Universidade Federal do Rio Grande do Sul Escola de Engenharia Departamento de Engenharia Química Trabalho de Conclusão de Curso

ANÁLISE DA APLICAÇÃO DE UMA BOMBA DE CALOR EM UMA TORRE DE SEPARAÇÃO DE TOLUENO E XILENOS

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

CAMILA SPECHT MONTAGNER

PORTO ALEGRE, RS 2020

Universidade Federal do Rio Grande do Sul Escola de Engenharia Departamento de Engenharia Química Trabalho de Conclusão de Curso

ANÁLISE DA APLICAÇÃO DE UMA BOMBA DE CALOR EM UMA TORRE DE SEPARAÇÃO DE TOLUENO E XILENOS

CAMILA SPECHT MONTAGNER

Trabalho de Conclusão de curso apresentado como requisito parcial para obtenção do título de Engenheiro Químico.

Orientador: Prof. Rafael de Pelegrini Soares, D.Sc.

PORTO ALEGRE, RS 2020

Montagner, Camila. Análise da aplicação de uma bomba de calor em uma torre de separação de Tolueno e Xilenos / Camila Specht Montagner. -- 2020. 44 f. Orientador: Rafael de Pelegrini Soares, D.Sc. Trabalho (Conclusão de curso) - Universidade Federal

Trabalho (Conclusão de curso) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Química, Porto Alegre, BR-RS, 2020.

bomba de calor, integração energética, separação tolueno-xilenos, colunas de destilação, simulação. I. Soares, Rafael de Pelegrini., orient. II. Título.

Agradecimentos

Agradeço a minha família, meus pais Adiles e Ersi, aos meus irmãos Anne, Camilo e Taís, a minha sobrinha Guilhermina e ao meu cunhado Cesár, por todo o apoio ao longo desses anos de faculdade, por compreenderem minha ausência durante esse tempo e principalmente por me incentivarem a me desafiar e a superar todos os desafios.

A todos os meus amigos mas em especial a Miche, Vicky, Roma, Nanato, Pati e Luana, que muitas vezes supriram a ausência da minha família, que me ajudaram a passar nas cadeiras mais difíceis e que me proporcionaram histórias ao longo da universidade que levarei pra sempre.

A minha melhor amiga, colega e também minha namorada Sabrine por todo o amor, carinho, ajuda nessa etapa da minha vida, e por compartilhar todos os momentos comigo.

Agradeço a família Canal, Aldo, Marlei, Susiane, Marcelo, Isabelle, Suelen e Jordano, por todo o carinho e preocupação comigo nesses últimos anos do curso, e em especial aos dois últimos por dedicarem um tempo para me ajudar na correção deste trabalho.

Agradeço aos meus colegas de trabalho, Carla, Luísa, Sara, Roger, Lucas, Rafael, Iuri e Wilson por todo o tempo, paciência e atenção que tiveram para me ensinar todos os processos e todo o trabalho de um engenheiro petroquímico. Gostaria de deixar um agradecimento especial aos meus dois parceiros Iuri e Wilson por terem me dado a ideia deste trabalho, por terem me auxiliado em toda a concepção do projeto, mas principalmente por me desafiarem e a ser uma profissional e uma pessoa melhor.

E por fim, mas não menos importante, ao professor Rafael por toda a orientação, neste projeto.

Este trabalho não poderia ter sido executado sem os citados acima, muito obrigada a todos.

Resumo

Bombas de calor configuram uma alternativa para a redução do consumo energético de colunas de destilação. Atualmente, em indústriais petroquímicas, essa configuração já é utilizada, até onde se sabe, para a separação de propeno-propano e resulta em uma elevada economia de energia e água. Em função disso, este trabalho teve como objetivo, a avaliação dos ganhos financeiros e energéticos na adaptação de uma coluna de separação de tolueno-xilenos por recompressão do vapor de topo, comparando com a configuração destilação tradicional.

Após a avaliação dos dados necessários para a simulação, e da escolha correta do conjunto termodinâmico, que para este caso foi a equação de estado SRK, a regra de mistura PSRK e a equação de g^E UNIFAC(PSRK), pôde-se realizar a simulação da coluna de destilação tradicional.

Posteriormente, com a validação dos resultados obtidos para a torre de destilação real, foi efetuada a simulação da torre de destilação acoplada a uma bomba de calor,os dados demonstram a redução de 70% da energia necessária para o processo separação e a redução de 25% do consumo de água de resfriamento, através da utilização de um compressor que eleva a pressão de 1 para 3 atm. A avaliação financeira demonstrou uma economia operacional total de 49,3% quando comparada com a coluna de destilação tradicional.

Palavras-chave: bomba de calor, integração energética, separação tolueno-xilenos, colunas de destilação, simulação.

