



MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Paula B. Staudt, Rafael P. Soares, Argimiro R. Secchi

Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,
E-MAIL: {paula, rafael, arge}@enq.ufrgs.br

Palavras Chaves: Destilação, Modelagem, Simulação.

Resumo: Destilação é uma operação unitária essencial e que está presente na maioria dos processos químicos e petroquímicos. Comportamentos reais de uma coluna de destilação raramente podem ser preditos por modelos que desconsiderem os fenômenos simultâneos de transferência de calor e massa. A modelagem da hidráulica e os cálculos de propriedades físicas também são fatores muito importantes para prever a performance dinâmica do processo. Assim, o objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de uma série de modelos que contenham todos os fatores citados acima. Estes modelos devem ser numericamente robustos e eficientes em termos computacionais, e genéricos o suficiente para permitir o estudo de uma grande variedade de processos. Para o desenvolvimento será utilizado o simulador de processos EMSO, onde os modelos desenvolvidos são baseados em equações e sua estruturação permite a concepção dos mesmos com a utilização de conceitos derivados da programação orientada a objetos.

1 INTRODUÇÃO

Um modelo dinâmico rigoroso para colunas de destilação consiste em um conjunto de equações algébricas e diferenciais acopladas e, no caso de modelos onde não há consideração de equilíbrio, tem-se ainda equações diferenciais parciais. Durante as últimas décadas muitos trabalhos relacionados com a simulação de colunas de destilação foram desenvolvidos. Estes trabalhos focaram principalmente no aperfeiçoamento de correlações importantes para predição de efeitos hidráulicos, métodos de cálculo de eficiência de pratos e colunas e no desenvolvimento de métodos de solução mais robustos e eficientes.

A primeira série de trabalhos encontrada na literatura foi desenvolvida por pesquisadores da Dinamarca, Austrália e Argentina e contemplou todos os tópicos do desenvolvimento de modelos: o equacionamento, a solução do sistema resultante e a aplicação do modelo proposto. No primeiro

trabalho Gani et al. (1986) apresentam um modelo dinâmico genérico e rigoroso que considera equilíbrio termodinâmico entre as fases. O comportamento hidrodinâmico foi modelado tornando possível o acompanhamento das vazões internas de líquido e vapor da coluna e eventos importantes como inundação e secagem dos pratos. Para comprovar a eficiência e generalidade do modelo, vários exemplos de unidades industriais foram simulados, validando o modelo com dados de planta. Este trabalho foi muito importante e desencadeou o desenvolvimento de muitos outros. Na sequência, Cameron et al. (1986), utilizando o modelo do trabalho anterior, aborda aspectos numéricos para a resolução do sistema de equações resultante. Como naquela época não havia integradores de sistemas algébrico-diferenciais (*Differential Algebraic Equations*, DAE), a simulação dinâmica de colunas de destilação requeria uma separação no sistema. Na verdade, o sistema proveniente da modelagem era encarado



Oktober Fórum 2005 – PPGEQ

como um subsistema de equações diferenciais ordinárias acoplado com equações algébricas. Assim, a resolução do sistema total era separada em dois blocos resolvidos sequencialmente. No presente trabalho esse tipo de problema não existe, já que o ambiente no qual os modelos serão desenvolvidos, o simulador EMSO (Soares e Secchi, 2003), conta com integradores de sistemas DAE bem consolidados. Aplicando os resultados obtidos nos dois trabalhos anteriores Ruiz et al. (1988) propõem o desenvolvimento de políticas de partida de colunas com base em simulações dinâmicas rigorosas.

Como resultado deste estudo foi possível caracterizar a partida de uma planta com a definição de três estágios distintos: o primeiro, chamado *estágio descontínuo*, caracterizado pela descontinuidade das variáveis (principalmente associadas à hidráulica) e pelo pequeno período de tempo de duração; o segundo, chamado *estágio semi-contínuo*, identificado pelo comportamento transiente não-linear (embora não hajam mais descontinuidades) e pela aproximação das variáveis hidráulicas aos seus valores estacionários; e o terceiro, chamado *estágio contínuo*, onde todas as variáveis alcançam comportamentos transientes lineares e no final deste estágio o estado estacionário é atingido.

Esta aplicação dos modelos dinâmicos é muito importante, tanto para a prevenção de possíveis problemas de controle e operabilidade tornando o procedimento mais seguro, como para evitar desperdícios de matéria prima e geração de produtos fora de especificação.

