizado no refeedor, e desta forma o produto final desta torre é mantido constantemente superespecificado em cerca de 0,05%. Esta política de operação não é otimizada e uma série de prejuízos pode ser destacada. Inicialmente tem-se um desperdício de energia associada ao consumo de utilidades. Com mais vapor no fundo, maior é a necessidade de carga térmica fria no permutador de topo. Além disso, existe uma possibilidade maior de inundação da torre devido aos fluxos internos elevados, que também exigem maior potência para bombeamento e provocam um desgaste maior dos equipamentos. Outro ponto que deixa de ser otimizado está associado ao fornecimento de produto nobre acima do limite contratado. Com a incorporação reduzida de contaminantes, uma vazão maior de produto nobre deixa de ser produzida.

Uma proposta para o controle automático simultâneo das composições dos produtos de topo e fundo nesta coluna é apresentada em DURAISKI *et al.* (1999). A partir da análise da matriz de ganhos relativos (*RGA*) estes autores propõem uma alteração no emparelhamento

dos controladores. Nesta estratégia o controle da diferença de temperatura no topo é feito a partir da manipulação da vazão de vapor no refeedor. Um segundo controlador é utilizado para manter a temperatura do prato sensível da coluna. Para isso utiliza-se a razão de refluxo como manipulada. A partir de uma análise número de desempenho robusto (*RPN*) (TRIERWEILER, 1997), estes autores destacam os benefícios da utilização desta proposta. A Figura 3.3 mostra uma representação desta estratégia.

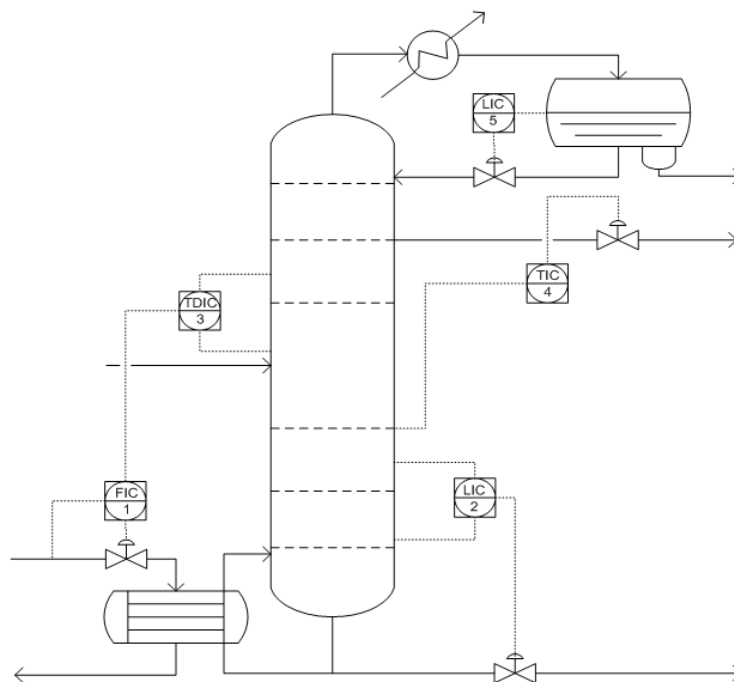


Figura 3.3: Estratégia proposta por DURAIKI *et al.* (1999) para a coluna *BTX*.

3.3 Simulação Estacionária

A simulação da coluna *BTX* utilizada neste estudo de caso foi baseada em uma previamente desenvolvida em DURAIKI *et al.* (1999). A partir de uma eficiência global de 60%, os 55 estágios do processo real são representados na simulação em Aspen Plus® por 34 estágios teóricos com 100% de eficiência. Esta simulação utiliza como modelo termodinâmico o *NRTL* (*Non Random Two Liquid*) que calcula coeficientes de atividade para a fase líquida enquanto que a fase gasosa é considerada como ideal pelo simulador. Este modelo representa com acuracidade sistemas com elevado grau de não idealidade e com pressão moderada, como é o caso da coluna *BTX*. CONZ (2005) faz uma comparação dos diferentes modelos disponibilizados no simulador Aspen Plus® para uma coluna *BTX* e escolhe o *NRTL* como o que melhor caracteriza o sistema real.

A Figura 3.4 mostra a simulação estacionária da coluna *BTX* implementada no simulador Aspen Plus®. Para a representação deste sistema, quatro equipamentos foram especificados: uma coluna de destilação, um permutador no topo, um vaso de acúmulo e uma bomba de refluxo. A Tabela 3.1 e Tabela 3.2 mostram os valores das propriedades e

composição da corrente de alimentação utilizados. A composição desta corrente é analisada em linha, porém a análise não contempla o teor de água, que foi estimado com base na vazão de água removida no fundo do vaso de acúmulo.

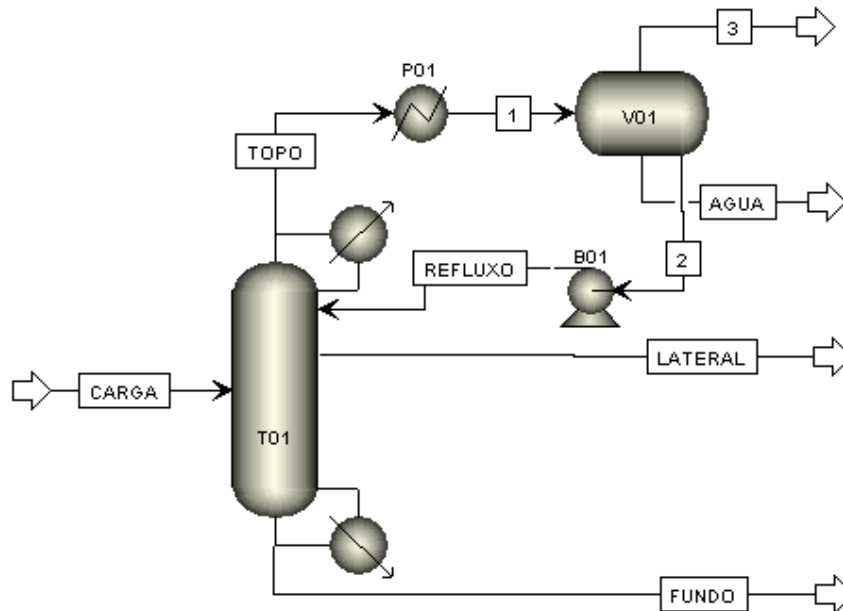


Figura 3.4: Simulação da coluna *BTX* em Aspen Plus®.

Tabela 3.1: Propriedades da carga utilizada na simulação

Propriedade	Valor
Vazão (kg/h)	40.800
Temperatura (°C)	128,9
Pressão (kgf/cm ²)	15,6
Estado físico	líquido

Tabela 3.2: Composição da carga utilizada na simulação.

Componente	Composição (% mássico)
<i>Benzeno</i>	55,0
<i>Metilciclohexano</i>	0,0100
<i>Tolueno</i>	26,8
<i>Octano</i>	0,200
<i>m-Xileno</i>	15,4

Componente	Composição (% mássico)
<i>Trimetilbenzeno</i>	2,50
<i>Água</i>	0,0900

3.3.1 Validação e ajuste da simulação

Na simulação, a especificação dos quatro equipamentos utilizados foi feita baseando-se nas folhas de dados dos equipamentos reais. Entretanto, algumas informações não estavam disponíveis e foram estimadas, de forma a ajustar a simulação com os dados reais do processo. Para o caso do permutador de topo, por exemplo, não existem medidas de pressão ou temperatura à montante ou jusante. Desta forma, a queda de temperatura e pressão foi determinada com base nas correntes de topo, antes do condensador, e refluxo, após a bomba. Para este equipamento, cujo fluido de troca térmica é água refrigerada, especificou-se a queda de temperatura como sendo de 50°C, valor observado entre as duas correntes no sistema real. Neste caso, assume-se que esta variação é proporcionada exclusivamente pelo permutador e não são levados em conta o eventual *flash* no vaso de acúmulo assim como o trabalho realizado pela bomba no líquido.

O comportamento dos perfis de temperatura obtidos via simulação e do processo real são apresentados na Figura 3.5. Tanto a coluna como os dados de simulação são apresentados em 34 estágios equivalentes. Nota-se a boa semelhança entre elas. Os valores utilizados na simulação para os quatro equipamentos são mostrados nas Tabelas 3.3 à 3.6 para a coluna, condensador de topo, vaso de acúmulo e bomba de refluxo, respectivamente.

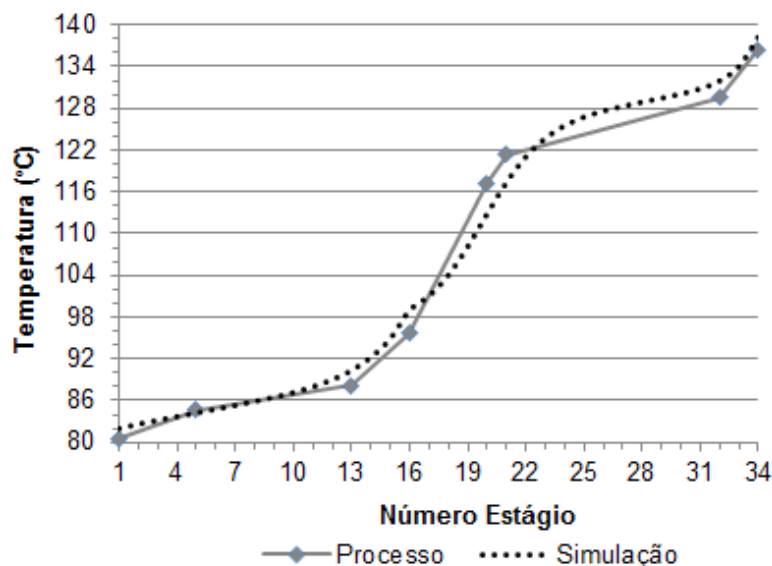


Figura 3.5: Comparação dos perfis de temperatura do processo real e simulação.

Tabela 3.3: Especificações da coluna de destilação.

Propriedade	Valor
<i>Número de Pratos</i>	34
<i>Tipo refervedor</i>	Kettle
<i>Fases válidas</i>	vapor-líquido-líquido
<i>Carga térmica refervedor (Mcal/h)</i>	6.300
<i>Pressão topo (kgf/cm²)</i>	1,1
<i>ΔP(kgf/cm²)</i>	0,6
<i>Prato de alimentação</i>	16
<i>Prato de refluxo</i>	1
<i>Prato de retirada lateral</i>	3

Tabela 3.4: Especificação do condensador de topo.

Propriedade	Valor
<i>Pressão (kgf/cm²)</i>	1,05
<i>ΔT (°C)</i>	-50
<i>Fases válidas</i>	vapor-líquido-líquido

Tabela 3.5: Especificação do vaso de acúmulo.

Propriedade	Valor
<i>Pressão (kgf/cm²)</i>	1,05
<i>Calor trocado (Mcal/h)</i>	0
<i>2º componente fase líquida</i>	água
<i>Fração vaporizada</i>	0

Tabela 3.6: Especificação da bomba de refluxo.

Propriedade	Valor
<i>Pressão descarga (kgf/cm²)</i>	2,0
<i>Fases válidas</i>	líquido

Capítulo 4

Metodologia Proposta

Os métodos tradicionais para o cálculo da energia mínima são geralmente utilizados como pontos de partida para a avaliação da viabilidade de projetos. Apesar do grande interesse acadêmico, a sua aplicação prática em sistemas reais é limitada à etapa de projeto dos mesmos. Para avaliação de colunas que estão em operação a sua utilização é dificultada seja pelas considerações de cada método, como a do número infinito de pratos para os métodos baseados nas equações de Underwood, seja pela complexidade dos sistemas reais como não idealidades e alimentações múltiplas na coluna.

Durante a etapa de projeto de uma unidade são definidos as dimensões dos equipamentos e condições operacionais para recuperar os produtos com uma dada especificação, a partir de uma carga padrão. Como visto anteriormente, a partir da definição de duas variáveis independentes, composição dos produtos de topo e fundo por exemplo, o restante das variáveis da coluna pode ser determinada. Desta forma, na condição de projeto, existe apenas um valor de energia requerida necessária para alcançar a separação.

Após a partida da unidade, entretanto, alterações nas condições operacionais impedem ou dificultam a utilização das vazões de vapor ou de refluxo calculadas no projeto como referência. Estas alterações incluem a escolha equivocada dos equipamentos durante a montagem, a incrustação de permutadores ao longo do tempo, alterações na vazão e composição carga da unidade, entre outros.

Como forma de contornar as limitações dos métodos tradicionais e proporcionar um novo equacionamento para o cálculo da energia requerida, este trabalho apresenta uma alternativa para o cálculo dos valores de referência e o equacionamento de curvas de operação para sistemas reais.

Para a obtenção das curvas de operação de energia requerida, uma simulação estacionária, validada com dados do processo real, é utilizada. A fim de mapear a demanda de energia, diferentes condições de carga e especificação de produto são utilizadas e, para cada

ponto, a energia requerida é calculada. A partir da geração destes conjuntos de dados, modelos empíricos são ajustados via mínimos quadrados e com isso é possível quantificar o consumo necessário para o sistema em questão em função da carga por uma relação conforme Equação 4.1. A opção por modelos empíricos em detrimento de outras alternativas, como regressões multivariáveis ou redes neurais, justifica-se pela maior facilidade do ajuste dos parâmetros destes modelos com dados reais de processo. Um equacionamento similar foi proposto por HALVORSEN & SKOGESTAD (2003a) para representação do consumo de energia em qualquer ponto de operação de uma coluna em diagramas de vazão vaporizada mínima, V_{min} .

$$\frac{Q_R}{F} = f(\text{Especificação Produtos}, \text{Caracterização da Alimentação}) \quad (4.1)$$

A mesma análise pode ser expandida com a inclusão de outras variáveis independentes como o número de pratos, a temperatura ou entalpia específica da carga, pressão da coluna, carga térmica do condensador, entre outras.