Sumário

Lista de Tabelas xi Lista de Símbolos xi 1 Introdução	Li	sta d	e Figuras	ix
Lista de Símbolos xi 1 Introdução 1.1 Motivação e Objetivo	Li	sta d	e Tabelas	x
1 Introdução 1.1 Motivação e Objetivo 2 Revisão Bibliográfica 2.1 Processo de Destilação 2.1.1 Modelos termodinâmicos 2.1.1 Modelos termodinâmicos 2.1.1.1 Equações de estado 2.1.1.2 Regras de mistura 2.1.1.3 Modelos de Gibbs de excesso 2.2 Alternativas para separação de BTX 2.2.1 Colunas com parede dividida (DWC) 2.2.2 Colunas com Bombas de calor 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor 2.2.2.2 Torre de destilação por recompressão do vapor de topo 1 2.2.2.1 Ciclo de compressões 1 3.1 Simulação da Torre de Tolueno 3.1 Coleta de Dados 3.1.1 Coleta de Dados 3.1.3 Simulação no software iiSE 3.2 Torre de Tolueno com bomba de calor de recompressão do vapor de topo 3.2.2 Refervedor 3.2.3 Condensador 2.3.1 Compressor 3.2.3 Condensador 2.3.1 Avaliação de consumo de energia e de	Li	sta d	e Símbolos	xii
1.1 Motivação e Objetivo 2 Revisão Bibliográfica 2.1 Processo de Destilação 2.1.1 Modelos termodinâmicos 2.1.1 Equações de estado 2.1.1.1 Equações de estado 2.1.1.2 Regras de mistura 2.1.1.3 Modelos de Gibbs de excesso 2.2.1 Colunas com parede dividida (DWC) 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor 2.2.2.2 Torre de destilação por recompressão do vapor de topo 3 Estudo de Caso, Resultados e Discussões 3.1 Simulação no software iiSE 3.1 Condensador 3.2.1 Compressor 3.2.3 Condensador 3.2.4 Conclusões e Trabalhos futuros 2.3.1.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades 2.3.1.1 Avaliação financeira dos	1	Intro	odução	1
2 Revisão Bibliográfica 2.1 Processo de Destilação 2.1.1 Modelos termodinâmicos 2.1.1.1 Equações de estado 2.1.1.2 Regras de mistura 2.1.1.3 Modelos de Gibbs de excesso 2.2 Alternativas para separação de BTX 2.2.1 Colunas com parede dividida (DWC) 2.2.2 Colunas com Bombas de calor 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor 2.2.2.1 Ciclo de compressão do vapor de topo 1 2.2.2.1 Ciclo de Caso, Resultados e Discussões 3.1 Simulação da Torre de Tolueno 3.1.1 Coleta de Dados 3.1.2 Escolha do modelo termodinâmico 3.1.3 Simulação no software iiSE 3.2.1 Compressor 3.2.2 Refervedor 3.2.3 Condensador 2.3.3 Análise dos resultados 3.3.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades 2.3.3.1 Avaliação financeira dos ganhos 3.3.1.1		1.1		2
3 Estudo de Caso, Resultados e Discussões 1 3.1 Simulação da Torre de Tolueno 1 3.1.1 Coleta de Dados 1 3.1.2 Escolha do modelo termodinâmico 1 3.1.3 Simulação no software iiSE 1 3.2 Torre de Tolueno com bomba de calor de recompressão do vapor de topo 2 3.2.1 Compressor 2 3.2.2 Refervedor 2 3.2.3 Condensador 2 3.3.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades 2 3.3.1 Avaliação financeira dos ganhos 2 4 Conclusões e Trabalhos Futuros 2 4.1 Conclusões 2 4.2 Trabalhos Futuros 2	2	Rev 2.1	isão Bibliográfica Processo de Destilação 2.1.1 Modelos termodinâmicos 2.1.1.1 Equações de estado 2.1.1.2 Regras de mistura 2.1.1.3 Modelos de Gibbs de excesso Alternativas para separação de BTX 2.2.1 Colunas com parede dividida (DWC) 2.2.2 Colunas com Bombas de calor 2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor	3 3 5 5 6 7 7 9 10
3 Estudo de Caso, Resultados e Discussões 1 3.1 Simulação da Torre de Tolueno 1 3.1.1 Coleta de Dados 1 3.1.2 Escolha do modelo termodinâmico 1 3.1.3 Simulação no software iiSE 1 3.2 Torre de Tolueno com bomba de calor de recompressão do vapor de topo 2 3.2.1 Compressor 2 3.2.2 Refervedor 2 3.2.3 Condensador 2 3.3 Análise dos resultados 2 3.3.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades 2 3.3.1.1 Avaliação financeira dos ganhos 2 4 Conclusões e Trabalhos Futuros 2 4.1 Conclusões 2 4.2 Trabalhos Futuros 2			2.2.2.2 Torre de destilação por recompressão do vapor de topo .	11
3.2 Torre de Tolueno com bomba de calor de recompressão do vapor de topo 2 3.2.1 Compressor 2 3.2.2 Refervedor 2 3.2.3 Condensador 2 3.2.3 Condensador 2 3.3 Análise dos resultados 2 3.3.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades 2 3.3.1.1 Avaliação financeira dos ganhos 2 4 Conclusões e Trabalhos Futuros 2 4.1 Conclusões 2 4.2 Trabalhos Futuros 2	3	Est 3.1	udo de Caso, Resultados e Discussões Simulação da Torre de Tolueno 3.1.1 Coleta de Dados 3.1.2 Escolha do modelo termodinâmico 3.1.3 Simulação no software iiSE	13 13 13 15 17
3.3 Análise dos resultados 2 3.3.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades 2 3.3.1 Avaliação financeira dos ganhos 2 4 Conclusões e Trabalhos Futuros 2 4.1 Conclusões 2 4.2 Trabalhos Futuros 2		3.2	Source de Tolueno com bomba de calor de recompressão do vapor de topo3.2.1Compressor3.2.2Refervedor3.2.3Condensador	20 21 22 23
4 Conclusões e Trabalhos Futuros 2 4.1 Conclusões		3.3	Análise dos resultados	24 24 24
4.1 Conclusões 2 4.2 Trabalhos Futuros 2	4	Cor	nclusões e Trabalhos Futuros	27
		4.1 4.2	Conclusões	27 28

Referências Bibliográficas

29

Lista de Figuras

Figura 1.1	Fluxograma de processo de destilação de BTX Fonte: (TUTUTI- AVILA et al., 2017)	2
Figura 2.1	Configuração de Petlyuk. Fonte: Adaptação de (KISS; REWAGAD,	
	2011)	7
Figura 2.2	Visão geral de uma DWC. Fonte: Adaptação (KISS; REWAGAD, 2011)	8
Figura 2.3	Partes internas de uma DWC. Fonte: Adaptação (MONTZ, 2020)	9
Figura 2.4	Fluxograma do ciclo e compressão de vapor	10
Figura 2.5	configuração de uma coluna com bomba de calor por recompressão	
0	do vapor de topo. Adaptado de (WAHEED et al., 2014)	12
Figura 3.1	Composição completa da corrente de entrada C_2	14
Figura 3.2	Diagrama de fases para mistura Tolueno (1) /O-xileno (2) a P= 1atm .	16
Figura 3.3	Diagrama de fases para mistura Tolueno (1) /M-xileno (2) a P= 1atm	16
Figura 3.4	Diagrama de fases para mistura tolueno (1) /etilbenzeno (2) a P= 200	
0	mmHg. Fonte do dados experimentais (KUUS et al., 2003)	17
Figura 3.5	Configuração simulada torre convencional	18
Figura 3.6	(a) Comparativo das composições da saída do topo. (b) Comparativo	
5	das composições da saída do fundo.	19
Figura 3.7	Configuração da torre com a instalação de uma BCRVT	21

Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Parâmetros Atrr para diferentes equações de estado	6
Tabela 2.2	Exemplos de regras de misturas para equações cúbicas	6
Tabela 3.1	Composição representativa da corrente de entrada C_2	15
Tabela 3.2	Dados utilizados para a simulação da coluna C_2	18
Tabela 3.3	Resultados da simulação para o Q retirado no condensador e o Q	
	cedido no refervedor.	20
Tabela 3.4	Dados do compressor simulado	22
Tabela 3.5	Dados do refervedor simulado	22
Tabela 3.6	Comparativo de resultados dos modelos tradicional e com bomba de	
	calor	24
Tabela 3.7	Ganhos financeiros por mês	25