Logo em seguida, Gani e Cameron (1989) propuseram modificações no modelo dinâmico permitindo que o mesmo pudesse ser utilizado para simulações estacionárias de forma eficiente. Em simulações estacionárias, somente um conjunto de equações algébricas é originado, já no caso dinâmico há a existência também de equações diferenciais. Para problemas de difícil convergência os autores também estudaram a obtenção de estacionários através da solução dinâmica. No simulador EMSO esta questão é resolvida automaticamente. Caso seja necessário resolver uma simulação estacionária através de um modelo dinâmico, somente é preciso ajustar um parâmetro indicando esta opção.

Além do rigorismo nas correlações hidrodinâmicas, que torna o modelo capaz de prever com detalhes o comportamento hidráulico das fases líquida e vapor na coluna, outro tipo de detalhamento também é estudado: a condição de não equilíbrio termodinâmico entre as fases. Com a consideração

de não equilíbrio, as resistências à transferência de calor e massa tanto inter como intrafase são consideradas, gerando um sistema de equações mais complexo. No trabalho de Biardi e Grottoli (1989) a difusão transiente dos componentes é modelada pelas equações de Maxwell-Stefan. A importância deste estudo está na comparação realizada entre modelos *ideais* (com condição de equilíbrio termodinâmico) e *reais* (onde o equilíbrio é considerado apenas na interface líquido-vapor). Esta comparação foi feita com dados experimentais de duas colunas em escala laboratorial e uma coluna industrial. Os modelos reais apresentaram resultados mais precisos, mas em contrapartida requerem uma série de parâmetros adicionais relacionados com a transferência de calor e massa entre as fases. Tais parâmetros são de difícil obtenção e têm um alto grau de incerteza associado. Além disso, este tipo de modelo exige um maior custo computacional em virtude da maior complexidade do sistema de equações gerado. Este tipo de equacionamento é muito utilizado quando se quer reproduzir processos de destilação reativa.

Com o advento de computadores mais eficientes e integradores mais robustos, conseguiu-se resolver de forma mais rápida os modelos desenvolvidos, inclusive os mais rigorosos. Com a simulação ocorrendo em tempo real ou até algumas vezes mais rápido que isso, tornou-se possível a sua utilização no treinamento de operadores e engenheiros. No trabalho de Olsen et al. (1997) uma unidade de purificação de metano contendo três colunas de destilação foi modelada, baseada no modelo desenvolvido por Gani (1986). O sistema de equações resultante apresentava 266.000 variáveis e 97.000 parâmetros e era simulado em uma velocidade duas vezes mais rápida que a do processo. Este simulador era utilizado principalmente para o treinamento de partidas e paradas das unidades, onde a predição das características dinâmicas é de suma importância.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Atualmente, quase todas as ferramentas computacionais utilizadas para modelagem e simulação de processos são baseadas na arquitetura sequencial modular. Embora esta categoria de ferramenta esteja bem difundida na indústria, está se verificando uma tendência de migração para softwares com arquitetura de modelos baseados em equações. Isto se deve ao fato de um mesmo modelo ser utilizados para uma gama maior de aplicações (simulação estacionária ou dinâmica, otimização, estimação de parâmetros, síntese de



Oktober Fórum 2005 – PPGEQ

processos) e maior facilidade de incorporação de informações específicas a um modelo já existente.

Um dos motivos para a falta de sucesso comercial de ferramentas baseadas em equações, pode ser atribuído ao fato de que os mesmos não dispõem de um conjunto de modelos consistente para uso imediato dos usuários, dificultando a sua utilização inicial.

Os modelos apresentados neste trabalho fazem parte de uma ampla biblioteca que será disponibilizada livremente e distribuída junto com o software EMSO. Para o desenvolvimento de modelos genéricos de colunas de destilação no simulador EMSO, alguns conceitos importantes derivados da programação orientada a objetos (OOP) foram incorporados tais como, composição e herança.

A composição permite uma maior facilidade para combinar modelos existentes das maneiras mais variadas possíveis. Modelos que utilizam composição ficam mais enxutos e fáceis de acompanhar quando algum erro for detectado. O conceito de herança permite que características adicionais de modelos mais complexos sejam incorporadas com facilidade a modelos simplificados já existentes, isto é, alguns modelos podem herdar as características de outro e ter como informação adicional suas peculiaridades. Estes dois conceitos serão bem visualizados nas seções a seguir.