Após definidos os modelos para o cálculo do valor de referência para o consumo de energia, é possível propor o índice de eficiência energética conforme Equação 4.2. Este indicador compara a demanda de energia requerida para recuperar os produtos em um determinado processo, com a energia real utilizada.

$$\eta = \frac{Q_{R\text{requerido}}}{Q_{R\text{real}}} \cdot 100\% \quad (4.2)$$

Este indicador pode ser utilizado como métrica de desempenho para otimizar a eficiência de um processo de separação. A grande vantagem da utilização dos modelos de curvas de operação, em detrimento dos métodos tradicionais, está associada à comparação com o desempenho ótimo daquele sistema, e não ao de uma condição ideal, como a prevista pelo método de Underwood, por exemplo. Uma analogia pode ser feita com a análise de desempenho de malhas de controle onde o índice de Harris é comumente utilizado. Neste caso tem-se a comparação da variância da saída da malha com a variância mínima do sistema. Esta condição ideal, no entanto, poderia ser atingida apenas por um controlador de elevada ordem, e não pelos controladores *PID* normalmente utilizados (KEMPF, 2003).

4.1 Cálculo da Energia Requerida

A partir da simulação estacionária do processo de separação de benzeno, tolueno e xileno (*BTX*) validada, o consumo requerido de energia foi avaliado para diferentes condições de carga e especificações dos produtos. Para este estudo de caso, um extenso conjunto de dados foi gerado via simulação variando-se as vazões de benzeno e tolueno na carga. Para cada um dos cenários, a demanda de energia teórica requerida foi avaliada em diferentes condições de especificação de benzeno no produto do topo.

Após obtido o conjunto de dados, diferentes equações empíricas foram ajustadas para determinar o consumo de energia em função das características da alimentação da composição de produtos, conforme Equação 4.1.

Como o acompanhamento do processo real é feito a partir das vazões e composições em base mássica, esta mesma base foi utilizada tanto para a geração dos dados como para o ajuste dos modelos.

4.1.1 Geração de dados

Para chegar-se às curvas de energia requerida, um conjunto de dados foi gerado a partir da simulação estacionária do processo implementada no simulador Aspen Plus[®]. Esta etapa apresentou diversos desafios em decorrência da complexidade da mistura, como o número elevado de componentes e a formação de azeótropo. Em determinados pontos, a estimativa inicial, bem como as configurações do simulador, tiveram que ser alteradas para garantir a convergência da simulação. Para geração do conjunto total, estima-se que são necessárias 26 horas de tempo computacional, ou cerca de 1 minuto para cada um dos 1.564 pontos gerados. No entanto a facilidade de resolução do problema é função da região de operação da coluna simulada, e mais tempo é exigido para purezas maiores de modo que esta estimativa é muito inferior ao total tempo total despendido.

Para o levantamento de dados, foram alteradas as vazões de benzeno e tolueno, principais componentes da coluna na alimentação, em uma faixa entre 0,5 até 1,5 vezes a vazão original do processo real, mantendo-se as demais constantes. Estes valores são mostrados na Tabela 4.1. O intervalo de 1.000 kg/h entre os pontos foi utilizado em cada variável.

Tabela 4.1: Conjunto de dados utilizados.

Variável	Valores
Vazão Tolueno F_T (kg/h)	[8.000; 13.000]
Vazão Benzeno F_B (kg/h)	[15.000; 31.000]

Para a determinação da energia requerida para cada condição de carga utilizou-se o módulo *Design Specification* disponível no simulador. Nesta ferramenta, a condição operacional objetivo, neste caso a especificação de produto, é alcançada dentro de uma tolerância a partir da alteração de uma variável manipulada em um problema de otimização. Nesta ferramenta são definidos ainda o intervalo de valores válidos e a variação máxima das variáveis manipuladas utilizadas na otimização.

Para cada cenário, a demanda de energia requerida foi avaliada em diferentes condições de especificação de benzeno, em massa, nos produtos de topo, neste caso a corrente

lateral da torre, e no fundo. No topo, a pureza do produto foi variada entre 84,8% e 99,97%, mantendo-se fixa a sua composição no fundo em 0,006%. Para alcançar a especificação de produto de topo, utilizou-se como grau de liberdade a vazão total de retirada lateral. A composição do fundo da coluna, por sua vez foi mantida a partir do calor fornecido ao refeedor. Estas duas especificações são mostradas na Tabela 4.2. Nesta configuração, a vazão de refluxo da coluna não é uma variável livre, sendo estabelecida diretamente pelo calor no refeedor e retirada de produto.

O espaçamento entre os pontos de especificação de topo foi sendo reduzido na medida em que a composição de topo se aproxima da unidade, passando de $7E-2$, para valores baixos de x_{esp} , até $1E-4$, para valores maiores. A Figura 4.1 mostra o conjunto de dados utilizados na simulação. Com esta configuração, um total de 1.564 pontos foram gerados.

Tabela 4.2: Especificações para geração de dados.

Parâmetro	Espec. 1	Espec. 2
<i>Variável</i>	Espec. Benzeno topo (x_{esp}) (mássico)	Espec. Benzeno fundo (mássico)
<i>Objetivo</i>	[8,480E-1; 9,997E-1]	6,000E-5
<i>Tolerância</i>	1E-5	1E-7
<i>Variável manipulada</i>	Vazão do produto de topo	Calor no refeedor

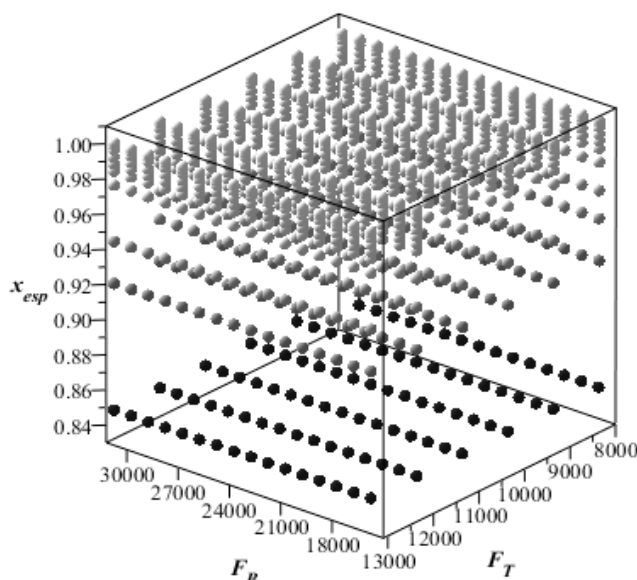


Figura 4.1: Conjunto de dados utilizados na simulação.

Como visto anteriormente, a partir da definição de duas variáveis, a determinação

completa da coluna pode ser obtida. Desta forma, para cada condição de carga e especificação de produto, existirá uma única solução de retirada de produto e calor no refervedor. Esta condição representa a energia requerida para realizar a separação.

4.1.2 Ajuste dos modelos

A partir do conjunto de dados gerados no simulador, três diferentes modelos empíricos foram ajustados para descrever o consumo teórico de energia no processo *BTX*. Este levantamento deu-se em três etapas. Na primeira delas, a condição média original da alimentação foi mantida e o consumo de energia foi obtido em função da especificação de produto apenas. Esta análise inicial forneceu o formato de curva que viria a ser utilizado nos modelos envolvendo mais variáveis.

Com o equacionamento monovariável, os parâmetros deste modelo foram ajustados em diferentes condições de uma nova variável independente, nesse caso a alimentação de benzeno. A partir da identificação da dependência dos parâmetros com a nova variável, foi possível modificar a estrutura do modelo original para que ela fosse levada em conta. Esta avaliação forneceu o modelo de energia em função de duas variáveis independentes.

Em seguida, o mesmo procedimento foi realizado para determinar o modelo que melhor representasse o consumo teórico de energia em função de três variáveis independentes, especificação de produto, e composições de benzeno e tolueno na corrente de alimentação. Este desenvolvimento é detalhado a seguir.

Para ajuste dos modelos com os dados gerados via simulação estacionária, utilizou-se a ferramenta computacional Maple[®] por meio da função *fit*. Esta função obtém os parâmetros do modelo algébrico informado via minimização do erro quadrático. Para inicialização das variáveis, utilizou-se os valores padrão estimados pela função.

4.1.2.1 Energia como função de x_{esp}

A primeira avaliação da energia requerida para o sistema *BTX* foi obtida a partir da variação da especificação do produto de topo, mantendo-se constante a composição de alimentação da torre. Com esta análise foi possível obter a curva de energia em função de uma variável independente, conforme a Equação 4.3.

$$\frac{Q_R}{F} = \frac{Q_R}{F}(x_{esp}) \quad (4.3)$$

Nesta avaliação foram utilizado os dados gerados a partir da alteração da especificação de produto de topo, entre os limites estabelecidos na Tabela 4.1, com $F_B = 22.000$ kg/h, $F_T = 11.000$ kg/h e as demais frações da carga iguais às condições originais da simulação, conforme Tabela 3.2.

A Figura 4.2 mostra os dados simulados para a energia requerida em função da especificação de produto de topo. Nota-se que para valores de especificação de benzeno até 0,99, a exigência de energia na torre é praticamente linear. Para purezas mais elevadas, o comportamento é alterado devido à limitação pela restrição de composição. Percebe-se que esta curva pode ser bem representada por dois termos, um linear para especificações menores, e um com tendência de crescimento abrupto para valores próximos à unidade.

Para encontrar a relação que melhor descrevesse os dados simulados, diferentes formatos típicos de curvas apresentadas por MCCONVILLE (2008) foram testadas. Estas curvas foram ajustadas via minimização do erro quadrático e a adequação ou não dos diferentes modelos foi feita via análise de correlação entre eles e os dados simulados.

A Tabela 4.3 mostra os diferentes formatos de equações avaliados e o ajuste com os dados simulados. Nota-se que a partir da equação número 5, com três parâmetros, as curvas já capturam quase que inteiramente a tendência dos pontos, com coeficiente de correlação, R^2 , muito próximo de 1. Esta equação é mostrada, juntamente com os dados simulados, na Figura 4.2.

Tabela 4.3: Ajuste das curvas de $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ para $F_B = 22.000$ kg/h e $F_T = 11.000$ kg/h.

Equação	Número parâmetros	Formato	R^2
1	2	$a + b^x$	0,7603
2	3	$a + b.E^{(c.x)}$	0,7534
3	3	$a + b.x^{(c.x)}$	0,7606
4	2	$a + b/(1 - x)$	0,9251
5	3	$a + b.x + c/(1 - x)$	0,9986
6	4	$a + b.x + c/(d - x)$	0,9993
7	5	$a + b.x + c/(d - e.x)$	0,9993

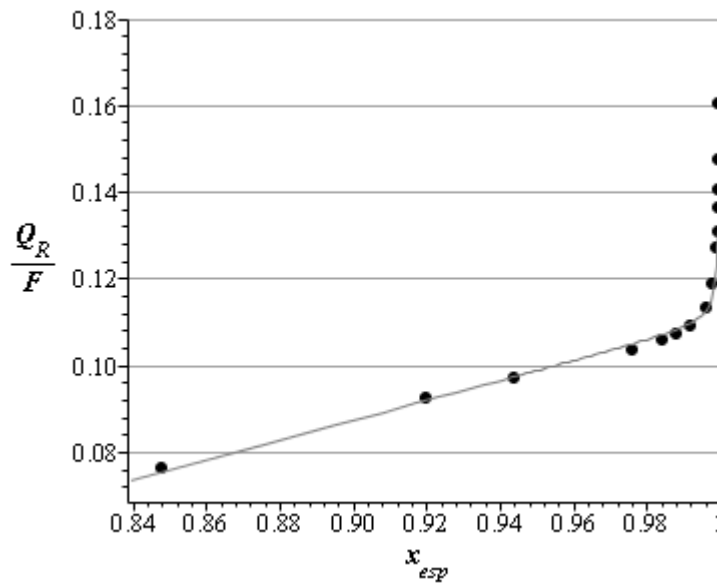


Figura 4.2: Dados simulados (pontos pretos) e modelo para $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$, para $F_B = 22.000$ kg/h e $F_T = 11.000$ kg/h.

A partir desta análise inicial, a equação com três parâmetros, mostrada na Equação 4.4, foi escolhida como ponto de partida para o ajuste dos modelos multivariáveis. Esta equação possui um termo linear, dado por a e b , e um termo não linear ponderado por c . O parâmetro a fornece o valor base do modelo enquanto que b ajusta a inclinação da curva. O terceiro parâmetro pondera os valores mais altos de energia para as especificações de produto maiores que 99%. Os parâmetros encontrados a partir do ajuste via minimização do erro quadrático são mostrados na Tabela 4.4.

$$\frac{Q_R}{F} = a + b \cdot x_{esp} + \frac{c}{(1 - x_{esp})} \quad (4.4)$$

Tabela 4.4: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ para $F_B = 22.000$ kg/h e $F_T = 11.000$ kg/h.

Parâmetro	Valor
a	-1,156E-1
b	2,254E-1
c	1,543E-5

4.1.2.2 Energia como função de x_{esp} e z_B

Depois de identificado o modelo do consumo de energia em função da especificação de produto, é possível gerar o mapeamento de calor requerido em função desta variável e da composição de benzeno na carga, em uma relação conforme Equação 4.5.

$$\frac{Q_R}{F} = \frac{Q_R}{F}(x_{esp}, z_B) \quad (4.5)$$

Nesta avaliação foram utilizado os dados gerados a partir da alteração da vazão de benzeno na alimentação e da especificação de produto de topo, entre os limites estabelecidos na Tabela 4.1, mantendo-se a vazão de tolueno constante com o valor de 11.000 kg/h. Para determinar o formato deste novo modelo, a equação com três parâmetros obtida anteriormente, Equação 4.4, foi avaliada em diferentes condições de composição de carga. Desta forma, é possível quantificar o impacto da variável adicional em cada parâmetro do modelo original e assim modificá-lo de forma adequada.