Lista de Símbolos

ΔC_p	Diferença entre as capacidades caloríficas na fase líquida	${ m JK^{-1}}$
ΔT	Diferença entre as temperatura	Κ
γ_i	Coeficiente de atividade do componente i na mistura	_
$\hat{\phi}_i^l$	Coeficiente de fugacidade i em uma mistura na fase líquida	_
$\hat{\phi_i^v}$	Coeficiente de fugacidade i em uma mistura na fase vapor	_
$\hat{\phi}_i$	Coeficiente de fugacidade i em uma mistura	_
$\hat{f}_{i^{\circ}}$	Fugacidade da espécie i em uma mistura na referência	Pa
\hat{f}_{i^l}	Fugacidade da espécie i em uma mistura na fase líquida	Pa
$\hat{f}_{i^{id}}$	Fugacidade da espécie i em uma solução ideal	Pa
\hat{f}_i	Fugacidade da espécie <i>i</i> em uma mistura	Pa
$\overline{\mu_i}$	Potencial químico do componente <i>i</i>	$\rm Jmol^{-1}$
$\overline{\mu_i}^{\circ}$	Potencial químico do componente i na referência	$\rm Jmol^{-1}$
\overline{G}_i	Energia de Gibbs parcial molar do componente i	$\rm Jmol^{-1}$
\overline{G}_i°	Energia de Gibbs parcial molar do componente i na referência	$\rm Jmol^{-1}$
\overline{V}_i	Volume parcial molar do componente i	—
a	Parâmetros das equações cúbicas de estado	_
Atrr	Parâmetros das equações cúbicas de estado	_
b	Parâmetro de covolume das equações cúbicas de estado	_
f_i	Fugacidade da espécie <i>i</i> pura	Pa
g^E	Energia de Gibbs em excesso da solução	$\rm Jmol^{-1}$
Р	Pressão	kPa

Q	Calor desprendido por tempo	${ m J}{ m h}^{-1}$
Q_H	Calor transferido pra a fonte quente	${ m J}{ m h}^{-1}$
Q_L	Calor retirado da fonte fria	${ m J}{ m h}^{-1}$
R	Constante dos gases	$8,314{ m J}{ m mol}^{-1}{ m K}$
T	Temperatura absoluta	Κ
x_i	Fração molar da espécie i na fase líquida	_
y_i	Fração molar da espécie i na fase vapor	_

Sobrescritos

0	Referência
E	Propriedade em excesso
1	Fase líquida
V	Fase vapor

Siglas

BCRVT	Bomba de Calor com Recompressão do Vapor Topo		
BTX	Benzeno,Tolueno e Xilenos		
COSMO-SA	C COnductor-like Screening MOdel Segment Activity Coefficient		
DWC	Divided Wall Column		
ELV	Equlíbrio Líquido-Vapor		
NRTL	Non-Random Two Liquid		
PR	Peng-Robinson		
PSRK	Predictive Soave-Redlich-Kwong		
RK	Redlich-Kwong		
SCMR	Self-Consistent Mixing Rule		
SRK	Soave-Redlich-Kwong		
UNIFAC	UNIQUAC Functional-group Activity Coefficient		
VDW	Van Der Waals		

Capítulo 1 Introdução

A obtenção tradicional de benzeno, tolueno e xilenos inicia-se pela destilação fracionada do petróleo, processo que tem como objetivo separar o petróleo por faixas de ponto de ebulição. A nafta encontra-se na faixa que compreende as cadeias carbônicas que possuem ponto de ebulição entre 38 °C e 204 °C. A indústria petroquímica de primeira geração, efetua o craqueamento da nafta para a priorização da produção de eteno e propeno, principais matérias-primas utilizadas para a produção de plásticos. No entanto, após a retirada dos produtos de interesse para a produção de polímeros, ainda resta um efluente líquido denominado gasolina de pirólise, corrente que possui cerca de 47 % de aromáticos (ROJAS; ZEPPIERI, 2014). A gasolina de pirólise primeiramente passa por um seção de hidrogenação, devido à instabilidade gerada pelos hidrocarbonetos insaturados presentes, caso esta etapa não seja executada podem ocorrer graves problemas operacionais pela formação de incrustações de materiais poliméricos nos equipamentos (DERRIEN, 1986). Finalizada esta etapa, a corrente é usualmente direcionada para a seção de extração líquido-líquido. A solubilidade de aromáticos em solventes específicos proporcionam que esses compostos sejam separados dos demais, originando a corrente denominada BTX (Benzeno, Tolueno e Xilenos) (MULYONO et al., 2014). Por fim, tem-se a seção de destilação do BTX, originando os produtos finais (TUTUTI-AVILA et al., 2017).

Nos processos petroquímicos citados, dos gastos com energia, 50% do montante total é oriundo das torres de destilação (GORAK; SORENSEN, 2014). A busca contínua por otimizações dessas colunas e, consequentemente redução do consumo de vapor é amplamente abordado em diversos estudos, sendo as alterações de parâmetros operacionais ou de técnicas de integração energética, assuntos que têm recebido um maior destaque nos meios acadêmicos e industriais. Atualmente há inúmeros métodos que englobam a reutilização energética. Como exemplo pode-se citar as colunas com parede dividida e também as colunas com recompressão do vapor de topo.

1.1 Motivação e Objetivo

A seção de destilação de BTX de uma planta petroquímica situada no Rio Grande do Sul é formada por 3 colunas de destilação convencionais, onde a coluna de destilação C_1 é responsável pelo isolamento do benzeno, a coluna C_2 separa o tolueno e a coluna C_3 separa os xilenos das demais componentes pesados, como demonstrado na Figura 1.1.



FIGURA 1.1. Fluxograma de processo de destilação de BTX Fonte: (TUTUTI-AVILA et al., 2017).

Observando os gastos energéticos destas colunas tradicionais, este trabalho tem como objetivo avaliar os ganhos energéticos e financeiro, através da inserção de uma bomba de calor por re-compressão de topo na torre de separação de tolueno C_2 .

Capítulo 2 Revisão Bibliográfica

2.1 Processo de Destilação

A destilação é o processo de separação mais utilizada na indústria petroquímica, e baseia-se na diferença de volatilidade entre os componentes. O processo ocorre pelo contato da uma fase líquida com uma fase vapor em diversos estágios, este contato proporciona a transferência de massa entre as fases. Usualmente assume-se que o vapor que deixa cada estágio está no seu ponto de orvalho e o líquido em seu ponto de bolha, proporcionando o aumento do composto mais volátil na fase vapor e a condensação do composto menos volátil na fase líquida. Uma torre de destilação convencional é composta por um trocador de calor no topo – cujo objetivo é condensar a fase vapor originando a corrente líquida necessária para dar sequencia à separação (refluxo) – e um refervedor responsável pela evaporação da corrente de fundo, gerando a contra corrente de vapor necessária para o processo. Para a destilação do BTX, como já mencionado na Capítulo 1, são utilizadas normalmente 3 torres de destilação convencionais em série.

2.1.1 Modelos termodinâmicos

Segundo J William Gibbs o equilíbrio entre fases se dá não somente pela igualdade da pressão e da temperatura mas também do potencial químico (ou Gibbs parcial molar). Esta última quantidade é particular para cada substância em uma mistura e demonstra a tendência da substância de abandonar a fase em que se encontra, dependendo da temperatura, pressão e composição. Assim, para sistemas em equilíbrio o equacionamento termodinâmico pode ser expresso por:

$$T^{1} = T^{2} = \dots = T^{n}$$

$$P^{1} = P^{2} = \dots = P^{n}$$

$$\overline{G}_{i}^{1} = \overline{G}_{i}^{2} = \dots = \overline{G}_{i}^{n}$$
(2.1)

onde o subscrito i representa uma substância genérica da mistura.