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Para modelagem de colunas de destilação, diversos modelos básicos são necessários. Assim, modelos para os seguintes equipamentos foram desenvolvidos: bomba, válvula, tanques, condensador, refeedor e prato.

O modelo de prato representa um estágio de equilíbrio de uma coluna de destilação. Na literatura há uma grande variedade de maneiras de modelar um estágio de equilíbrio. Geralmente a grande diferença entre um modelo e outro está nas equações relacionadas a hidrodinâmica do prato, isto é, nas correlações para cálculo das vazões internas, perfis de pressão e outros parâmetros. Assim, o modelo de prato foi construído através de herança de modelos. O equacionamento básico, composto de balanços de massa e energia e restrições geométricas, foi chamado de *trayBasic* e as equações hidrodinâmicas ficaram em um conjunto de equações separado chamado de *tray* o qual, além de possuir suas equações específicas, herda o equacionamento do modelo básico. A

seguir é mostrado o equacionamento do modelo de prato básico:

Balanço molar por componente:

$$\frac{dM}{dt} = F_{Feed} z_{Feed} + F_{inL} x_{in} + F_{inV} y_{in} - F_{OutL} x_{Out} - F_{OutV} y_{Out}$$

Balanço de Energia:

$$\frac{dU}{dt} = F_{Feed} h_{Feed} + F_{inL} h_{inL} + F_{inV} h_{inV} - F_{OutL} h_{OutL} - F_{OutV} h_{OutV} + Q$$

Acúmulos:

$$M = M_{liq} x_{Out} + M_{vap} y_{Out}$$

$$U = M_{liq} h_{OutL} + M_{vap} h_{OutV} - P_{OutL} V_{tray}$$

Restrições das frações molares:

$$\sum x_{out} = 1$$
$$\sum x_{out} = \sum y_{out}$$

Equilíbrio químico, térmico e mecânico:

$$f_{liq} x_{Out} = f_{vap} y_{Out}$$

$$T_{OutL} = T_{OutV}$$

$$P_{OutL} = P_{OutV}$$

Restrição geométrica:

$$V_{tray} = M_{liq} v_{liq} + M_{vap} v_{vap}$$

Nível de líquido no prato:

$$hl = \frac{M_{liq} v_{liq}}{A_p}$$

Fração de vaporização nas correntes de saída:

$$v_{OutL} = 0$$

$$v_{OutV} = 1$$

As propriedades físicas e termodinâmicas necessárias são calculadas através de rotinas externas.

$$h_{OutL} = h(T_{OutL}, P_{OutL}, x_{Out})$$

$$h_{OutV} = h(T_{OutV}, P_{OutV}, y_{Out})$$

$$v_{liq} = v(T_{OutL}, P_{OutL}, x_{Out})$$

$$v_{vap} = v(T_{OutV}, P_{OutV}, y_{Out})$$

$$f_{liq} = f(T_{OutL}, P_{OutL}, x_{Out})$$

$$f_{vap} = f(T_{OutV}, P_{OutV}, y_{Out})$$

Agora, as equações de hidrodinâmica:



Para o cálculo da vazão de líquido do prato é utilizada a correlação de Francis:

$$F_{OutL} = \begin{cases} 0, & \text{se } hl < \mathbf{b} \cdot hw \\ \frac{1,84lw \left(\frac{hl - \mathbf{b} \cdot hw}{\mathbf{b}} \right)^{3/2}}{v_{liq}} & \text{se } hl > \mathbf{b} \cdot hw \end{cases}$$

$$F_{InV} = \begin{cases} 0, & \text{se } P_{inV} < P_{outV} + \mathbf{r}_{liq} \cdot g \cdot hl \\ \frac{A_h}{v_{vap}} \sqrt{\frac{P_{inV} - P_{outV} - \mathbf{r}_{liq} \cdot g \cdot hl}{\mathbf{a} \mathbf{r}_{vap}}} & \text{se } P_{inV} > P_{outV} + \mathbf{r}_{liq} \cdot g \cdot hl \end{cases}$$