A Tabela 4.5 mostra a evolução dos três parâmetros, a , b e c , frente às alterações na composição de benzeno na corrente de alimentação na simulação. Estes comportamentos são observados de forma mais clara na Figura 4.3, onde é feita a comparação do percentual de alteração dos parâmetros em relação ao valor base, para a menor fração de benzeno.

Tabela 4.5: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ para diferentes valores de z_B e $F_T = 11.000$ kg/h.

Par.	Fração de Benzeno (z_B)								
	0,449	0,480	0,508	0,533	0,555	0,576	0,594	0,611	0,627
a	-1,65E-2	-4,89E-2	-7,70E-2	-1,03E-1	-1,28E-1	-1,49E-1	-1,68E-1	-1,85E-1	-2,02E-1
b	1,21E-1	1,56E-1	1,85E-1	2,12E-1	2,38E-1	2,61E-1	2,80E-1	2,98E-1	3,16E-1
c	1,82E-5	1,67E-5	1,59E-5	1,56E-5	1,53E-5	1,52E-5	1,52E-5	1,52E-5	1,52E-5

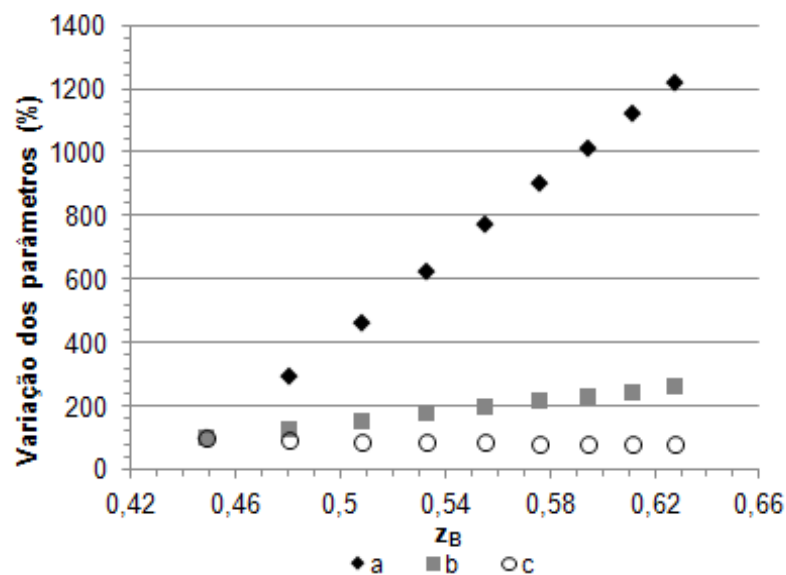


Figura 4.3: Variação dos parâmetros a , b e c para $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp})$ em função de z_B para $F_T = 11.000$ kg/h.

Nota-se na Figura 4.3 que os termos da porção linear do modelo, a e b , são os mais influenciados pela nova variável independente. O primeiro alcança treze vezes o valor original no cenário com maior fração de benzeno na carga. O parâmetro b , por sua vez, tem o seu valor aumentado mais que duas vezes. Desta forma, estes dois parâmetros serão modificados para que a nova variável independente possa ser levada em conta no modelo, enquanto que a dependência de c pode ser negligenciada.

Os comportamentos de a e b em função da variável independente z_B podem ser bem representados por uma equação da reta conforme Equações 4.6 e 4.7, respectivamente. A Tabela 4.6 mostra os valores de a' e b' obtidos pelo ajuste linear para cada parâmetro a e b , além do coeficiente de correlação, R^2 . A partir dos valores para este coeficiente iguais a 0,9999 para as duas variáveis, conclui-se que uma equação da reta pode ser utilizada para representar estes parâmetros.

$$a = a'_a + b'_a \cdot z_B \quad (4.6)$$

$$b = a'_b + b'_b \cdot z_B \quad (4.7)$$

Tabela 4.6: Parâmetros a' e b' para o ajuste linear de a e b para diferentes valores de z_B para $F_T = 11.000$ kg/h.

Parâmetro	a'	b'	R ²
a	0,4502	-1,040	0,9999
b	-0,3661	1,087	0,9999

Dada esta dependência, a Equação 4.4 pode ser modificada e chega-se à Equação 4.8, onde os parâmetros a e b são representados pela forma linear equivalente. A fim de simplificar esta equação, é possível eliminar o termo linear da Equação 4.7, a'_b , termo de menor valor absoluto na Tabela 4.6.

$$\frac{Q_R}{F} = (a'_a + b'_a \cdot z_B) + (a'_b + b'_b \cdot z_B) \cdot x_{esp} + \frac{c}{(1 - x_{esp})} \quad (4.8)$$

Após estas modificações, chega-se à Equação 4.9 para descrever o consumo de energia em função de duas variáveis independentes. Este modelo possui quatro parâmetros, $\{a, b, c, d\}$, além das variáveis x_{esp} , e z_B que representam a especificação de topo e composição de benzeno na carga, respectivamente. A Tabela 4.7 apresenta os parâmetros encontrados para este modelo após ajuste via minimização do erro quadrático.

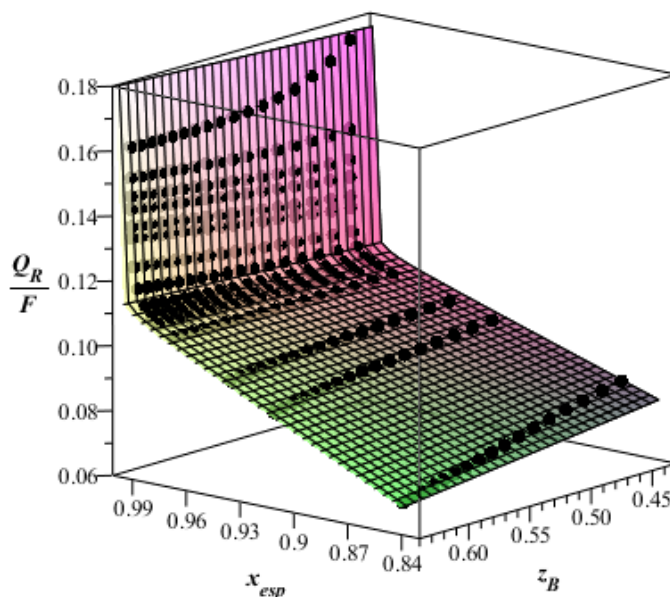
$$\frac{Q_R}{F} = a + b \cdot x_{esp} \cdot z_B + c \cdot z_B + \frac{d}{(1 - x_{esp})} \quad (4.9)$$

Tabela 4.7: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ para $F_T = 11.000$ kg/h.

Parâmetro	Valor
a	9,927E-2
b	4,261E-1
c	-4,064E-1
d	1,569E-5

A Figura 4.4 apresenta os pontos simulados e a superfície modelada com esta equação. É possível observar uma leve não linearidade no eixo z_B , inerente à restrição de soma unitária das frações. A Figura 4.5 mostra uma aproximação dos dados e do resultado previsto pelo modelo para x_{esp} maiores que 0,99.

Avaliando-se o modelo encontrado, percebe-se que ao se manter a especificação de produto constante, a energia requerida obedece à uma relação quase que linear com a composição de benzeno na carga. Esta avaliação só não é verdadeira para restrições baixas, em torno de 85%, e para a especificação mais alta avaliada, 99,97% de pureza em benzeno, representada pela linha superior de pontos no eixo vertical da figura. Neste último caso, nota-se uma maior exigência de energia para a recuperação desta fração de produto à medida que o benzeno na carga é reduzido.

**Figura 4.4:** Dados simulados (pontos pretos) e superfície modelada para $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ e $F_T = 11.000$ kg/h.

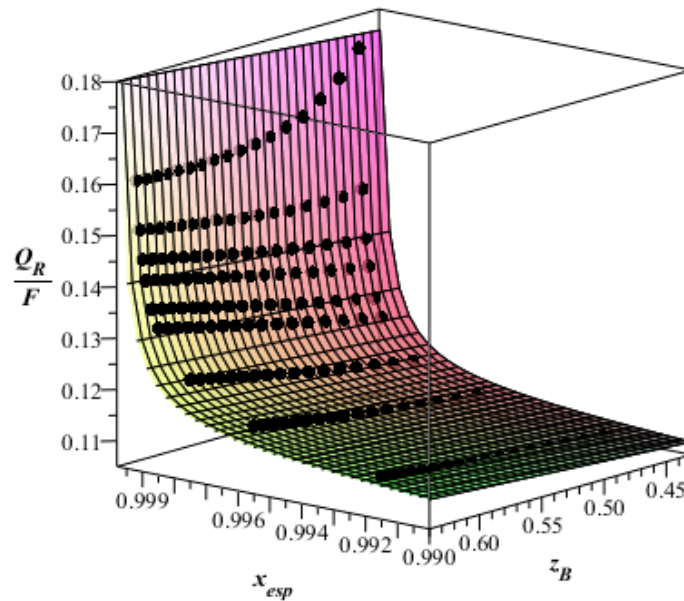


Figura 4.5: Detalhe da Figura 4.4 para x_{esp} maiores que 0,99.

A Figura 4.6 mostra os dados simulados e o resultado do modelo para cada composição de benzeno na alimentação. É possível observar que o modelo utilizado caracteriza bem os dados simulados, principalmente para os valores de especificação de produto mais elevados. Esta observação é validada a partir dos coeficientes de correlação entre as curvas e os dados simulados, na Tabela 4.8. Com exceção da primeira curva, que corresponde à menor fração de benzeno, todas as demais apresentaram R^2 maiores que 0,99.

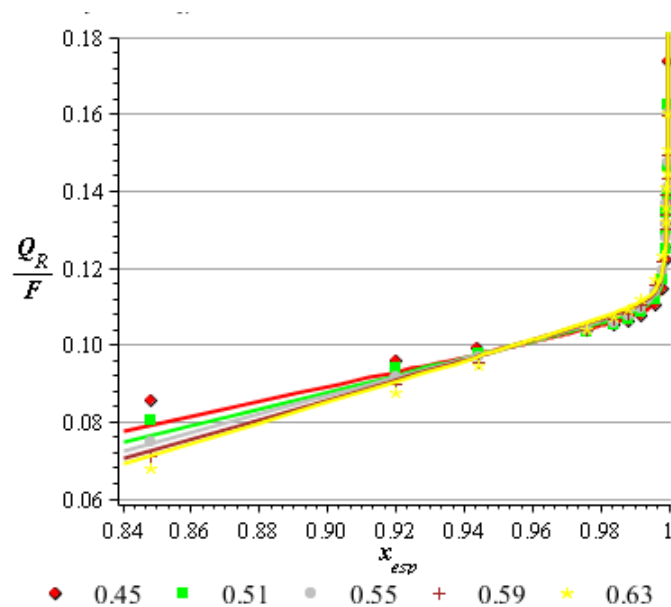


Figura 4.6: Comparação entre os dados simulados e as curvas do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ para $F_T = 11.000$ kg/h.

Tabela 4.8: Correlação dos dados simulados com o modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B)$ para $F_T = 11.000$ kg/h.

z_B	R^2
0,45	0,9821
0,51	0,9982
0,55	0,9982
0,59	0,9960
0,63	0,9936

4.1.2.3 Energia como função de x_{esp} , z_B e z_T

Após mapeada a energia requerida em função de duas variáveis independentes, a mesma análise pode ser feita para avaliar o impacto do tolueno na corrente de alimentação. Com isso, é possível caracterizar o consumo energético da separação em função das três principais variáveis do processo *BTX*, as composições de benzeno e tolueno na carga, e a especificação do principal produto, conforme Equação 4.10.

$$\frac{Q_R}{F} = \frac{Q_R}{F}(x_{esp}, z_B, z_T) \quad (4.10)$$

Como as frações dos diferentes componentes na alimentação não são totalmente independentes e como originalmente, devido a restrições do simulador, alterou-se a vazão de cada componente na simulação para a geração de dados, para facilitar o ajuste dos modelos, a Equação 4.9, obtida anteriormente, foi reescrita multiplicando-se ambos os lados pela vazão total F , Equação 4.11. Uma vez que apenas as vazões de benzeno e tolueno estão sendo avaliadas, a vazão de alimentação pode ser definida como a soma destas duas parcelas com um termo constante, F_0 , dado pela soma dos demais componentes nesta corrente, como mostra a Equação 4.12. Com estas alterações, o consumo de energia pode ser reescrito em função apenas de variáveis independentes e parâmetros pela Equação 4.13.

$$Q_R = a.F + b.x_{esp}.F_B + c.F_B + d.F \cdot \left(\frac{1}{1-x_{esp}} \right) \quad (4.11)$$

$$F = F_0 + F_B + F_T \quad (4.12)$$

$$Q_R = a.(F_0 + F_B + F_T) + b.x_{esp}.F_B + c.F_B + d.(F_0 + F_B + F_T) \cdot \left(\frac{1}{1-x_{esp}} \right) \quad (4.13)$$

Este equacionamento foi utilizado como base para avaliar o impacto das diferentes

vazões de tolueno no modelo. A Figura 4.7 mostra os dados gerados via simulação para a demanda de energia em função da especificação de produto, x_{esp} e vazão de benzeno na alimentação, F_B , para diferentes vazões de tolueno nesta corrente, F_T . À medida que F_T aumenta, na figura no sentido do sentido positivo no eixo vertical, nota-se o deslocamento da superfície no sentido do aumento do consumo de energia.