Para fins práticos, usualmente o potencial químico é substituído pela fugacidade. Baseada em uma diferença de potencias químicos, a fugacidade é expressada por:

$$\overline{G}_i = \overline{G}_i^\circ = \mu_i - \mu_i^\circ \equiv RT \ln\left(\frac{\hat{f}_i}{\hat{f}_i^\circ}\right)$$
(2.2)

onde \hat{f}_i é a fugacidade do componente *i* quando em mistura, \hat{f}_i° representa essa mesma propriedade em um estado de referência e *R* é a constante universal dos gases.

Quando o estado de referência utilizado é o de uma mistura de gases ideais, a divisão entre \hat{f}_i e \hat{f}_i° é denominada coeficiente de fugacidade, $\hat{\phi}_i$, representando uma grandeza adimensional que compara a fugacidade do componente *i* com a pressão parcial do componente *i* que o sistema exerceria caso fosse considerado gás ideal, conforme:

$$\hat{\phi}_i = \frac{\hat{f}_i}{y_i P} \tag{2.3}$$

Sendo y_i a fração molar da espécie *i* na fase vapor e *P* a pressão do sistema. Logo a igualdade de fugacidades entre as fases pode ser observada por:

$$x_i \hat{\phi}_i^l = y_i \hat{\phi}_i^v \tag{2.4}$$

sendo x_i a fração molar da especie *i* na fase liquida, $\hat{\phi}_i^v$ coeficiente de fugacidade na fase vapor e $\hat{\phi}_i^l$ coeficiente de fugacidade na fase líquida

A Equação 2.3 possibilita que o coeficiente de fugacidade seja calculado por uma equação de estado da seguinte forma:

$$RT\ln(\hat{\phi}_i) = \int_0^P \overline{V}_i - \frac{RT}{P} dP$$
(2.5)

Para misturas líquidas o ponto de referência de um gás ideal pode ser inconveniente. Assim, uma alternativa para a representação de fases líquidas é a utilização do coeficiente de atividade que demostra a relação entre a fugacidade da mistura real pela fugacidade da mistura ideal (mas não de um gás ideal). Coloquialmente falando, a mistura ideal é aquela onde as substâncias se comportam como se estivessem puras. Desta forma a expressão matemática é dada por:

$$\gamma_i \equiv \frac{\hat{f}_i^l}{\hat{f}_i^{id}} = \frac{\hat{f}_i^l}{f_i x_i}$$
(2.6)

sendo f_i fugacidade do componente *i* puro, \hat{f}_i^l fugacidade do componente *i* em mistura na fase líquida e \hat{f}_i^{id} a fugacidade do componente *i* em solução ideal. Assim, para simular as composições das fases podemos utilizar o coeficiente de fugacidade para o cálculo da fase vapor e o coeficiente de atividade para a fase líquida:

$$x_i \gamma_i f_i = y_i \phi_i^v P \tag{2.7}$$

2.1.1.1 Equações de estado

Como mencionado anteriormente para o cálculo do coeficiente de fugacidade precisamos de equações de estado que são relações entre pressão, temperatura e volume. As mais utilizadas são as equações cúbicas que possuem o seguinte formato:

$$P = \frac{RT}{V - b} - Atrr \tag{2.8}$$

sendo *b* a constante de correção de volume de moléculas e *Atrr* parâmetros que diferenciam as equação de estado cúbicas. Diversos parâmetros já foram propostos na literatura e os mais utilizados são os constituintes da Tabela 2.1.

2.1.1.2 Regras de mistura

As equações de estados normalmente são desenvolvidas para substâncias puras e necessitam de regras de mistura para calcular seus parâmetros para soluções. No caso das equações cúbicas da Tabela 2.1 regras de mistura são utilizada para o cálculo do a e do b. Essas regras podem variar desde simples médias até modelos mais sofisticados baseados em equações de g^E . Desta forma a precisão de uma equação de estado quando aplicada a misturas esta intimamente ligada a escolha da regra de mistura e

Equação	Atrr
Van Der Waals	$\frac{a}{v^2}$
Redlich-Kwong	$\frac{a\sqrt{T}}{v(v+b)}$
Soave-Redlich-Kwong	$\frac{a\alpha(T)}{w(w+b)}$
Peng-Robinson	$\frac{a\alpha(T)}{w(w+b)+b(w-b)}$
0	

TABELA 2.1. Parâmetros Atrr para diferentes equações de estado

também do g^E . Alguns exemplos e utilizações comuns das regras de mistura podem ser vistos na Tabela 2.2.

TABELA 2.2. Exemplos de regras de misturas para equações cúbicas.

Regra de mistura	Substâncias recomendadas
van der Waals	Mistura apolar
SCMR	Pode ser utilizada com qualquer cúbica e g^E
Predictive Soave-Redlich-Know	Gases leves dissolvidos

2.1.1.3 Modelos de Gibbs de excesso

Para o cálculo do coeficiente de atividade explicado na Subseção 2.1.1 e para o cálculo de algumas regras de misturas é necessário fazer uso de uma equação para o g^E . Os modelos de Gibbs de excesso usualmente não levam em conta a influência da pressão, eles tem como principal objetivo avaliar as não idealidades de misturas líquidas em função da temperatura e da composição. Os modelos podem ser não preditivos, que necessitam da dados experimentais para o ajuste das interações binária, como Wilson, NRTL, ou podem ser modelos preditivos que não necessitam de dados experimentais para ajustes, como UNIFAC (Do), UNIFAC(PRSK), COSMO-SAC.

2.2 Alternativas para separação de BTX

Devido ao alto custo energético da destilação convencional, novas configurações vêm sendo estudas para a otimização energética desses processos (WAHEED et al., 2014), dentre elas estão as colunas de parede dividida, já utilizadas pela BASF (LO-RENZ et al., 2018), e as colunas com bomba de calor por recompressão do vapor topo.

2.2.1 Colunas com parede dividida (DWC)

A origem da DWC está na configuração Petlyuk, nesse projeto existe uma seção de pré-fracionamento acoplado termicamente à torre, a qual proporciona o refinamento do produto de topo e de fundo devido a troca de energia dos compostos de entrada com as correntes da torre. O composto com ponto de ebulição intermediário acaba se dividindo entre essas correntes, deste processo de troca resulta na possibilidade de retirada do produto intermediário pela lateral central da coluna, como mostrado na Figura 2.1 onde utilizou-se como exemplo a separação do BTX.



FIGURA 2.1. Configuração de Petlyuk. Fonte: Adaptação de (KISS; REWAGAD, 2011)

Com o avanço dos estudos no campo de otimização dos processos de destilação, adaptou-se a configuração de Petlyuk para a redução do espaço ocupado, originando a DWC, coluna com uma divisória metálica interna que possui equivalência termodinâmica com a configuração de Petlyuk (KOLBE; WENZEL, 2004). A configuração geral pode ser visualizada na Figura 2.2, onde o líquido entra na seção de pré fracionamento e neste momento se estabelece o primeiro equilíbrio líquido-vapor, originando uma vazão de topo contendo benzeno/tolueno e uma vazão de fundo contendo tolueno/xilenos. O topo desta primeira seção entra em contato com o refluxo, condensando o tolueno e especificando o benzeno, e o fundo entra em contato com vapor ,evaporando o tolueno e especificando os xilenos, estabelecendo o segundo equilíbrio líquido-vapor. Por conta da divisão interna, essas duas frações de tolueno se unem e podem ser retiradas na saída lateral central (KISS; REWAGAD, 2011).