A Figura 3.1e Figura 3.2 apresentadam a modelagem dos pratos *trayBasic* e *tray* na linguagem do simulador EMSO:

```
Model trayBasic
VARIABLES
in Inlet as stream;
in InletL as stream;
in InletV as stream;
out Outlet as stream_therm;
out OutletV as stream_therm;
EQUATIONS
"Component Molar Balance"
diff(P) = Inlet.F*Inlet.z + InletL.F*InletL.z + InletV.F*InletV.z
- OutletL.F*OutletL.z - OutletV.F*OutletV.z;
"Energy Balance"
diff(E) = I*Inlet.P*Inlet.h + InletL.P*InletL.h + InletV.P*InletV.h
- OutletL.P*OutletL.h - OutletV.P*OutletV.h + Q;
"Vol tag"
M = M*OutletL.z + Mv*OutletV.z;
E = M*OutletL.h + Mv*OutletV.h - OutletL.P*V;
"Vol fraction normalisation"
sum(OutletL.z) = 1.0; sum(OutletV.z);
"Volume"
vL = PP.LiquidVolume(OutletL.T, OutletL.P, OutletL.z);
vV = PP.VapourVolume(OutletV.T, OutletV.P, OutletV.z);
"Equilibrium"
PP.LiquidFugacityCoefficient(OutletL.T, OutletL.P, OutletL.z)*OutletL.z =
PP.VapourFugacityCoefficient(OutletV.T, OutletV.P, OutletV.z)*OutletV.z;
"Thermal Equilibrium"
OutletV.T = OutletL.T;
"Mechanical Equilibrium"
OutletV.P = OutletL.P;
"Geometry Constraint"
V = M*vL + Mv*vV;
"vaporization fraction"
OutletV.v = 1.0;
OutletL.v = 0.0;
"Level of clear liquid over the weir"
Level = M*vL/Av;
end
```

Figura 3.1: Modelo *trayBasic* no EMSO

```
Model tray as trayBasic
VARIABLES
rhoL as dens_mass;
rhoV as dens_mass;
EQUATIONS
"Density"
rhoL = PP.LiquidDensity(OutletL.T, OutletL.P, OutletL.z);
rhoV = PP.VapourDensity(InletV.T, InletV.P, InletV.z);
IF (Level = (beta * hw)) THEN
  "Francis Equation"
  OutletL.F = 1.84*lw*((Level - (beta*hw))/(beta))^1.5/vL;
ELSE
  "Low level"
  OutletL.F = 0 * "mol/h";
END
IF ( InletV.P > (OutletV.P + g*Level*rhoL) ) THEN
  "Pressure Drop through the tray"
  InletV.F = hw/vV * sqrt( (InletV.P - OutletV.P - g*Level*rhoL)/
  (alfa*rhoV) );
ELSE
  "Prato selado"
  InletV.F = 0.0 * "mol/h";
END
```

Figura 3.2: Modelo do *tray* no simulador EMSO

Calculando a vazão de vapor proveniente do prato inferior:

Como já dito anteriormente, para a construção do modelo completo de prato foi utilizado o conceito de herança que pode ser visto na Figura 3.2 quando se escreve que o modelo *tray* é do tipo *trayBasic* (na declaração do modelo feita na primeira linha). Assim, qualquer outro modelo de prato que for criado deverá conter apenas as equações adicionais aos balanços.

O equacionamento do estágio de separação serviu de base para o desenvolvimento dos modelos de condensador e refeedor, os quais foram modelados com a consideração de que também contam como estágio de equilíbrio. Além destes, modelos simples de bomba e válvula, bem como de tanques de armazenamento foram implementados. Estes e os outros modelos confeccionados estão disponíveis no link

www.enq.ufrgs.br/alsoc/emso/mso/eml/stage_separators/

Estes estão estruturados da seguinte maneira:

- *tray.mso*: arquivo que contém os seguintes modelos:
 - o *trayBasic*
 - o *tray*
- *condenser.mso*: arquivo com modelos de condensadores:
 - o *condenser*
 - o *condenserSteady*
- *reboiler.mso*: arquivo com modelos de refeedores:
 - o *reboiler*
 - o *reboilerSteady*
- *tank.mso*: arquivo com modelos dinâmicos de vasos:
 - o *tank*
 - o *tank_cylindrical*