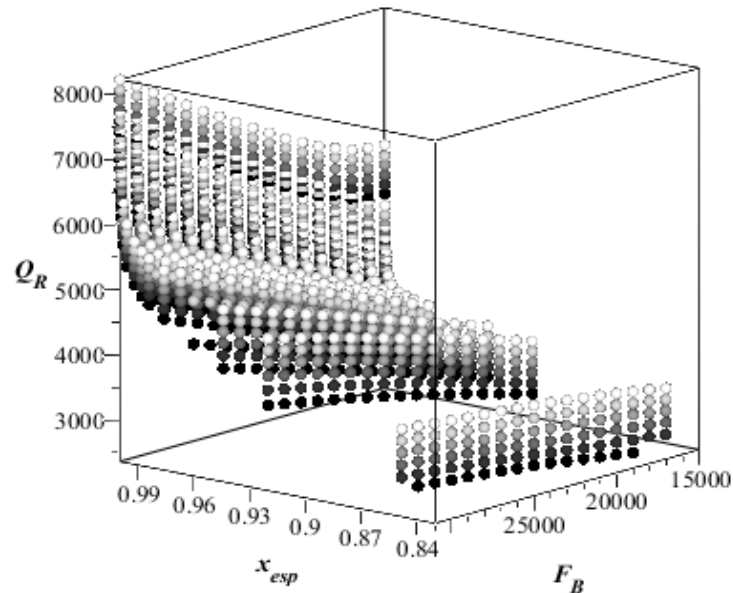


Figura 4.7: Dados simulados para Q_R a partir da variação de x_{esp} e F_B , para diferentes F_T .

Na Tabela 4.9 são mostrados os valores dos quatro parâmetros ajustados para cada uma das vazões de tolueno. A partir destas condições distintas é possível avaliar o impacto de F_T no modelo e, com isso, propor uma nova equação que contemple esta variável independente adicional. Nesta tabela, é possível notar que, como esperado, os parâmetros encontrados para o sistema com F_T igual a 11.000 kg/h, são semelhantes aos verificados anteriormente para o ajuste do consumo específico de energia pela carga, Q_R/F , como mostrado na Tabela 4.7 na seção 4.1.2.2.

A dependência dos quatro parâmetros em função da vazão de tolueno é observada mais claramente na Figura 4.8, onde é feita a comparação da alteração percentual em relação ao primeiro valor, correspondente à menor vazão de tolueno. É possível perceber que em termos percentuais todos os parâmetros são afetados com magnitude semelhante pela variável adicional. A maior variação acontece em b e c , com cerca de 1,2 vezes o valor original.

Tabela 4.9: Parâmetros do modelo $Q_R = Q_R(x_{esp}, F_B)$ para diferentes valores de F_T .

Parâmetro	Vazão de Tolueno (F_T) (kg/h)					
	8.000	9.000	10.000	11.000	12.000	13.000
a	9,344E-2	9,475E-2	9,672E-2	9,894E-2	1,016E-1	1,033E-1

Parâmetro	Vazão de Tolueno (F_T) (kg/h)					
	8.000	9.000	10.000	11.000	12.000	13.000
b	4,972E-1	4,752E-1	4,574E-1	4,402E-1	4,215E-1	4,072E-1
c	-4,718E-1	-4,501E-1	-4,341E-1	-4,193E-1	-4,046E-1	-3,914E-1
d	1,640E-5	1,607E-5	1,581E-5	1,554E-5	1,539E-5	1,497E-5

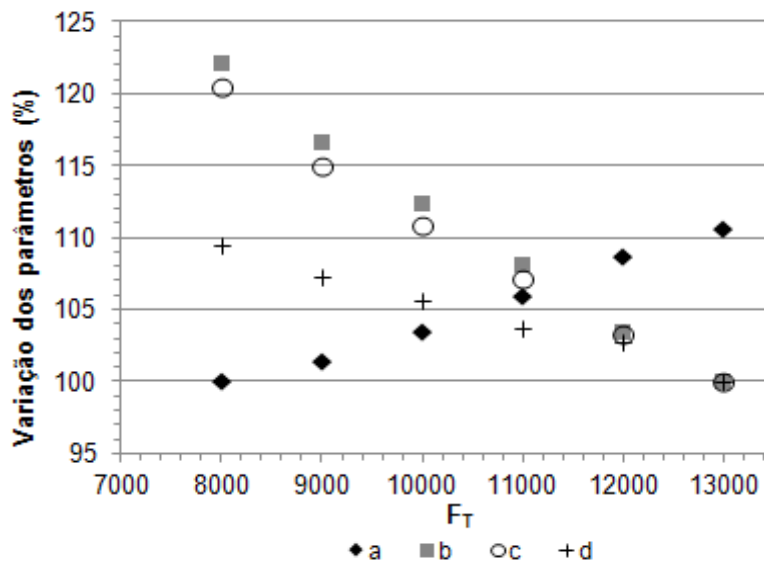


Figura 4.8: Variação dos parâmetros a , b , c e d para $Q_R = Q_R(x_{esp}, F_B)$ em função de F_T .

Estes parâmetros podem ser representados por uma equação linear da mesma forma como visto anteriormente nas Equações 4.6 e 4.7. A Tabela 4.10 mostra os valores dos coeficientes a' e b' obtidos pelo ajuste linear para cada parâmetro. A partir do R^2 elevado, conclui-se que uma reta pode ser utilizada para representar estes parâmetros. Dada esta característica linear, a Equação 4.11 pode ser modificada com a substituição de cada parâmetro pela sua representação linear equivalente. Além disso, para que seja possível obter o cálculo do consumo específico de energia, Q_R/F , a partir desta equação, o termo independente F_T é escrito em função da vazão total F , e assim chega-se à Equação 4.14.

Tabela 4.10: Parâmetros a' e b' para o ajuste linear de a , b , c e d para diferentes valores de F_T .

Parâmetro	a'	b'	R^2
a	7,650E-2	2,059E-6	0,9915
b	6,383E-1	-1,795E-5	0,9968
c	-5,945E-1	1,581E-5	0,9928
d	1,853E-5	-2,703E-10	0,9883

$$Q_R = \left(a'_a + b'_a \cdot \frac{F_T}{F} \right) \cdot F + \left(a'_b + b'_b \cdot \frac{F_T}{F} \right) \cdot x_{esp} \cdot F_B + \left(a'_c + b'_c \cdot \frac{F_T}{F} \right) \cdot F_B + \left(a'_d + b'_d \cdot \frac{F_T}{F} \right) \cdot F \cdot \left(\frac{1}{1-x_{esp}} \right) \quad (4.14)$$

A Equação 4.14 descreve com precisão o consumo de energia em função das três variáveis independentes. Este modelo, no entanto, possui um número elevado de parâmetros que poderiam dificultar o ajuste com dados do processo real. Com o objetivo de simplificá-lo, apenas a dependência do parâmetro a com a vazão de tolueno pode ser levada em conta. Desta forma a Equação 4.14 é reduzida à Equação 4.15, com cinco parâmetros, $\{a, b, c, d, e\}$. Ela permite o cálculo da energia requerida levando-se em conta as vazões de benzeno e tolueno na corrente de alimentação.

$$Q_R = a \cdot F + b \cdot x_{esp} \cdot F_B + c \cdot F_B + d \cdot F_T + e \cdot F \cdot \left(\frac{1}{1-x_{esp}} \right) \quad (4.15)$$

A Figura 4.9 mostra a comparação destes dois modelos para Q_R em função de x_{esp} e F_B com F_T igual a 11.000 kg/h. Para facilitar a visualização, o eixo vertical é mostrado em escala logarítmica. A função com oito parâmetros é representada pela superfície cinza, enquanto que a colorida é tem cinco parâmetros. Percebe-se que a maior discrepância ocorre para valores baixos de especificação de produto. Para valores próximos a 0,99, região de trabalho do processo real, os resultados tornam-se equivalentes como mostra a Figura 4.10.

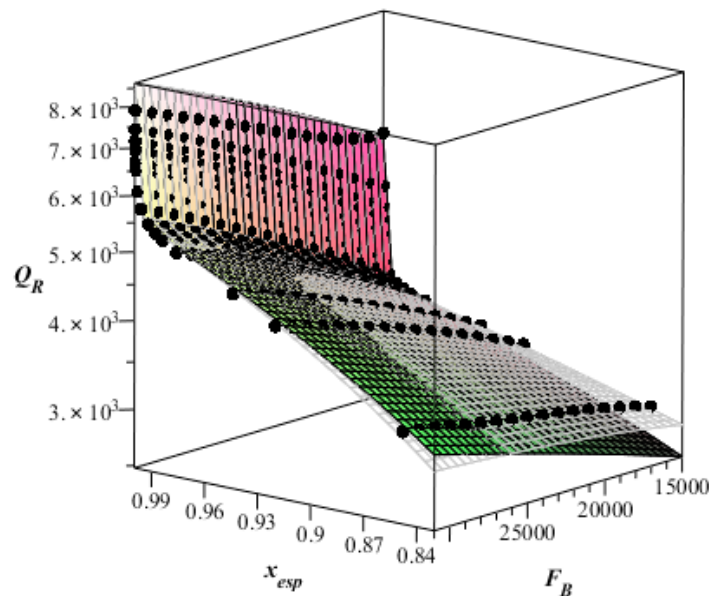


Figura 4.9: Dados simulados (pontos pretos) e modelos de 8 parâmetros (cinza) e 5 (colorido) para $Q_R = Q_R(x_{esp}, F_B, F_T)$ com $F_T = 11.000$ kg/h.

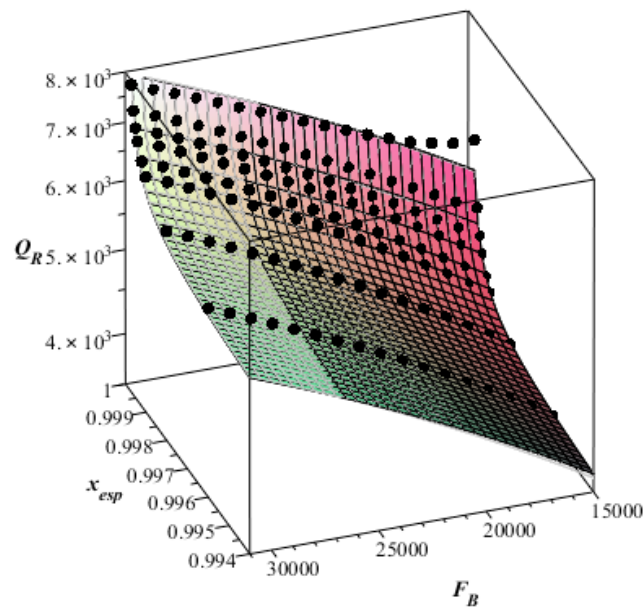


Figura 4.10: Detalhe da Figura 4.9 para x_{esp} maior que 0,994.

Depois de obtido o modelo para o cálculo da energia requerida em função das três variáveis independentes, x_{esp} , F_B e F_T , na Equação 4.15, é possível representá-lo de forma equivalente, sem alteração nos parâmetros, em função da carga total, F . Para isso, pode-se dividir ambos os lados por esta variável, chegando-se à Equação 4.16. Esta equação é representada agora em função da especificação de produto, e composição de benzeno e tolueno na carga, variáveis x_{esp} , z_B e z_T , respectivamente, todas dadas em frações mássicas.

A Equação 4.16 permite o cálculo da energia requerida teórica para o processo *BTX*, conhecendo-se as características dos principais componentes na corrente de alimentação, e determinando-se a especificação de produto desejada. A Tabela 4.11 apresenta os parâmetros finais encontrados para este modelo após ajuste via minimização do erro quadrático.

$$\frac{Q_R}{F} = a + b \cdot x_{esp} \cdot z_B + c \cdot z_B + d \cdot z_T + \left(\frac{e}{1 - x_{esp}} \right) \quad (4.16)$$

Tabela 4.11: Parâmetros do modelo $Q_R/F = Q_R/F(x_{esp}, z_B, z_T)$.

Parâmetro	Valor
a	4,758E-02
b	4,492E-01
c	-3,775E-01
d	8,698E-02
e	1,564E-05

4.2 Cálculo da Eficiência Energética

A partir do equacionamento da energia teórica para atingir uma dada separação, é possível utilizar as curvas de operação como métrica de desempenho do processo de separação. De posse da demanda energética requerida para condição atual de operação, pode-se atuar no processo para que a condição ótima seja alcançada.

Para que o acompanhamento do desempenho processo seja feito, é possível propor o cálculo de eficiência energética conforme Equação 4.17. Nela, a energia atual, ou real, é obtida via cálculo do consumo real, como por exemplo através da vazão de vapor no refulvedor, enquanto que a requerida é calculada pelas curvas de operação. À medida que a energia utilizada aproxima-se do valor ótimo, a eficiência energética do processo aumenta. Valores menores que 100% indicam o desperdício de energia associado normalmente à superespecificação dos produtos. Por outro lado, quando esse índice é maior que 100%, há um indicativo de que as especificações dos produtos não estão sendo respeitadas.

$$\eta = \frac{Q_R \text{ requerido}}{Q_R \text{ real}} \cdot 100\% \quad (4.17)$$

Para avaliar as alterações no processo, as curvas de operação desenvolvidas neste estudo de caso foram aplicadas para validar as alterações nas condições operacionais em uma unidade real. Após alterações na fração de pesados na alimentação da unidade, testes visando à redução no consumo de vapor na coluna foram realizados pelo pessoal de operação. Com a redução na energia utilizada, houve redução no grau de superespecificação do produto de topo. Após algum período nesta situação, as condições originais de operação foram retomadas. Maiores detalhes sobre a motivação para a alteração nas condições operacionais no processo estão disponíveis em KORNELIUS (2011).