FIGURA 2.2. Visão geral de uma DWC. Fonte: Adaptação (KISS; REWAGAD, 2011)

Na Figura 2.3 pode-se observar com maior detalhamento os internos da torre, normalmente essas colunas são compostas por recheios . Os divisores das corrente são de extrema importância para o sucesso da operação as vazões de cada um define o equilíbrio líquido-vapor e dessa forma a especificações dos produtos. Este design



FIGURA 2.3. Partes internas de uma DWC. Fonte: Adaptação (MONTZ, 2020)

propõe a substituição de três colunas por apenas uma. Segundo (TUTUTI-AVILA et al., 2017) esta configuração possui cerca de 24,52 % de economia energética comparada com a destilação convencional para a separação de benzeno, tolueno e xilenos.

2.2.2 Colunas com Bombas de calor

Outra alternativa para redução energética é a utilização de uma bomba de calor para integração dos calores da torre de destilação. Bomba de calor é uma máquina que possibilita a transferência de energia de temperaturas originalmente menores para temperaturas maiores. Um dos enunciados da segunda lei da termodinâmica escrita por Clausius expressa que: "É impossível a construção de um dispositivo que, por si só, isto é, sem intervenção do meio exterior, consiga transferir calor de um corpo para outro de temperatura mais elevada", logo para que o processo seja possível é necessário uma fonte de energia externa. Geralmente (não limitado às aplicações de destilação) as bombas de calor trabalham em processos cíclicos utilizando um fluído *refrigerante*. (ÇENCEL; BOLES, 2013).

2.2.2.1 Ciclo de compressão de vapor

O ciclo de compressão de vapor é amplamente utilizado em bombas de calor e refrigeradores. Esse processo cíclico utiliza um fluído denominado refrigerante (ÇEN-CEL; BOLES, 2013). Composto por 4 processos: Compressão isentrópica, Rejeição de calor isobárica, expansão isentrópica e absorção de calor isobárica como visto na Figura 2.4.



FIGURA 2.4. Fluxograma do ciclo e compressão de vapor

Sendo Q_H o calor transferido para a fonte quente e Q_L o calor retirado da fonte fria. Em condições ideais o ciclo de compressão é denominado ciclo de Carnot onde todas as etapas são reversíveis, este modelo proporciona a verificação dos limites termodinâmicos do ciclo. Os processos termodinâmicos que constituem o ciclo podem ser mais facilmente exemplificados pela Figura 2.4. Na posição (1) o vapor encontrase saturado e o mesmo é direcionado para o compressor onde ocorre a compressão isentrópica originando vapor superaquecido (2). Na sequencia entra em contato com o condensador onde ocorre a rejeição de calor sem alteração da pressão, desta forma o fluído liquefaz (3), sendo direcionado para a válvula de expansão onde ocorre uma queda abrupta da pressão e automaticamente uma redução da temperatura. Em seguida este fluído passa pelo evaporador e absorve o calor do meio transformando-se em vapor saturado e fechando o ciclo. A diferenciação entre refrigeradores e bombas de calor é unicamente devido a finalidade do processo, ambas utilizam o mesmo ciclo, os refrigerados têm como objetivo a retirada de calor de uma área mais fria enquanto a bomba de calor tem a finalidade de manter a fonte quente aquecida (ÇENCEL; BOLES, 2013).

2.2.2.2 Torre de destilação por recompressão do vapor de topo

Aplicando o ciclo de compressão a uma torre de destilação convencional tem-se a configuração da Figura 2.5, onde a torre de destilação é o evaporador, o refervedor da torre seria o condensador do sistema de bomba de calor, lugar em que ocorre a rejeição do calor, o que proporciona o retorno da energia para o fluído da coluna, gerando a carga energética necessária para que ocorra a separação dos componentes. Logo após há a válvula de expansão para redução da pressão e posterior redução da temperatura até ser atingida a especificação do refluxo, outra corrente necessária para que ocorra o correto funcionamento da destilação. A integração desses calores proporciona a utilização da carga térmica do topo para o refervimento do fundo (WAHEED et al., 2014). Este tipo de tecnologia já é aplicado em plantas reais, até onde se tem conhecimento, para colunas de separação propano-propeno. O estudo realizado por (GALVÃO, 2016) mostra que para essas separação citada acima ocorre uma economia de cerca de 90% de vapor e 80% de água, com a adição de 4,1 MW de energia para o funcionamento do compressor, quando comparado com a configuração convencional. Atualmente não foi encontrado nenhum caso onde este método seja aplicado na separação de BTX.



FIGURA 2.5. configuração de uma coluna com bomba de calor por recompressão do vapor de topo. Adaptado de (WAHEED et al., 2014)

Capítulo 3

Estudo de Caso, Resultados e Discussões

3.1 Simulação da Torre de Tolueno

Iniciou-se o estudo simulando a operação de separação de tolueno existente em uma unidade petroquímica, utilizando o Software iiSE. Esta etapa foi dividida em 3 partes: coleta de dados; escolha do modelo termodinâmico; e simulação no iiSE.

3.1.1 Coleta de Dados

A coleta de dados foi efetuada em um momento de estabilidade da planta, onde todas as variáveis se encontravam controladas, e todos os produtos especificados. Foi amostrada ,em maio de 2019, em uma única vez, a corrente de entrada da C_2 a fim de saber a sua composição, juntamente coletou-se fundo e topo para ser possível validar os resultados encontrados na simulação. Para as três amostras foram realizadas análises de composição total. Na composição da entrada da torre foram identificados cerca de 40 substâncias que podem ser observadas na Figura 3.1 , e devido a ampla gama de componentes, foi necessário realizar uma simplificação, resultando na composição representativa demonstrada na Tabela 3.1.

Utilizou-se o etilciclohexano como representante dos componentes leves, e agruparam-se os compostos mais pesados (C9+) nas 5 substâncias vistas na Tabela 3.1 por grau de similaridade de ponto de ebulição.

Componente	Fração massica %
benzene	0,0021
norbornane	0,0203
toluene	57,4596
1c,3-dimethylcyclohexane	0,0084
1-methyl-cyclohexene	0,0068
1,1-dimethylcyclohexane	0,0099
3c-ethylmethylcyclopentane	0,0124
1t,2-dimethylcyclohexane	0,0192
1t,3-dimethylcyclohexane	0,0235
i-propylcyclopentane	0,0125
N1	0,0062
1-ethyl-2-methyl-cyclopentane	0,0071
2-methyl-bicyclo-heptane	0,0167
1c,2-dimethylcyclohexane	0,0101
ethylcyclohexane	0,1111
1,1,4-trimethyl-cyclohexane	0,0099
ethylbenzene	20,9809
1,2,3-trimethylcyclohexane	0,0057
1,3-dimethylbenzene	9,9357
1,4-dimethylbenzene	2,5025
octahydro-pentalene	0,0356
bicyclo[3.2.1]octane	0,0057
1,2-dimethylbenzene	4,3944
N12	0,0062
2-ethyl-norbornane	0,0082
N27	0,004
i-propylbenzene	0,2704
N29	0,0229
2-methyl-bicyclo[3.2.1]octane	0,0203
N30	0,0026
n-propylbenzene	0,7949
1,3-methylethylbenzene	2,1309
1,4-methylethylbenzene	0,7555
1,3,5-trimethylbenzene	0,1176
1,2-methylethylbenzene	0,2157
1,2,3-trimethylbenzene	0,0277
t-hexahydro-indan	0,0082
indane	0,0063
octahydro-4,7-methano-1H-indene	0,0124

FIGURA 3.1. Composição completa da corrente de entrada C_2 .