Oktober Fórum 2005 – PPGEQ

Modelos de válvula e bomba podem ser encontrados no link:

www.enq.ufrgs.br/alsoc/emso/mso/eml/pressure_changers/

De posse de todos os modelos básicos, a coluna de destilação foi construída conectando seus elementos, como pode ser visto na Figura 3.3:

```
Model Distillation_kettle_cond
PARAMETERS
ext PP as CalcObject;
ext NComp as Integer;
NTrays as Integer(Brief="Number of trays", Default=2);

VARIABLES
trays(NTrays) as tray;
cond as condenser;
reb as reboiler;
sp as splitter;
valve as valve;
pump1 as pump;

CONNECTIONS
#vapor
reb.OutletV to trays([NTrays]).InletV;
trays([2:NTrays]).OutletV to trays([1:NTrays-1]).InletV;
trays(1).OutletV to valve.Inlet;
valve.Outlet to cond.InletV;

#liquid
cond.OutletL to sp.Inlet;
sp.Outlet2 to pump1.Inlet;
pump1.Outlet to trays(1).InletL;
trays([1:NTrays-1]).OutletL to trays([2:NTrays]).InletL;
trays(NTrays).OutletL to reb.InletL;
end
```

Figura 3.3: Modelo de Coluna de Destilação

Um grande número de outros modelos de colunas de separação foi construído através de combinações dos modelos básicos, são eles:

- o Section Column: modelo de seção de separação
- o Distillation: colunas de destilação com combinações diferentes de condensadores, refeedores e tanques
- o Rectifier
- o Stripping
- o Absorption

Junto com os modelos foram disponibilizadas aplicações para ilustrar a utilização dos mesmos. O link para os exemplos é:

www.enq.ufrgs.br/alsoc/emso/mso/sample

Para validar os modelos gerados, dados do artigo de Gani et al. (1986) foram utilizados. O modelo apresentado na Figura 3.3 foi simulado no software EMSO utilizando o pacote para predição de propriedades termo-físicas VRTherm (VRTech, 2005). O problema consiste em uma mistura de isobutane e n-pentane separados em uma coluna de 8 pratos com dados retirados de Ruiz (1984). A

seguir, na figura Figura 3.4 é mostrado o *flowsheet* construído para essa simulação no EMSO:

```
FlowSheet ColumnTest
PARAMETERS
PP as CalcObject(Brief="Physical Properties",File="vrpp");
NComp as Integer;
SET
PP.Components = [ "isobutane", "n-pentane" ];
DEVICES
col as Distillation;
feed as streamTP;
CONNECTIONS
feed to col.trays(5).Inlet;
SPECIFY
feed.F = 113.4 * "kmol/h";
feed.T = 291 * "K";
feed.P = 166.3 * "kPa";
feed.z = [ 0.5, 0.5 ];
col.trays(1).OutletV.F = 153 * "kmol/h";
col.sp.Outlet2.F = 68 * "kmol/h";
col.reb.OutletL.F = 28.4 * "kmol/h";
col.sp.frac = 0.55555;
col.cond.OutletV.F = 0 * "kmol/h";
SET
col.NTrays = 8;
INITIAL
col.cond.OutletL.T = 268 * "K";
col.cond.Level = 1 * "m";
col.cond.OutletL.z(1) = 0.5;
col.reb.OutletL.T = 339 * "K";
col.reb.Level = 1 * "m";
col.reb.OutletL.z(1) = 0.5;
col.trays.OutletL.T = 295 * "K";
col.trays.Level = 0.2 * col.trays.hw;
col.trays.OutletL.z(1) = 0.5;
end
```

Figura 3.4: Flowsheet para simulação no EMSO

Na Figura 3.5 são apresentados os perfis de vazões de líquido nos pratos. Deve-se ressaltar que a alimentação encontra-se no prato 5. O interessante nesses perfis é a sincronia no aumento das vazões de líquido em cada prato. Os pratos começaram vazios e a quantidade de líquido vai aumentando com o passar do tempo até atingirem seu estacionário. Este tipo de comportamento só pode ser predito com o uso de modelos dinâmicos.

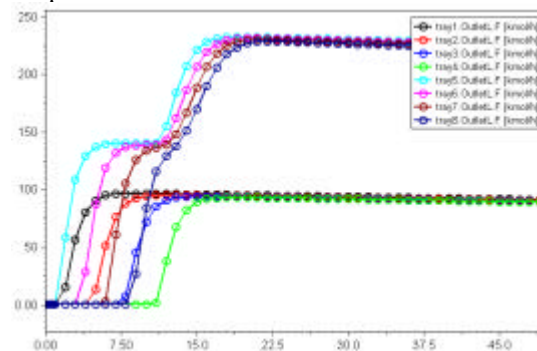


Figura 3.5: Vazão de líquido dos pratos

Na Figura 3.6 e Figura 3.7 são mostrados os perfis de composição de isobutane e n-pentane, respectivamente. O primeiro enriquece o topo da coluna enquanto o mais pesado (n-pentane) via para o fundo da mesma.