Estes dois períodos distintos são referenciadas como C_1 , para a configuração original, e C_2 para a modificada. As condições operacionais para as duas situações são apresentadas na Tabela 4.12.

Tabela 4.12: Propriedades médias para os períodos C_1 e C_2 .

Propriedade	C_1	C_2
<i>Vazão Carga</i> (kg/h)	39.355	41.084
<i>Composição Carga</i> (% mássico B;T;X)	54,32; 25,99; 16,53	54,16; 25,98; 16,50
<i>Composição Produto</i> (% mássico Benzeno)	99,96	99,93
<i>Vazão Vapor</i> (t/h)	12,35	9,864

Propriedade	C ₁	C ₂
<i>Vazão de Refluxo</i> (kg/h)	58.160	47.298

Nota-se uma leve alteração na composição da alimentação, 0,3% a menos na fração de benzeno, e um aumento de cerca de 4% na vazão total no segundo período, 41 t/h ante 39 t/h. Além disso, percebe-se uma redução significativa no consumo de vapor na torre, de 12,3 para 9,86 t/h, na segunda condição. Esta atuação resultou em uma redução no refluxo da coluna de 58,2 para 47,3 t/h, diminuindo a concentração mássica de benzeno no produto de 99,96% para cerca de 99,93% em valores médios.

4.2.1 Cálculo da energia consumida

Para o cálculo da energia utilizada no sistema real, o consumo de vapor no refulvedor da coluna foi avaliado. Para isso assumiu-se que a troca térmica entre o vapor e o líquido de fundo da coluna dá-se inteiramente pelo calor latente do vapor. Desta forma, o calor adicionado ao sistema pelo refulvedor pode ser calculada diretamente pela Equação 4.18. Nesta equação, o calor latente, λ , pode ser obtido a partir da diferença de entalpia entre as fases vapor e líquida na sua condição de pressão e temperatura, consideração que fornece o valor de 513 Mcal por tonelada de vapor.

$$Q_R = m \lambda \quad (4.18)$$

Os valores médios para as duas condições e o consumo energético equivalente são mostrados na Tabela 4.13. Nota-se que para o segundo período houve uma redução significativa na energia consumida pelo refulvedor. Avaliando-se o consumo específico em relação à carga, chega-se à uma redução de 23% no período de operação com menor vazão de vapor, C₂.

Tabela 4.13: Consumo de energia no processo para os períodos C₁ e C₂.

Propriedade	C ₁	C ₂
<i>Vazão vapor</i> (t/h)	12,35	9,864
λ vapor (Mcal/t)	513,1	513,1
Q_R real (Mcal/h)	6.337	5.061
Q_R real/F (Mcal/kg)	0,1609	0,1232

4.2.2 Cálculo da energia requerida

A partir do equacionamento proposto para o cálculo da energia requerida na Equação

4.16, é possível calcular o valor ótimo para o processo para as duas condições avaliadas. Para isso, são utilizados os valores médios no período para a composição de benzeno e tolueno na alimentação, conhecendo-se o valor da especificação do aromático mais leve na corrente lateral, igual à 0,999. Estas são as variáveis independentes utilizadas no modelo. Além delas, a vazão total de carga também é usada.

As variáveis utilizadas no cálculo das duas condições são mostradas na Tabela 4.14, nas unidades requeridas pelo modelo. Esta tabela mostra os resultados calculados para a demanda energética requerida, juntamente com a vazão de vapor equivalente. A partir de uma alteração na composição de benzeno na carga de cerca de 0,3%, e um aumento de 4% na vazão total, no segundo momento, o modelo de energia requerida fornece uma demanda teórica de energia de 0,1246 Mcal/kg, para C_1 , e 0,1244 Mcal/kg para C_2 . Este consumo de energia poderia ser suprido por vazões equivalentes de vapor no refeedor de 9,56 e 9,96 t/h, respectivamente.

Tabela 4.14: Energia requerida para os períodos C_1 e C_2 .

Propriedade	C_1	C_2
x_{esp}	0,9990	0,9990
z_B	0,5432	0,5416
z_T	0,2599	0,2598
Q_R/F (Mcal/kg)	0,1246	0,1244
Q_R (Mcal/h)	4.904	5.113
Vapor Equivalente (t/h)	9,556	9,964

4.2.3 Cálculo da eficiência energética do processo

Após determinada a condição de consumo de energia do processo real, é possível calcular a sua eficiência energética a partir da comparação com a métrica de desempenho dada pelo modelo.

A Tabela 4.15 apresenta a eficiência energética para a coluna *BTX* para as duas condições operacionais, operação normal (C_1), e operação com menor vazão de vapor (C_2). A partir da demanda teórica calculada, chega-se a uma eficiência de 77% para a condição original do processo. Após a redução na vazão de vapor utilizada, C_2 , esse índice alcançou 101%, caracterizando uma operação muito próxima do limite ótimo.

A Figura 4.11 mostra a evolução deste indicador para o processo *BTX* ao longo do tempo. É possível observar claramente o aumento no desempenho energético da unidade a

partir da redução no consumo de vapor.

Tabela 4.15: Eficiência energética do processo para os períodos C_1 e C_2 .

Propriedade	C_1	C_2
Q_R/F_{real} (Mcal/kg)	0,1609	0,1232
$Q_R/F_{requerido}$ (Mcal/kg)	0,1246	0,1244
Eficiência energética (%)	77,4	101

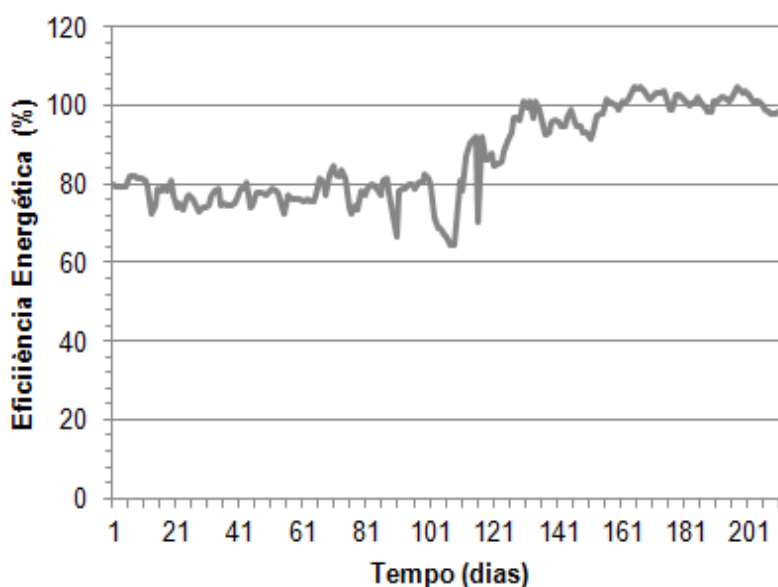


Figura 4.11: Eficiência energética do processo *BTX*.

É importante salientar que a eficiência acima de 100% indicaria que a energia utilizada é menor que a requerida calculada. No entanto, esta condição pode estar associada com a perda de produto nobre na corrente de fundo da coluna. Neste caso, apesar de energeticamente a coluna operar de forma satisfatória, as especificações das duas correntes de produto podem não estar sendo respeitadas. Além disso existem uma série incertezas no cálculo da energia requerida, como considerações de eficiência feitas durante a modelagem do sistema, bem como aos erros de medida no processo. Outra ressalva deve ser feita com relação a indisponibilidade da medida de água na carga. Este componente facilita a separação ao formar um azeótropo com o benzeno, e quando em maior quantidade, reduz a necessidade de energia.

Considerando-se a condição original de operação do processo, conclui-se que é possível reduzir o consumo de energia em cerca de 25% mantendo-se o produto de topo na especificação. Esta nova filosofia operacional traz uma série de benefícios ao sistema, com a redução das vazões internas da torre e a preservação dos equipamentos. Além disso, diminui-se o grau de superespecificação dos produtos, aumentando a sua vazão a partir da

incorporação de contaminantes até a especificação. A possibilidade de operação nesta nova condição é validada pelo método apresentado.

4.2.4 Energia mínima via método de Underwood

Para exemplificar a utilização de um método tradicional para o cálculo da energia mínima, o equacionamento proposto por Underwood (1948) pode ser utilizado. Com ele, é possível calcular a energia mínima teórica para a separação de uma mistura em uma coluna hipotética com número infinito de estágios. Para a aplicação deste método no sistema *BTX*, apenas os três componentes principais da mistura, benzeno, tolueno e xileno, são considerados, e a formação de azeótropo entre a água e o aromático mais leve é negligenciada. Para esta avaliação, são utilizados as variáveis em base molar, como requerido pelo método, diferentemente das grandezas utilizadas anteriormente.

A Tabela 4.16 mostra os parâmetros utilizados para o cálculo da energia mínima nas duas condições operacionais, operação normal (C_1), e operação com menor vazão de vapor (C_2), conforme explicado anteriormente.

Tabela 4.16: Propriedades do sistema *BTX* para o cálculo das raízes de Underwood.

Componente	K_i	α_i	z_i (molar) C_1	z_i (molar) C_2
<i>Benzeno</i>	1,630	2,319	0,6136	0,6132
<i>Tolueno</i>	0,7030	1,000	0,2489	0,2494
<i>Xileno</i>	0,3040	0,4324	0,1374	0,1375

As constantes de equilíbrio dos componentes, K_i , são os valores médios em cada estágio de equilíbrio obtidos via simulação. A volatilidade relativa, α_i , por sua vez, é determinada em relação ao componente chave pesado, neste caso, o tolueno. Como visto anteriormente, o valor da raiz de Underwood deve estar entre a volatilidade relativa dos componentes chave leve e pesado, neste caso o benzeno e o tolueno, respectivamente, e estes valores impõem os limites para a solução do cálculo iterativo.

Os valores calculados por este método são mostrados na Tabela 4.17. A partir de uma carga totalmente líquida, ou seja, $q = 1$, o termo no lado esquerdo da Equação 2.29 é nulo e por meio do cálculo iterativo, o valor encontrado para a raiz é 1,207 para as duas situações, C_1 e C_2 . Com este valor pode-se calcular a vazão mínima que deve ser vaporizada na coluna conforme Equação 2.30. É importante salientar que para este cálculo, a vazão de destilado, D , foi obtida via simulação para as duas condições.

Para se atingir a especificação de produto de topo requerida, o valor da vazão vaporizada calculado via equações de Underwood seria de 588 kgmol/h para C_1 , e 614

kgmol/h para C_2 . A partir da entalpia de vaporização da corrente de fundo de 7,98 kcal/mol, obtido via simulação, estes valores podem ser representados em termos de energia, correspondendo à 4.696 e 4.900 Mcal/h para as duas situações, respectivamente.

Tabela 4.17: Resultado do método de Underwood para C_1 e C_2 .

Propriedade	C_1	C_2
x_D (mol)	0,999	0,999
D (kgmol/h)	282,8	295,0
$(1 - q)$	0	0
θ	1,207	1,207
V_{min} (kgmol/h)	588,4	614,0
Q_R (Mcal/h)	4.696	4.900

Como esperado, os valores calculados via raízes de Underwood são menores que os calculados pelas curvas de operação. Enquanto o modelo de energia requerida fornece 4.904 e 5.113 Mcal/h, para C_1 e C_2 , respectivamente, os valores encontrados com o método são de 4.696 e 4.900 Mcal/h para estas duas condições. Esta discrepância deve-se às considerações do método, principalmente o número infinito de estágios. No entanto cabe salientar que apesar das inúmeras considerações, o valor encontrado pelo método de Underwood é próximo dos reais e este fato justifica a sua popularidade. É necessário destacar, no entanto, que no processo real a formação de azeótropo entre a água e o benzeno facilita a separação desta corrente da fração restante de aromáticos. Desta forma, a demanda de energia é reduzida, tornando o valor real mais próximo da energia mínima calculada.

A mesma análise pode ser feita a partir da metodologia proposta por HALVORSEN & SKOGESTAD (2003a) para o cálculo da energia mínima via diagramas de vazão vaporizada mínima, V_{min} . Como visto anteriormente, este método gráfico é baseado nas equações de Underwood e por isso as mesmas considerações são feitas. Para se elaborar este diagrama para um sistema ternário, três pontos principais devem ser determinados, P_{AB} , P_{AC} , e P_{BC} . Os dois primeiros correspondem aos picos do diagrama onde não há a distribuição dos componentes, enquanto que o terceiro ponto é o vale do diagrama, no qual ocorre a distribuição de B entre os produtos de topo e fundo da coluna. Além disso, são determinados os pontos da solução trivial, onde $D = 0$ e não há separação (P_θ), e onde todos os componentes são recuperados no topo, $D = F(P_I)$.

A Tabela 4.18 mostra os pontos calculados para o sistema BTX . Como as condições de composição de carga são similares para as duas condições de consumo de vapor, a fim de exemplificar a utilização da metodologia, apenas os pontos do diagrama para C_1 são apresentados. A caracterização do sistema real para os pontos C_1 e C_2 , também é mostrada

nesta tabela. Para este levantamento, a vazão de destilado D é dada em função da composição e vazão de carga. A vazão vaporizada V , é dada pelo consumo de vapor do processo real, conhecendo-se a entalpia de vaporização da corrente de fundo e a qualidade do vapor utilizado.

Tabela 4.18: Pontos do diagrama V_{min} do processo BTX .