Correntes	Fração molar	
Tolueno	0,6118	
Etilbenzeno	0,1939	
1,3-dimetilbenzeno	0,0918	
1,4-dimetilbenzeno	0,023	
1,2-dimetilbenzeno	0,0406	
1,3-metiletilbenzeno	0,0174	
1,2-metiletilbenzeno	0,0018	
Etilciclohexano	0,0036	
1,4-metiletilbenzeno	0,0062	
N-propilbenzeno	0,0087	
1,3,5-trimetilbenzeno	0,0012	

TABELA 3.1. Composição representativa da corrente de entrada C₂.

3.1.2 Escolha do modelo termodinâmico

A escolha correta do modelo termodinâmico é fundamental para o sucesso da simulação. Para avaliar com maior assertividade os modelos, foi utilizado a ferramenta de análise de equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários contida dentro do software iiSE. Inicialmente, fez-se o comparativo entre 2 pares de substâncias, sendo elas: Tolueno/O-xileno, Tolueno/M-xileno. Os dados experimentais na condição isobárica de 1 atm foram extraídos de (GUPTA; LEE, 2013) e (CHERIC, 2020) respectivamente. Foram avaliados 3 diferentes arranjos de equações de estado, regras de mistura e equações de g^E para cada mistura experimental, originando os diagramas que podem ser observados na Figura 3.2 e 3.3.

Baseado nos arranjos escolhidos para representar essas duas misturas binárias, nota-se que não existem diferenças muito significativas entre os modelos testados, e por esse motivo, em um primeiro momento, optou-se pela utilização da equação de estado Peng-Robinson , a regra de mistura de van der Walls, pois é o conjunto termodinâmico mais utilizado para aromáticos de uma forma geral. A simplificação da corrente original por um comparativo termodinâmico binário não mostra uma representação muito precisa da corrente real, tanto que ao rodar a simulação, os resultados mostraram uma perda mássica de cerca de 0,2% etilbenzeno no topo, que não condiz com a realidade de operação da coluna. Desta forma, foi necessário a avaliação da



FIGURA 3.2. Diagrama de fases para mistura Tolueno(1)/O-xileno (2) a P= 1atm



FIGURA 3.3. Diagrama de fases para mistura Tolueno(1)/M-xileno (2) a P= 1atm

interação do etilbenzeno com o tolueno. Não foram encontrados na literatura dados experimentais para o ELV do tolueno com o etilbenzeno a pressão de 1 atm, por outro lado, foram encontrados dados experimentais do equilíbrio líquido-vapor da mistura a 200mmHg (KUUS et al., 2003). Nesta condição, verificam-se diferenças entre os modelos, mostrando que para a pressão de 200 mmHg os melhores resultados obtidos são utilizando a equação de estado de SRK a regra de mistura PSRK e a equação de g^E UNIFAC(PSRK). Baseado nisso, foi alterado as configuração para este conjunto citado acima, com o objetivo de verificar se para a pressão de operação de 1 kgf este conjunto seria compatível com a separação real da torre. Os resultados mostraram composições muito próximas da realidade.



FIGURA 3.4. Diagrama de fases para mistura tolueno(1)/etilbenzeno (2) a P=200 mmHg. Fonte do dados experimentais (KUUS et al., 2003)

3.1.3 Simulação no software iiSE

A simulação foi realizada pelo software iiSE da seguinte forma: foram utilizados as composições descritas na Tabela 3.1, as equações termodinâmicas elucidadas na Subseção 3.1.2 e as demais informações contidas na tabela Tabela 3.2 foram adquiridas pela folha de dados e pelo sistema online de gerenciamento da planta na hora da retirada das amostras.

Dados da corrente de entrada		
Temperatura	151 °C	
Pressão	$1{ m kgf/cm^2}$	
Vazão mássica	$10\mathrm{t/h}$	
Dados da coluna de destilação		
Numero de pratos	60	
Tipo de condensador	Total com sub-resfriamento	
Prato de entrada	30	
Pressão de topo	$1{ m kgf/cm^2}$	
Pressão de fundo	$1,\!34\mathrm{kgf/cm^2}$	
Pressão do condensador	$1{ m kgf/cm^2}$	
Razão de refluxo	2,3	
Vazão molar de destilado	$62,5\mathrm{kgmol/h}$	
Delta T condensador	63 °C	

TABELA 3.2. Dados utilizados para a simulação da coluna C_2 .

Com a utilização destes dados, foram zerados os graus de liberdade do software e obtidos os resultados da simulação. A configuração simulada pode ser visualizada pela Figura 3.5.



FIGURA 3.5. Configuração simulada torre convencional



(a)



FIGURA 3.6. (a) Comparativo das composições da saída do topo. (b) Comparativo das composições da saída do fundo.

A simulação foi validada comparando-se as composições das saídas de fundo e de topo simuladas *versus* as composições resultantes das análises das amostras coletadas, este comparativo pode ser visto pela Figura 3.6.

O objetivo fundamental da torre C_2 é a especificação do tolueno (destilado) e, ao comparar-se os resultados, pode-se aferir que a pureza do produto está aproximadamente igual sendo a fração molar de tolueno amostrada 99,716% e a fração molar simulada 99,703%. Quando observados os valores obtidos para as composições de fundo, verifica-se a existência de algumas diferenças entre as composições amostradas e as simuladas, em razão de que, para a simulação, alguns compostos - principalmente com pontos de ebulição maiores - foram agrupados por similaridade e, desta forma, ocorrem as diferenças mostradas na Figura 3.6 (b).

Como a finalidade deste trabalho é efetuar um comparativos energético entre os modelos, é de suma importância que os calores do refervedor e do condensador estejam refletindo a realidade. A simulação resultou nos dados contidos na Tabela 3.3, comparando o resultado simulado com o esperado pela folha de dados do trocador de calor temos cerca de 99,3% de similaridade entre os valores indicando que os dados simulados refletem a realidade. Utilizando a folha de dados do condensador, têmse que, para 23 t/h de entrada de tolueno são necessárias aproximadamente 160 t/h de água de resfriamento, como a equação no lado água é a troca de calor sensível- equação linear- foi feito o cálculo proporcional. Logo para a entrada do trocador que é cerca de 18,5 t/h de tolueno a vazão aproximada de água na coluna convencional é cerca de 128,6 t/h.