10 anos

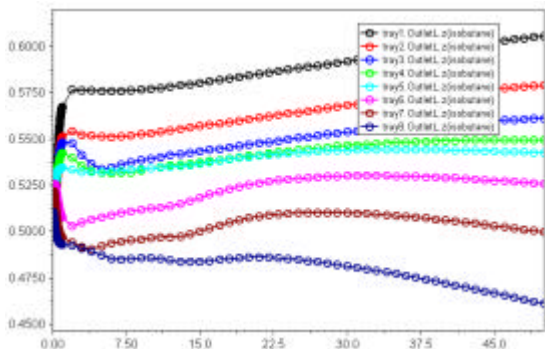


Figura 3.6: Perfil de composição de isobutane na torre

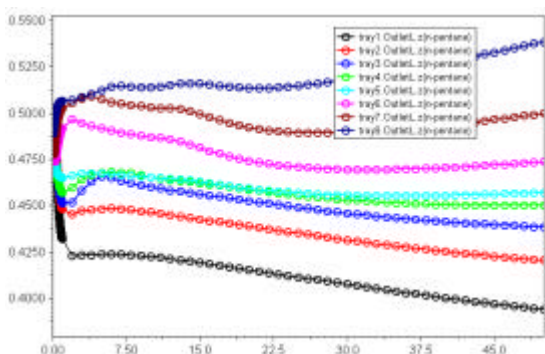


Figura 3.7: Perfil de n-pentane na coluna

4 CONCLUSÕES

Os resultados obtidos com os modelos preliminares foram muito satisfatórios. As correlações de hidrodinâmica dos modelos de pratos precisam ser melhoradas e cálculos de eficiência de prato devem ser adicionados. Além da possibilidade de uso de diferentes tipos de pratos, como por exemplo, pratos perfurados, valvulados e com borbulhadores.

Além do exemplo aqui apresentado, outros testes foram realizados utilizando o modelo desenvolvido. Sistemas com mais de 10 componentes em colunas de mais de 20 pratos foram simulados com eficiência e misturas aquosas também foram testadas com sucesso. Sistemas de separação envolvendo reação química estão sendo validados e em breve serão disponibilizados.

REFERÊNCIAS

BIARDI, G.; GROTTOLI, G. M. Development of a new simulation model for real trays distillation column. *Com. Chem. Engng.*, v. 13, n. 4/5, p. 441-449, 1989.

CAMERON, I. T.; RUIZ, C. A.; GANI, R. A generalized model for distillation – II – numerical and computational aspects. *Com. Chem. Engng.*, v. 10, n. 3, p. 199-211, 1986.

GANI, R.; CAMERON, I.T. Extension of dynamic models of distillation columns to steady-state simulations. *Com. Chem. Engng.*, v. 13, n. 3, p. 271-280, 1989.

GANI, R.; RUIZ, C. A.; CAMERON, I. T. A generalized model for distillation – I – model descriptions and applications. *Com. Chem. Engng.*, v. 10, n. 3, p. 181-198, 1986.

OLSEN, I.; ENDRESTOL, G. O.; SIRA, T. A rigorous and efficient distillation column model for engineering and training simulators. *Com. Chem. Engng.*, v. 21, n. Suppl, p. S193-S198, 1987.

RUIZ, C. A.; CAMERON, I. T.; GANI, R. A generalized model for distillation – III – study of startup operations. *Com. Chem. Engng.*, v. 12, n. 1, p. 1-14, 1988.

RUIZ, C. A. Estudio dinámico de las operaciones de destilación. M.Sc. Thesis, *Universidad Nacional del Sur*, Bahia Blanca, Argentina, 1984.

SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Emso: A new environment for modelling, simulation and optimization. In *ESCAPE 13th* [S.I.]: Elsevier Science Publishers, 2003. v. 1, p. 947-952.

VRTECH, VRTherm – Software para a predição de propriedades termo-físicas de misturas complexas, www.vrtech.com.br/vrtherm.html, 2005.