Ponto	D/F	V/F
P_{AB}	0,6136	1,280
P_{AC}	0,6885	0,9178
P_{BC}	0,8626	1,252
P_0	0	0
P_1	1	0
C_1	0,6136	1,724
C_2	0,6132	1,319

A partir destas informações é possível montar o diagrama de V_{min} conforme Figura 4.12. Esta representação mostra as condições de consumo mínimo de energia para diferentes combinações das recuperações dos produtos, benzeno, tolueno e xileno. Qualquer ponto acima da curva de V_{min} ($P_0 - P_{AB} - P_{AC} - P_{BC} - P_1$), representa o consumo de energia maior que o mínimo. Com os pontos C_1 e C_2 , é possível observar a grande redução no consumo de energia no segundo momento. Em termos percentuais o consumo passou de 53% maior que a energia mínima prevista, no primeiro caso, para 3% maior no segundo. Nota-se que nesta situação, a operação da unidade aproximou-se bastante da condição de mínima energia.

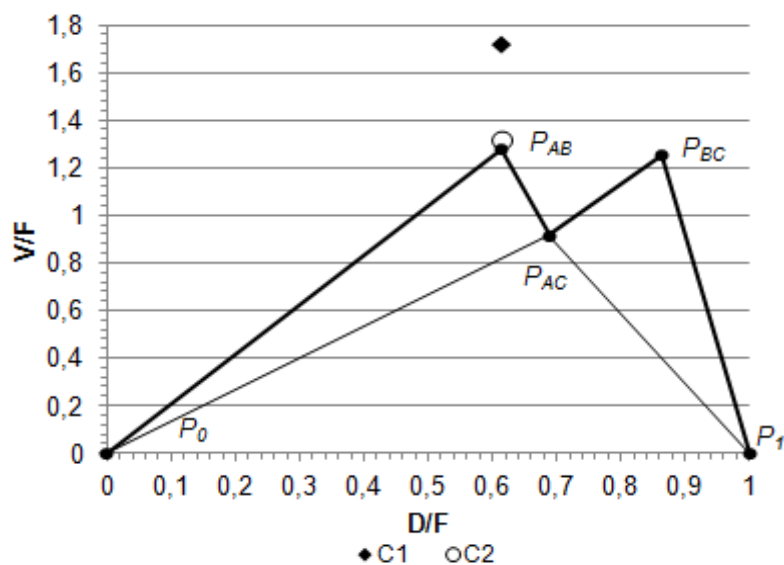


Figura 4.12: Diagrama V_{min} do processo BTX e caracterização do sistema real para C_1 e C_2 .

Capítulo 5

Estratégias de Controle Utilizando a Energia Requerida para a Separação

A partir da definição da eficiência energética como métrica de desempenho de um processo de separação, é possível utilizar-se este indicador em diferentes estratégias de controle visando a operação do processo em condições próximas às do ponto de máxima eficiência. Com a utilização desta variável, há uma alteração significativa na filosofia de controle do processo, uma vez que além das condições de produção normalmente acompanhadas, como vazão e qualidade dos produtos, a efetividade da energia utilizada também passa a ser considerada.

Para que fosse possível avaliar o emprego deste indicador em estratégias de controle, uma simulação dinâmica do processo *BTX* foi desenvolvida na ferramenta Aspen Dynamics®. A partir desta simulação, duas diferentes alternativas foram avaliadas, uma mais simples considerando a configuração atual com apenas uma variável controlada, e outra onde a eficiência energética é utilizada em conjunto com um controle de composição no topo da coluna.

Nestes exemplos, a energia teórica requerida para a separação é obtida a partir dos modelos para as curvas de operação obtidas anteriormente. A proposta de utilização da eficiência como variável de controle aqui apresentada, no entanto, pode ser empregada também para outros indicadores de energia ou parâmetros operacionais como, por exemplo, as composições de produto.

5.1 Simulação Dinâmica

A Figura 5.1 apresenta a simulação dinâmica do processo *BTX* implementada no simulador dinâmico Aspen Dynamics®. Foram configurados controladores para as mesmas variáveis existentes no processo real para a torre e o vaso de acúmulo. Na torre, o nível de fundo é controlado pela malha *LIC-2*, que atua na retirada de produto de fundo. No topo da

coluna a diferença de temperatura é mantida pelo controlador *TDIC-3*, que atua na retirada lateral de produto. Para facilitar o controle do processo na simulação, um controlador adicional foi configurado para manter a temperatura da corrente de topo após o condensador, *TIC-6*. Esta malha evita o resfriamento excessivo do refluxo da coluna durante a inicialização da simulação e garante que a corrente de saída esteja na condição de líquido subresfriado. Além disso, outras duas características foram alteradas, com a substituição da malha de vazão de vapor, existente no processo real, por um controle de carga térmica, *DIC-1*, e a adição de um controle de pressão na coluna, *PIC-5*.

No vaso de acúmulo de topo, três malhas são utilizadas. A pressão é controlada pela retirada de produto vaporizado, *PIC-7*, enquanto que os níveis das fases orgânica e líquida, são garantidas pelos controladores *LIC-4* e *LIC-8*, respectivamente.

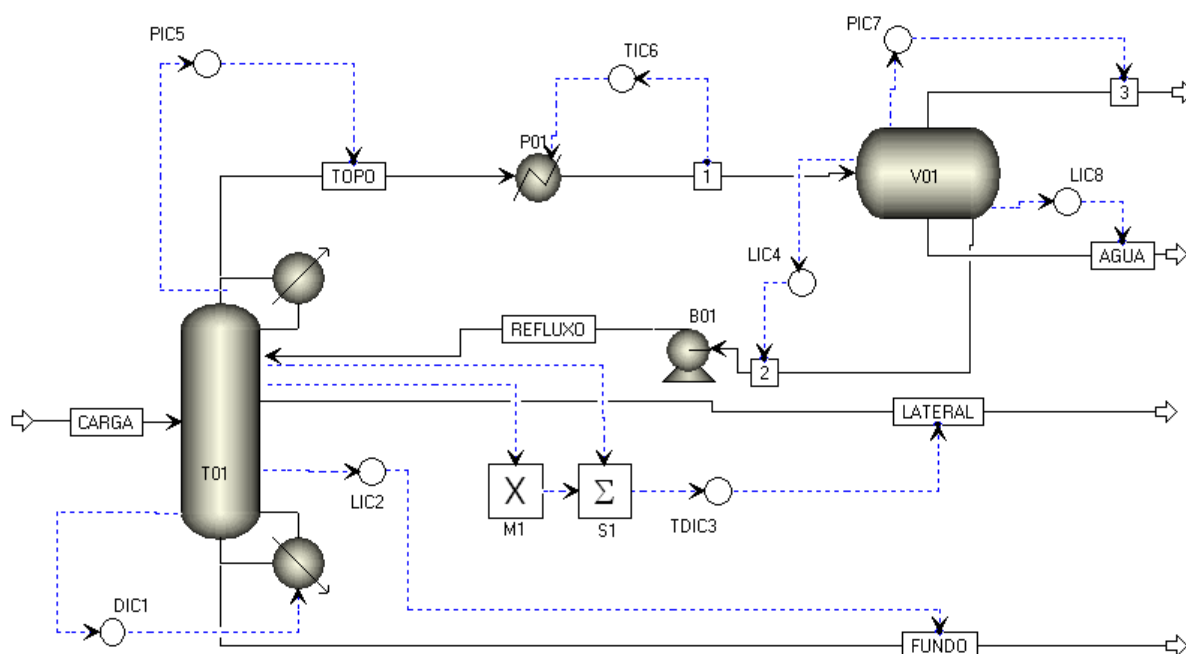


Figura 5.1: Simulação dinâmica da coluna *BTX* implementada em Aspen Dynamics®.

Para avaliar o comportamento dinâmico do sistema *BTX*, as mesmas condições da simulação estacionária, apresentadas no capítulo 3, nas Tabelas 3.1 à 3.6, foram utilizadas. Para caracterizar a simulação dinâmica, no entanto, algumas propriedades adicionais relacionadas à geometria dos equipamentos foram definidas. Os valores utilizados na simulação para a coluna, o condensador de topo, e o vaso de acúmulo, são mostrados nas Tabelas 5.1 à 5.3, respectivamente.

Tabela 5.1: Especificações da coluna de destilação.

Propriedade	Valor
<i>Tipo de transferência de calor no refeedor</i>	calor constante
<i>Formato reservatório</i>	semiesférico
<i>Altura reservatório</i>	1,5 m
<i>Diâmetro reservatório</i>	2,4 m
<i>Condição inicial de fração de líquido</i>	0,6
<i>Tipo de prato</i>	prato simples
<i>Diâmetro do prato</i>	2,4 m
<i>Espaçamento entre os pratos</i>	0,6 m
<i>Altura do vertedouro</i>	0,051 m
<i>Lw/D</i>	0,7267
<i>Área ativa do prato</i>	90 %

Tabela 5.2: Especificação do permutador de topo.

Propriedade	Valor
<i>Tipo de transferência de calor</i>	calor constante

Tabela 5.3: Especificação do vaso de acúmulo.

Propriedade	Valor
<i>Tipo</i>	horizontal
<i>Formato topo</i>	semiesférico
<i>Comprimento</i>	5,1 m
<i>Diâmetro</i>	1,9 m
<i>Condição inicial de fração de líquido</i>	0,56

As sintonias utilizada nos principais controladores da simulação, assim como os valores de *setpoint*, são apresentados na Tabela 5.4. O algoritmo de cálculo da ação de controle utilizado é do tipo paralelo onde as ações dos termos proporcional, integral e derivativo são somadas independentemente. Nela são definidas o ganho proporcional K_p em %, e as constantes de tempo integral e derivativo, T_i e T_d , respectivamente. Para a simulação em questão, foram configurados controladores com ação proporcional e integral ajustados heurísticamente.

Tabela 5.4: Sintonias dos controladores utilizados na simulação dinâmica.

Controlador	SP	K_p	T_i (min)
<i>DIC-1</i>	6.300 Mcal/h	5	1
<i>LIC-2</i>	50 %	2,5	6
<i>TDIC-3</i>	11 °C	14	5
<i>LIC-4</i>	50 %	6,5	7,7
<i>PIC-5</i>	1,1 bar	31	2,7

5.2 Utilização da Energia Requerida

A estratégia de controle original do processo, apresentada anteriormente no capítulo 3 deste trabalho, utiliza apenas um dos dois graus de liberdade disponíveis para controlar a composição dos produtos. Enquanto que a composição de topo é mantida a partir do controle do diferencial de temperatura, na seção superior da coluna, a temperatura de fundo é mantida manualmente pela manipulação da vazão de vapor no refeedor.

Para que seja possível a utilização da energia requerida no controle da unidade, um bloco de cálculo pode ser implementado com o equacionamento proposto neste trabalho. A Figura 5.2 ilustra uma das alternativas para a otimização do processo. Nesta configuração, o bloco de cálculo, referenciado por Q_R na figura, atua como *feedforward* utilizando as informações da corrente de alimentação para calcular a condição requerida de energia a partir dos modelos das curvas de operação. Com isso o bloco calcula a energia requerida para que o processo atinja a separação desejada no topo, neste exemplo igual à 0,999. Este cálculo é então utilizado como *setpoint* remoto de um controlador de carga térmica, *DIC-1*. Com esta estratégia, a vazão de vapor passa a ser corrigida automaticamente em função das características da alimentação da unidade, otimizando a utilização da energia. O controle do diferencial de temperatura no topo, por sua vez, pode ser utilizado para atingir a separação desejada em função da energia fornecida ao refeedor.

A comparação da estratégia de controle proposta com a original pode ser feita a partir da resposta da simulação a distúrbios no processo. Para esta avaliação foram utilizados

degraus de 10%, relativos ao valor original da simulação, em duas variáveis, a composição de benzeno na alimentação, e vazão total desta corrente. Estas perturbações foram executadas em ambas as direções, em degraus equivalentes à metade da amplitude total. A Figura 5.3 mostra a sequência destes distúrbios.

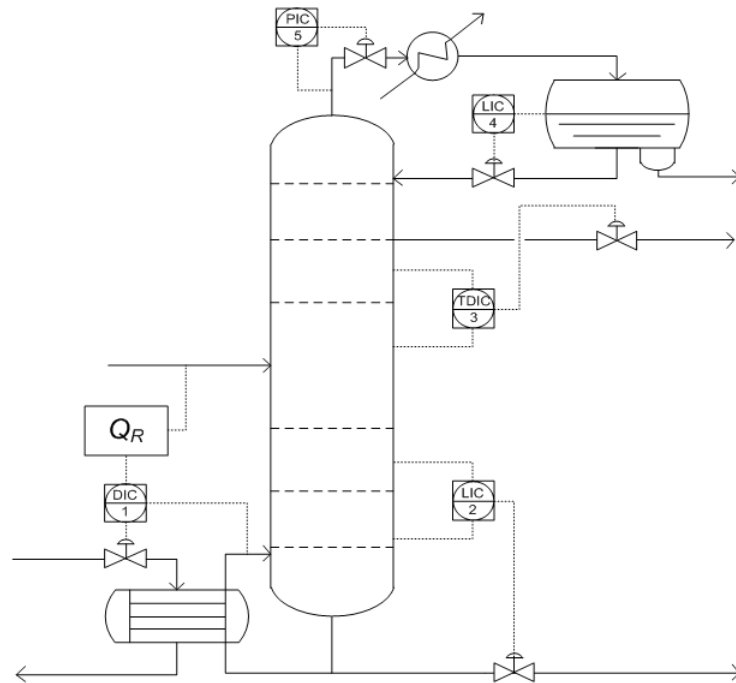


Figura 5.2: Estratégia de controle da coluna *BTX* com bloco de energia requerida.