TABELA 3.3. Resultados da simulação para o Q retirado no condensador e o Q cedido no refervedor.

Refervedor	$1296\mathrm{kW}$
Condensador	$-2574\mathrm{kW}$
Vazão de entrada do condensador	$18,5\mathrm{t/h}$

3.2 Torre de Tolueno com bomba de calor de recompressão do vapor de topo

Utilizando-se a simulação descrita no Capítulo 3, pode-se avaliar a possibilidade da instalação de uma bomba de calor (BDRVT) na torre simulada. Para isso foi projetado no iiSE a configuração apresentada na Figura 3.7 (WAHEED et al., 2014). Com o objetivo de facilitar a compreensão, os equipamento foram separados da seguinte maneira: 3.2. TORRE DE TOLUENO COM BOMBA DE CALOR DE RECOMPRESSÃO DO VAPOR DE TOPO 21



FIGURA 3.7. Configuração da torre com a instalação de uma BCRVT.

3.2.1 Compressor

Primeiramente, retirou-se o condensador e o refluxo da torre original e acoplouse um compressor, sendo que, desta forma a energia do topo pode ser maximizada para reutilização. No compressor, o gás que se desloca do topo da torre é succionado para dentro da câmera, onde normalmente ocorre uma expansão seguida de uma compressão e posterior descarga. As formas de compressão dependerão do fluído e do formato mecânico do compressor.

Para a simulação tem-se as seguintes especificações:

- Pressão de descarga: 3 kg/cm^2 esta pressão foi definida devido a necessidade miníma de temperatura para que ocorra a troca térmica, que neste caso foi considerado $10 \text{ }^{\circ}\text{C}$, com a temperatura de fundo da torre, que é cerca de $151 \text{ }^{\circ}\text{C}$.
- Eficiência do compressor: 0,5 esta eficiência foi selecionada para que haja a certeza da entrada de um fluído superaquecido no compressor, ou seja, garantindo a não existência de líquido no mesmo. Outra forma de assegurar que isto irá acontecer é colocando uma válvula na saída do topo da torre controlando a vazão de entrada no compressor. Portanto desta duas

formas, pode-se manter a linha de operação na lateral direita da linha de surge, evitando-se danos no mesmo. Em razão da praticidade optou-se pela primeira solução (HAFAIFA et al., 2014), gerando a Tabela 3.4 de dados do compressor.

TABELA 3.4. Dados do compressor simulado

Potencia do compressor	$0,4\mathrm{MW}$
Pressão de descarga	$3\mathrm{kgf/cm^2}$
Pressão de sucção	$1{ m kgf/cm^2}$
Vazão volumétrica	$2076\mathrm{m^3/h}$
Temperatura de saída	$162^{\circ}\mathrm{C}$

3.2.2 Refervedor

Na sequência Figura 3.7, tem-se um trocador de calor nomeado de refervedor simulado, que, por questões de facilidade de simulação, representa o refervedor real da torre, somente sendo possível pois o calor cedido em ambos foi igualado dentro do algoritmo do software. Esse método foi utilizado para conseguir substituir o vapor – fluído de aquecimento usual – pelo efluente do compressor. Além desta especificação, também foi considerado que neste trocador não terá queda de pressão. Os valores obtidos podem ser vistos na Tabela 3.5.

TABELA 3.5. Dados do refervedor simulado

Temperatura de entrada	$162^{\circ}\mathrm{C}$
Temperatura de saída	$157{,}66{}^{\mathrm{o}}\mathrm{C}$
Fração de vapor	0,43
Q retirado	$1{,}256\mathrm{MW}$

Com a análise dos dados, pode-se notar que a temperatura de saída do refervedor é muito parecida com a temperatura de saída do compressor. Quando observada a fração de vapor de saída do refervedor, pode-se contatar que 57% do fluído já se encontra em fase líquida, mostrando que a troca de calor latente entre os fluídos proporciona energia suficiente para reutilizar no refervimento da torre.

3.2.3 Condensador

Após a troca térmica ter sido efetuada é necessário o retorno da corrente às condições de especificação de refluxo e estocagem. Para isto, é necessária a colocação de um condensador total, especificando a temperatura em 47 °C na saída e a queda de pressão em 2 atm. O condensador executa o papel da válvula de expansão citado na Subsubseção 2.2.2.1.

Conforme mencionado anteriormente parte da corrente já se encontrava na fase líquida, desta forma, a energia gasta para condensar a corrente torna-se menor do que no caso convencional onde toda a vazão de gás precisa ser trocada de fase. A troca de calor latente e sensível nesta configuração necessita da retirada de 1683 kW, logo temse uma redução do consumo de água de resfriamento. Para o cálculo do novo consumo foi obtido utilizando a seguinte equação:

$$Magua = \frac{Q*3,6}{Cp*\Delta T}$$
(3.1)

onde a multiplicação por 3,6 é utilizada para transformar para t/h, a nova vazão resultou em cerca de 96,6 t/h, sendo Q o calor desprendido por tempo pelo condensador em kW, Cp o calor específico da água 4,18 kJ/kgK e a variação de temperatura da água ΔT sendo 15 K conforme a folha de dados do condensador real.

Por fim, um splitter foi adicionado para obter o retorno de refluxo e a corrente destinada ao tanque de produto final, nesta etapa foi especificada a fração de 0,69 de retorno para a torre, ou seja, por volta de 140 kgmol/h de refluxo e saída de cerca de 62 kgmol/h de produto, respeitando a razão de refluxo de aproximadamente 2,3 real da torre.

Os resultados de composição obtidos são praticamente iguais aos demonstrados na simulação da torre convencional pela Figura 3.6.

3.3 Análise dos resultados

3.3.1 Avaliação de consumo de energia e de utilidades

Em posse das duas simulações, os resultados energéticos dos dois modelos podem ser comparados pela Tabela 3.6.

Coluna de destilação	Tradicional	Bomba de calor
Consumo de vapor	$1{,}296\mathrm{MW}$	0
Consumo de energia elétrica	0	$0,4\mathrm{MW}$
Consumo água de resfriamento	$128,\!6\mathrm{t/h}$	$96,6\mathrm{t/h}$

TABELA 3.6. Comparativo de resultados dos modelos tradicional e com bomba de calor.

Utilizando-se os dados da Tabela 3.6, pode-se verificar uma redução do consumo energético para referver a coluna em cerca de 70%, analisando o consumo de água a redução fica em torno de 25%.

3.3.1.1 Avaliação financeira dos ganhos

Os cálculos realizados nessa seção serão unicamente avaliando os ganhos operacionais da configuração com bomba de calor, sendo que, os gastos na concepção de uma nova coluna ou a adaptação de uma coluna tradicional não serão abordados. Os gastos operacionais foram calculados pela multiplicação da quantidade com o valor, em reais por unidade, que por razões de sigilo, optou-se por apresentar somente os percentuais de ganho. A avaliação financeira teve início pelo comparativo entre a utilização vapor e o consumo de energia elétrica, conforme:

$$Ganho\ energético\ = \left(\frac{G1 - G2}{G1}\right) * 100 \tag{3.2}$$

onde G1 é o gasto operacional com energia da torre convencional por mês e G2 é o gasto operacional com energia com a bomba de calor por mês.