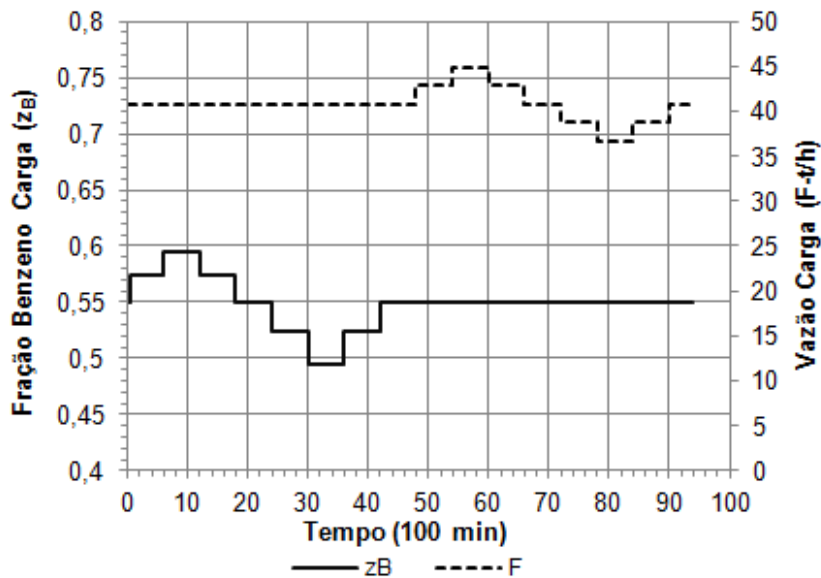


Figura 5.3: Sequência de distúrbios avaliados na simulação.

Nesta avaliação três estratégias de manutenção da carga térmica foram utilizadas, constante igual ao valor inicial (C_1), constante igual ao valor reduzido (C_2), e corrigida pelo

bloco de cálculo (C_3). A Figura 5.4 mostra o comportamento da composição do produto de topo frente às perturbações para os três casos. A quantidade de energia utilizada em cada um dos casos é mostrada na Figura 5.5.

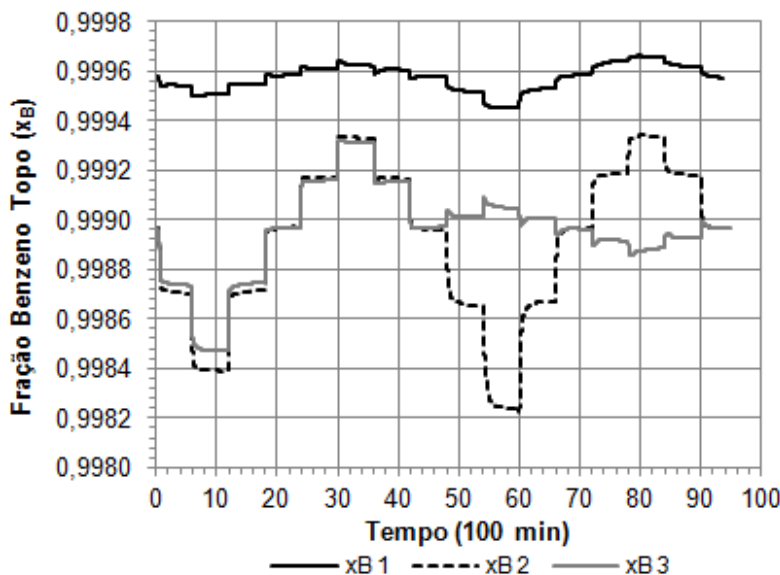


Figura 5.4: Impacto dos distúrbios no produto de topo para C_1 (x_{B1}), C_2 (x_{B2}) e C_3 (x_{B3}).

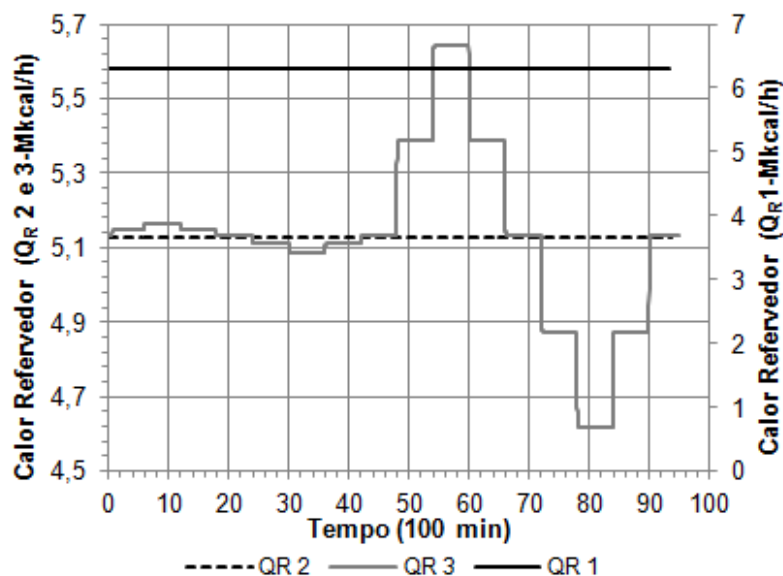


Figura 5.5: Energia utilizada no refervedor para C_1 (Q_{R1}), C_2 (Q_{R2}) e C_3 (Q_{R3}).

Na estratégia original (C_1), com carga térmica elevada e produto superespecificado, a composição do produto de topo é pouco alterada frente aos distúrbios. Quando a quantidade de energia é reduzida e mantida constante em um patamar inferior, a composição sofre um forte impacto e o produto sai de especificação, para alterações na composição e vazão total de alimentação. É importante salientar que a resposta do sistema para a condição original (C_1), explica a preferência na prática pela utilização de uma vazão de vapor maior que a necessária.

Nesta condição, é possível atender às especificações de produto independente dos distúrbios.

A partir da utilização do bloco de cálculo (C_3), a energia requerida para a separação passa a ser corrigida automaticamente em resposta aos distúrbios. Na medida em que a fração de benzeno aumenta na carga, uma quantidade maior de energia passa a ser requerida, já que este incremento deve ser recuperado no topo. O mesmo efeito é gerado pelo aumento na vazão total da corrente. Com estas correções, nota-se uma redução no impacto dos distúrbios na composição do produto de topo. No entanto, é possível perceber que a resposta do bloco às alterações na composição da carga é insuficiente para manter especificado o produto de topo.

A incapacidade desta estratégia em manter o controle da composição de topo está associada principalmente com a utilização do controlador de diferença de temperatura. Como visto anteriormente, a manutenção de uma temperatura, na coluna não é suficiente para controlar a concentração de uma corrente em um sistema multicomponente. Como consequência, tem-se que, mesmo com a definição correta do calor requerido pelo bloco de cálculo, o controle desta variável não garante a composição do produto de topo. Outro fator que contribui para essa falta de acuracidade são as imprecisões do modelo de energia requerida. Como visto no capítulo 4, durante a identificação dos modelos, optou-se por utilizar um número reduzido de parâmetros com o intuito de facilitar o ajuste com dados de planta para outros processos. Esta alternativa reduziu obviamente a precisão do modelo.

A composição do benzeno na corrente de fundo da coluna para os três casos é apresentada na Figura 5.6. Para o sistema com a configuração original (C_1), a menor fração de benzeno é obtida. Com uma menor quantidade de energia (C_2) tem-se um aumento na fração deste componente. Nota-se também o impacto dos distúrbios no processo nesta condição, principalmente a partir da alteração na vazão total de carga, impacto que é diminuído na configuração proposta (C_3).

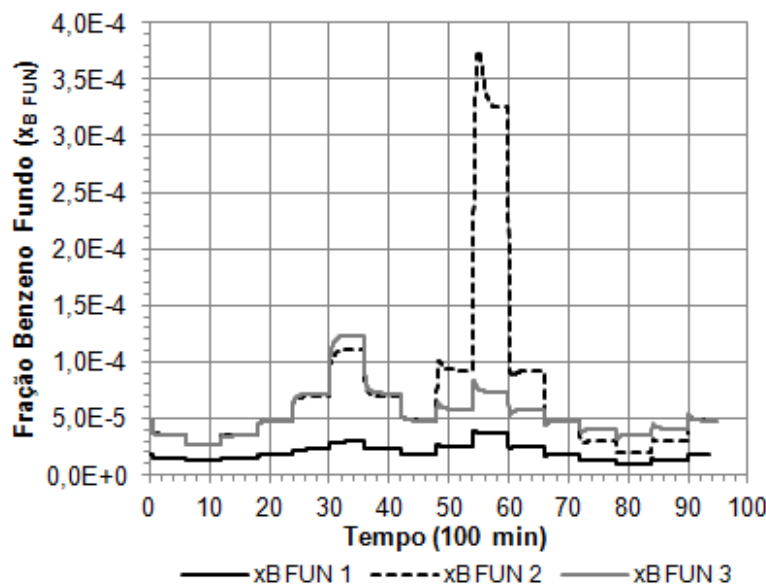


Figura 5.6: Impacto dos distúrbios no produto do fundo para C_1 (x_{BFUN1}), C_2 (x_{BFUN2}) e C_3 (x_{BFUN3}).

5.2.1 Estratégia alternativa

A fim de contornar as limitações impostas pela utilização do diferencial de temperatura para controlar a composição de topo da coluna, uma configuração alternativa pode ser utilizada em conjunto com o bloco de cálculo proposto, como mostra a Figura 5.7. Neste caso, um controlador de composição, *AIC-6*, pode ser utilizado como malha externa da malha de temperatura em uma estratégia cascata. Nesta configuração, à medida que a composição de topo afasta-se do valor de referência, o controlador de composição define o valor de *setpoint* do diferencial de temperatura, e, com isso, altera a vazão de retirada de produto. No fundo da coluna, o bloco de cálculo Q_R utiliza as informações da alimentação para calcular a condição requerida de energia, da mesma forma que na estratégia anterior.

Para tornar este exemplo mais próximo do sistema real, um bloco foi configurado no simulador dinâmico para discretizar o sinal da análise da corrente de topo. Com o tempo de atualização configurado em 15 minutos, o comportamento dos cromatógrafos em linha utilizados na unidade real pode ser bem representado. Adicionalmente, um bloco de filtro foi adicionado ao sinal do analisador para tornar mais suave as transições entre as análises.

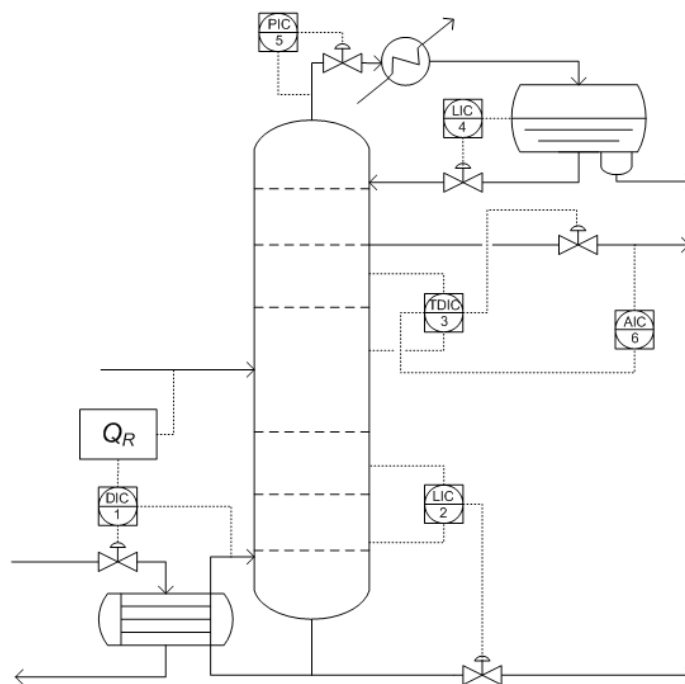


Figura 5.7: Estratégia de controle da coluna *BTX* com de energia requerida e estratégia alternativa.

A Figura 5.8 mostra o comportamento das composições de topo e fundo frente aos distúrbios na composição de alimentação e vazão total (Figura 5.3) utilizando-se um *setpoint* de 0,999 no *AIC-6*. Nota-se o bom desempenho alcançado pela atuação conjunta destes controladores. Como a especificação de fundo não é rígida, esta estratégia poderia ser implementada para a operação da planta real.

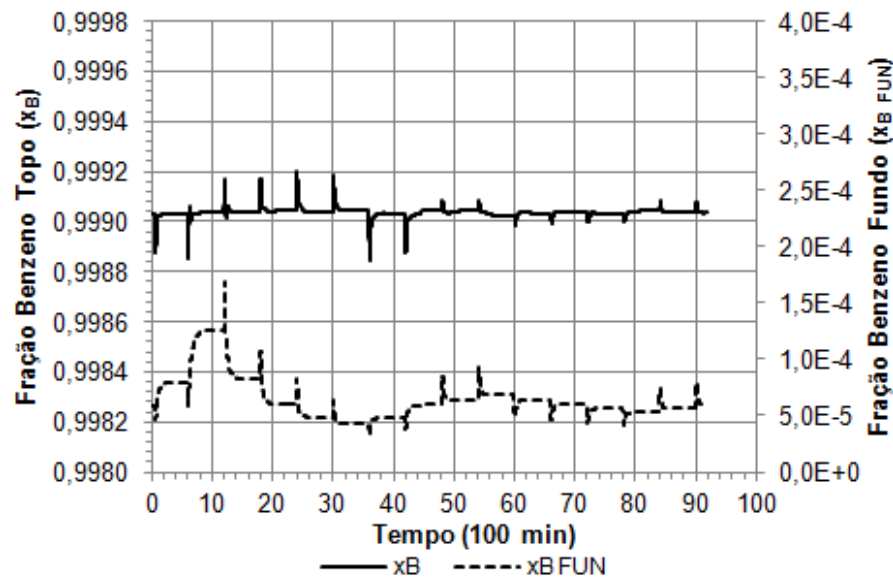


Figura 5.8: Impacto dos distúrbios nos produtos de topo e fundo para a configuração alternativa.

A partir da manutenção da composição de topo no valor de especificação, um incremento na vazão desta corrente pode ser obtido com a incorporação de inertes. Comparando-se as vazões de retirada para o caso original, com produto superespecificado, e esta configuração alternativa, na simulação, tem-se um acréscimo médio de 10,5 kg/h, ou 92 t/ano, no segundo caso para este sistema.

Comparando-se esta configuração com outras opções comumente utilizadas, a aplicação da eficiência energética em uma estratégia *feedforward* traz benefícios. Ao se comparar com uma estratégia *PID* convencional com dois controladores de composição, por exemplo, esta estratégia tem a vantagem de não apresentar interação já que não há ação *feedback* no fundo da coluna. Além disso, a sua implementação é mais simples que um controlador preditivo multivariável, uma vez que apenas um bloco de cálculo precisa ser configurado.

É importante salientar que esta estratégia é possibilitada pela ausência de uma especificação rígida na composição de fundo na coluna. Em um sistema onde as duas correntes precisem ser especificadas, a eficiência energética pode ser utilizada em conjunto com alguma alternativa de correção em linha do modelo.

Capítulo 6

Conclusões

No presente trabalho, uma nova metodologia para a otimização da eficiência energética em colunas de destilação foi proposta. A partir de uma simulação estacionária de um processo de separação, validada com dados do processo real, modelos empíricos de curvas de operação baseadas na energia requerida foram obtidos conforme Equação 4.16.

Com a utilização apenas da energia necessária para alcançar a separação desejada, ganhos financeiros e ambientais podem ser alcançados. A partir da redução das vazões internas, é possível aumentar a carga processada na torre. Outro benefício é o aumento da vazão de produto mediante a incorporação de contaminantes até o limite de especificação. Como menos energia é necessária, as emissões atmosféricas, oriundas da queima de combustíveis fósseis, também podem ser reduzidas.

A partir dos modelos de energia requerida, foi possível propor o índice de eficiência, η , como métrica de desempenho para otimização de um processo de separação. Como a forma funcional destas curvas é determinada a partir de simulação rigorosa, a limitação das simplificações dos métodos tradicionais, como número infinito de estágios e vazões internas constantes, não se aplica. Além disso, a não idealidade do processo já é levada em conta diretamente pela simulação e a grande vantagem da utilização dos modelos de curvas de operação, em detrimento dos métodos tradicionais, está associada à comparação com o desempenho ótimo daquele sistema, e não ao de uma condição ideal.

Uma vez conhecida a forma de dependência deste modelo para um determinado tipo de coluna de destilação, o seu ajuste pode ser feito a partir de dados de processo. Para isso, em condições normais de operação, conhecidos a composição das correntes de alimentação e dos produtos, para diferentes condições de alimentação, o consumo de energia real pode ser utilizado para corrigir o valor predito pelo modelo. Como poucos parâmetros são utilizados, este procedimento torna-se facilitado. Estas características permitem que estas curvas sejam utilizadas como ferramenta de otimização empírica, sem a necessidade de um modelo do processo.

A metodologia proposta foi avaliada no estudo de caso de uma coluna de separação de benzeno, tolueno e xileno (*BTX*). Para este processo, um modelo para o cálculo da energia foi desenvolvido. Este possui como entradas três variáveis que caracterizam a corrente de alimentação, as frações mássicas de benzeno e tolueno, e a especificação desejada no produto de topo. Com o modelo de energia requerida identificado para o processo *BTX*, duas condições operacionais distintas do processo real foram avaliadas com relação a sua eficiência. A partir da redução na vazão de vapor no refeedor, foi possível aumentar a eficiência energética do processo de 75 para cerca de 100%, indicando a operação muito próxima do ponto ótimo. Estas duas condições foram avaliadas também com o equacionamento proposto por Underwood para o cálculo da mínima vazão de vapor necessária para a separação.

A fim de avaliar a utilização energia requerida em estratégias de controle na coluna de destilação, duas estruturas alternativas foram propostas. A partir de uma simulação dinâmica do processo, as diferentes configurações foram analisadas em resposta a distúrbios na corrente de alimentação. Com a utilização de um bloco de cálculo com o modelo obtido, a energia requerida passa a ser atualizada automaticamente com as informações da carga, reduzindo o impacto dos distúrbios nas composições dos produtos.

A configuração do bloco de cálculo em conjunto com a estratégia original de controle do sistema *BTX* mostrou-se insuficiente para manter a especificação dos produtos. A incapacidade desta estratégia está associada principalmente à utilização do controlador de temperatura no topo, uma vez que o controle desta variável não garante a composição dos produtos para um sistema multicomponente. Para contornar esta limitação, uma segunda alternativa foi avaliada com a configuração de um controlador de composição em cascata com a malha de diferencial de temperatura no topo. Esta estratégia apresentou melhor desempenho entre com relação à configuração anterior. A utilização do bloco de cálculo permitiu que apenas a energia requerida fosse utilizada, enquanto que o controle de composição garantiu a especificação do produto nestas situações. Com esta configuração, de acordo com os dados da simulação, seria possível obter um incremento na vazão desta corrente que chegaria a 92 t/ano, a partir da incorporação de inertes.

Comparando-se esta configuração com outras opções comumente utilizadas, a aplicação da eficiência energética em uma estratégia *feedforward* traz benefícios, já que não apresenta interação entre as variáveis, problema normalmente encontrado em estratégias com dois controladores *PID* de composição, por exemplo. Além disso, a sua implementação é mais simples que um controlador preditivo multivariável, já que apenas um bloco de cálculo estático precisa ser configurado.

6.1 Sugestões para Trabalhos Futuros

O aumento da eficiência energética em colunas de destilação é um assunto bastante amplo e que tem recebido cada vez mais atenção na indústria. Este trabalho apresenta uma

nova metodologia para a otimização de sistemas que encontram-se em operação a partir da alteração das condições operacionais. A partir desta proposta inicial uma série de estudos podem ser desenvolvidos, entre elas:

1. Identificação dos modelos de energia requerida para outras colunas de destilação, como por exemplo unidades de processamento de gás natural;
2. Emprego da especificação dos dois produtos da coluna como variáveis de entrada do modelo de energia requerida;
3. Extensão da metodologia levando-se em conta um maior número de variáveis independentes para identificação do modelo de energia requerida. Além das características da corrente de alimentação, avaliadas neste trabalho, expressões mais abrangentes podem ser obtidas com a inclusão da pressão da coluna, número de pratos, vazão de refluxo, entre outros;
4. Implementação desta metodologia em um sistema real para otimização da eficiência energética do processo. Para isso os parâmetros do modelo de energia requerida podem ser ajustados com dados reais e um bloco de cálculo pode ser configurado diretamente no sistema de controle.

Referências Bibliográficas

BAHADORI, A.; VUTHALURU, H. B. Simple equations to correlate theoretical stages and operating reflux in fractionators. *Energy*, v. 35, p. 1439-1446, 2010.

BANDYOPADHYAY, S. Effect of Feed on Optimal Thermodynamic Performance of a Distillation Column, *Chemical Engineering Journal*, v. 88, p. 175-186, 2002.

CONZ, V. *Desenvolvimento de Analisadores Virtuais Aplicados a Colunas de Destilação Industriais. Dissertação de Mestrado*, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2005.

DURAIKI, R. G.; FERNANDES, P. R.; TRIERWEILER, J. O.; SECCHI, A. R. Benefícios da Aplicação de Técnicas de Controle Avançado à Unidade de Aromáticos. In: II ENPROMER, 1999, ENPROMER, 1999, Florianópolis, Anais.

ENGELIEN, H. K.; SKOGESTAD, S. Minimum Energy Diagrams for Multieffect Distillation Arrangements. *AIChE*, v. 51, p. 1714-1725, 2005a.

ENGELIEN, H. K.; SKOGESTAD, S. Multi-effect distillation applied to an industrial case study. *Chemical Engineering and Processing*, v. 44 p. 819–826, 2005b.

FRIEDMAN, Y. Z. Tuning Averaging Level Controllers. *Hydrocarbon Processing Journal*, v. 73, p. 101-104, 1994.

GLANZ, S.; STICHLMAIR, J. Minimum energy demand of distillation columns with multiple feeds. *Chemical Engineering Technology*, v. 20, p. 93-100, 1997.

HALVORSEN, I. J.; SKOGESTAD, S. DISTILLATION | Theory Of Distillation, In: WILSON, I. *Encyclopedia of Separation Science*, 1ª ed, Academic Press, Oxford, 2000.

HALVORSEN, I. J.; SKOGESTAD, S. Minimum Energy Consumption in Multicomponent Distillation. 1. V_{min} Diagram for a Two-Product Column. *Ind. Eng. Chem. Res*, v. 42, p. 596-604, 2003a.

HALVORSEN, I. J.; SKOGESTAD, S. Minimum Energy Consumption in Multicomponent Distillation. 2. Three-Product Petlyuk Arrangements. *Ind. Eng. Chem. Res*, v. 42, p. 605-615, 2003b.

HALVORSEN, I. J.; SKOGESTAD, S. Minimum Energy Consumption in Multicomponent Distillation. 3. More than Three Products and Generalized Petlyuk Arrangements. *Ind. Eng. Chem. Res*, v. 42, p. 616-629, 2003c.

HALVORSEN, I. J.; SKOGESTAD, S. Energy Efficient Distillation. *Journal of*

Natural Gas Science & Engineering, v. 3, p. 571-580, 2011.

KEMPF, A. O. *Avaliação de Desempenho de Malhas de Controle*. Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2003.

KING, C. J. *Separation Processes*, McGraw-Hill, Nova York, EUA, 1971.

KISTER, H. Z. *Distillation Design*. 1ª ed., McGraw-Hill, Nova York, EUA, 1992.

KISTER, H. Z. *Distillation Operation*. 1ª ed., McGraw-Hill, Nova York, EUA, 1990.

KOEHLER, J.; POELLMANN, P.; BLASS, E. A Review On Minimum Energy Calculations For Ideal And Nonideal Distillations. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 34, p. 1003-1020, 1995.

KOEIJER, G.; RIVERO, R. Entropy Production and Exergy Loss in Experimental Distillation Columns. *Chemical Engineering Science*, v. 58, p. 1587-1597, 2003.

KORNELIUS, C. F. *Estudo de Estratégias de Controle e da Eficiência Operacional de uma Coluna de Destilação de Benzeno*. Trabalho de Conclusão de Curso, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2011.

LUCIA, A.; MCCALLUM, B. R. Energy targeting and minimum energy distillation column sequences. *Computers and Chemical Engineering*, v. 34, p. 931-942, 2010.

LUCIA, A.; AMALE, A.; TAYLOR, R. Distillation pinch points and more. *Computers and Chemical Engineering*, v. 32, p. 1342-1364, 2008.

LUCIA, A.; AMALE, A.; TAYLOR, R. Energy efficient hybrid separation processes. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 45, p. 8319, 2006.

LUYBEN, W. L. *Practical Distillation Control*, 1ª ed., Van Nostrand Reinhold, Nova York, EUA, 1992.

LUYBEN, W. L.; TYREUS, B. D.; LUYBEN, M. L. *Plantwide Process Control*, 1ª ed., McGraw-Hill, Nova York, EUA, 1998.

McCABE, W. L.; THIELE, E. W. Graphical Design of Fractionating Columns. *Ind. Eng. Chem.*, v. 17, p. 605-612, 1925.

NEELIS, M.; WORREL, E.; MASANET, E. *Energy Efficiency Improvement and Cost Saving Opportunities For Petrochemical Industry*, An ENERGY STAR® Guide for Energy and Plant Managers, 2008.

MAY J., A. Minimum Reflux Ratio for Multicomponent Distillation. *Ind. Eng. Chem.*, v. 41, p. 2775–2782, 1949.

MCCONVILLE, F. X. Engineering Practice Functions for Easier Curve Fitting. *Chemical Engineering*, v. 115, p. 48-51, 2008.

MONROY-LOPERENA, R.; VARGAS-VILLAMIL, F. D. Determination of the Polynomial Defining Underwood's Equations in Short-Cut Distillation Design. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 40, p. 5810-5814, 2001.

MUSTAPHA, D.; SABRIA, T.; FATIMA, O. Distillation of a Complex Mixture. Part II: Performance Analysis of a Distillation Column Using Exergy. *Exergy*, v. 9, p. 137-151, 2007.

UNDERWOOD, A. J. V. Fractional Distillation of Multicomponent Mixtures. *Chemical Engineering Progress*, v. 44, p. 603-614, 1948.

WORREL, E.; GALITSKY, C. *Energy Efficiency Improvement and Cost Saving Opportunities For Petroleum Refineries*, An ENERGY STAR® Guide for Energy and Plant Managers, 2005.

SPASOJEVIĆ, M. Dj.; JANKOVIĆ, M. R.; DJAKOVIĆ, D. D. A New Approach to Entropy Production Minimization in Diabatic Distillation Column with Trays. *Thermal Science*, v. 14, p. 317-328, 2010.

SHIRAS, R. N.; HANSON, D. N.; GIBSON, C. H. Calculation of Minimum Reflux in Distillation Columns. *Ind. Eng. Chem.* v. 42, p. 871-876, 1950.

SKOGESTAD, S. Dynamics and Control of Distillation Columns – A Critical Survey. Modeling, *Identification and Control*, v. 18, p. 177-217, 1997a.

SKOGESTAD, S. Dynamics and Control of Distillation Columns – A Tutorial Introduction. *Trans IChemE*, v. 75, p. 539-562, 1997b.

SKOGESTAD, S. The dos and dont's of Distillation Column Control. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 85, p. 13-23, 2007.

SKOGESTAD, S.; MORARI, M. Control Configuration Selection for Distillation Columns. *AIChE*, v. 33, p. 1620-1635, 1987.

TRIERWEILER, J. O. *A Systematic Approach to Control Structure Design*. Ph.D. Thesis, University of Dortmund, Dortmund, Germany, 1997.