Da mesma forma foi realizado a análise financeira de consumo de água,

Ganho de consumo de água
$$= \left(\frac{A1 - A2}{A1}\right) * 100$$
 (3.3)

onde A1 é o gasto operacional mensal com água de resfriamento na torre convencional e A2 representa os gastos mensais com água de resfriamento utilizando a bomba de calor. A Tabela 3.7 mostra os resultados aproximados da aplicação das equações 3.2 e 3.3.

TINE		O 1	· ·	^
	37	(-anhoe	tinancoiros	nor moc
IADLLA	0.7.	Guintos	mancenoe	por mes
				1

Ganho de energia	49,5%
Ganho de consumo de água	37,7%
Ganho total	49,3%

Capítulo 4 Conclusões e Trabalhos Futuros

4.1 Conclusões

O gasto energético de torres de destilação configuram aproximadamente 50% do gasto total em uma unidade petroquímica. Em função disso, este trabalho propõe a avaliação dos ganhos financeiro e energéticos na adaptação de uma coluna de separação de tolueno-xilenos por recompressão do vapor de topo, comparando com a configuração destilação tradicional. Após a avaliação dos dados necessários para a simulação, e da escolha correta do conjunto termodinâmico, que para este caso foi a equação de estado SRK, a regra de mistura PSRK e a equação de g^E UNIFAC(PSRK), pôde-se realizar a simulação da coluna de destilação tradicional.

Posteriormente, com a validação dos resultados obtidos para a torre de destilação real, foi efetuada a simulação da torre de destilação acoplada a uma bomba de calor, o que resultou uma economia energética de 70% e uma economia de água de resfriamento de 25%. Os ganhos financeiros-operacionais com a utilização do sistema de recompressão do vapor do topo foram também calculados e uma redução de cerca de 49,3%, comparando com a torre de destilação tradicional, foram observados. Para estes resultados foi necessária a utilização de um compressor com eficiência de 50% que elevou de 1 para 3 atm a corrente de topo. Podemos concluir que para a separação de tolueno-xilenos a recompressão de vapor de topo, nos fornece economias significativas no consumo de utilidades e se torna uma alternativa atrativa para novas plantas de destilação de BTX.

4.2 Trabalhos Futuros

Como trabalho futuro ainda pode-se avaliar a utilização da energia retirada no condensador, responsável pela especificação do refluxo, em algum outro sistema da planta, pois há cerca de 47% da corrente vaporizada o que nos indica que ainda há energia latente disponível, o que resultaria em uma redução ainda maior do consumo de água de resfriamento.

Ainda, as demais especificações do sistema em configuração com re-compressão do vapor podem ser otimizadas visando uma minimização do custo de operação.

Referências Bibliográficas

- CHERIC. CHERIC binary vapour-liquid equilibrium. 2020. Disponível em: https://www.cheric.org/research/kdb/.
- DERRIEN, M. L. Chapter 18 Selective Hydrogenation Applied to the Refining of Petrochemical Raw Materials Produced by Steam Cracking. *Studies in Surface Science and Catalysis*, Elsevier, v. 27, p. 613–666, jan 1986. ISSN 0167-2991. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167299108653641?via \%}3Di>.
- GALVAO, M. *Aplicação de bombas de calor em plantas de separação de propeno.* 95 p. Tese (Doutorado) Universidade de são paulo, 2016.
- GORAK, A.; SORENSEN, E. Distillation: Fundamentals and Principles. [S.1.]: Elsevier, 2014. 505 p.
- GUPTA, B. S.; LEE, M. J. Isobaric vapor-liquid equilibrium for binary systems of toluene+o-xylene, benzene+o-xylene, nonane+benzene and nonane+heptane at 101.3kPa. *Fluid Phase Equilibria*, Elsevier B.V., v. 352, p. 86–92, 2013. ISSN 03783812. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.fluid.2013.05.016>.
- HAFAIFA, A.; RACHID, B.; MOULOUD, G. Modelling of surge phenomena in a centrifugal compressor: Experimental analysis for control. *Systems Science and Control Engineering*, v. 2, n. 1, p. 632–641, 2014. ISSN 21642583.
- KISS, A. A.; REWAGAD, R. R. Energy efficient control of a BTX dividing-wall column. *Computers and Chemical Engineering*, Elsevier Ltd, v. 35, n. 12, p. 2896–2904, 2011. ISSN 00981354. Disponível em: http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2011. 03.024>.
- KOLBE, B.; WENZEL, S. Novel distillation concepts using one-shell columns. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 43, n. 3, p. 339–346, 2004. ISSN 02552701.
- KUUS, M.; KIRSS, H.; SIIMER, E.; KUDRYAVTSEVA, L. Thermodynamics of ternary liquid mixtures containing toluene, ethylbenzene, and chlorobenzene. *Journal of Chemical and Engineering Data*, v. 48, n. 4, p. 898–903, 2003. ISSN 00219568.
- LORENZ, H. M.; STAAK, D.; GRÜTZNER, T.; REPKE, J. U. Divided wall columns: Usefulness and challenges. *Chemical Engineering Transactions*, v. 69, p. 229–234, 2018. ISSN 22839216.

- MONTZ. *Trennwandkolonnen*. 2020. Disponível em: https://www.montz.de/montz-trennwandkolonnen>.
- MULYONO, S.; HIZADDIN, H. F.; ALNASHEF, I. M.; HASHIM, M. A.; FAKEEHA, A. H.; HADJ-KALI, M. K. Separation of BTEX aromatics from n-octane using a (tetrabutylammonium bromide + sulfolane) deep eutectic solvent-experiments and COSMO-RS prediction. *RSC Advances*, v. 4, n. 34, p. 17597–17606, 2014. ISSN 20462069.
- ROJAS, M.; ZEPPIERI, S. Simulation of an industrial fixed-bed reactor with cocurrent downflow for hydrogenation of PYGAS. *Catalysis Today*, Elsevier, v. 220-222, p. 237– 247, mar 2014. ISSN 0920-5861. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/ science/article/abs/pii/S0920586113003490>.
- TUTUTI-AVILA, S.; DOMÍNGUEZ-DÍAZ, L. A.; MEDINA-HERRERA, N.; JIMÉNEZ-GUTIÉRREZ, A.; HAHN, J. Dividing-wall columns: Design and control of a kaibel and a satellite distillation column for BTX separation. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, v. 114, p. 1–15, 2017. ISSN 02552701.
- WAHEED, M. A.; ONI, A. O.; ADEJUYIGBE, S. B.; ADEWUMI, B. A.; FADARE, D. A. Performance enhancement of vapor recompression heat pump. *Applied Energy*, Elsevier Ltd, v. 114, p. 69–79, 2014. ISSN 03062619.
- ÇENCEL, Y.; BOLES, M. Termodinâmica 7edição. [S.l.]: Bookman, 2013.