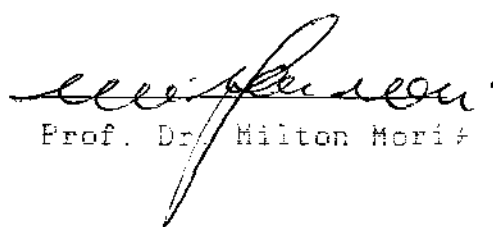


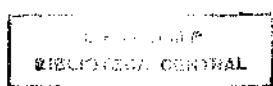
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

ESTUDO PARAMETRICO DA PURIFICAÇÃO DE
MONÓXIDO DE CARBONO - PROCESSO RECTISOL

Este exemplar corresponde à redação final da tese de Mestrado defendida pelo Eng^o Atilano Antônio Vegini, aprovada pela Comissão Julgadora em 28/05/1992.


Prof. Dr. Milton Moritz

Junho - 1992
Campinas - SP - Brasil



BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA
UNICAMP

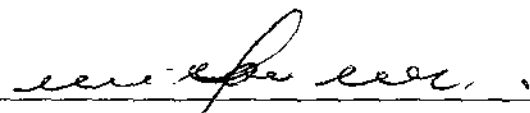
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

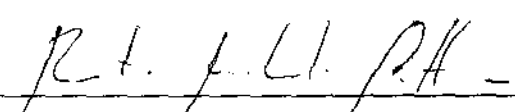
ESTUDO PARAMÉTRICO DA PURIFICAÇÃO DE
MONÓXIDO DE CARBONO - PROCESSO RECTISOL


Autor : Atilano Antônio Vegini

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da
Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP, como
parte dos requisitos necessários para a obtenção
do grau de Mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:


Orientador : Prof. Dr. Milton Mori


Prof. Dr. Renato Machado Cotta


Prof. Dr. José Cláudio Moura

Campinas - SP - Brasil
28/05/1992

Dedico esta tese a minha querida Lucieni, e aos meus pais e irmãos, pelo grande incentivo.

Agradecimentos

Ao meu orientador, o professor Milton Mori, que partilhou comigo os seus conhecimentos e a sua amizade.

Aos colegas do Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos Químicos.

Aos colegas da Estação Experimental da BASF de Sto Antônio da Posse, e em especial ao Dr. Hadden.

Ao colega de trabalho do grupo BASF, Ronald E. Kyrmee.

Aos colegas da BASF Química da Bahia pela ajuda, e fornecimento dos dados experimentais utilizados neste trabalho.

Ao grupo BASF, pela contribuição financeira ao Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos Químicos, e incentivo e apoio ao meu trabalho.

Resumo

Vegini, Atilano Antônio. Estudo Paramétrico da Purificação de Monóxido de Carbono - Processo Rectisol.

(Sob a orientação do prof. Dr. Milton Mori.)

Este trabalho consiste na simulação de uma Planta de Monóxido de Carbono (CO), o qual é produzido a partir do coque de petróleo e oxigênio, e é purificado através do uso de metanol resfriado sob alta pressão (Processo Rectisol).

A simulação da Planta de CO é realizada com ajuda de um simulador de processos. A escolha do pacote termodinâmico, a predição da eficiência das colunas, e a correção do balanço energético da coluna de absorção, foram algumas das informações necessárias para a simulação.

A validade do simulador é analisada através de dados experimentais obtidos de uma Planta Piloto, e dados coletados na própria Planta de CO.

Através da simulação é possível realizar o estudo paramétrico, o qual possibilita verificar como as variáveis de processo influenciam a purificação do CO.

Como resultado, apresentamos uma configuração de operação para o processo de purificação, que reduz o custo operacional da Planta de CO e atende as exigências de qualidade do produto final.

Abstract

Vegini, Atilano Antônio. Parametric Study of Purification Carbon Monoxide - Rectisol Process.

(Under the direction of Milton Mori.)

This work consists in a simulation of a Carbon Monoxide (CO) Plant, which is produced by petrol coke and oxygen, and it is cleaned through the methanol at low temperature under high pressure (Rectisol Process).

The simulation of CO Plant is made with the support of a process simulator. The selection of property method, the prediction about efficiency column, and correction in the energetic balance absorption column, were some of the input information necessary to the simulation.

The result of simulation is analysed with experimental data obtained from a Pilot Plant, and also from the industrial CO Plant.

From the simulation it is possible to realize the parametric study, which becomes possible to verify how the process variables affect the CO purification.

As the result of this work, we show a new operation conditions to the purification process, which reduce the production cost of the CO Plant, and not affecting the quality of the final product.

Conteúdo

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1	Gaseificação	3
2.2	Processos de Purificação	6
2.2.1	Comparação entre Solventes Químicos e Físicos	7
2.2.2	Solventes Físicos	10
2.2.3	Processo Rectisol	13
2.3	Simuladores de Processos	14
2.3.1	Estrutura dos Simuladores de Processos	15
2.3.2	Simulador HYSIM	16
3	DESCRIÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO	17
3.1	Descrição Geral do Processo	17
3.2	Especificação das Matérias-Primas e do CO produzido	23
3.3	Unidade de Gaseificação	24
3.4	Unidade de Purificação	26
3.4.1	Absorção dos Gases Ácidos	26
3.4.2	Desabsorção dos Gases Ácidos	27
3.4.3	Destilação de Metanol	27
3.4.4	Descrição dos Equipamentos	28

4 SIMULAÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO	31
4.1 Estrutura da Simulação	31
4.2 Escolha do Pacote de Propriedades	32
4.2.1 Peng Robinson	33
4.2.2 Wilson	35
4.3 Unidade de Gaseificação	45
4.3.1 Gaseificador	45
4.3.1.1 Reações de Gaseificação	46
4.3.1.2 Reatores de Gibbs e Estequiométrico ...	47
4.4 Absorção dos Gases Ácidos e Recuperação do Solvente .	47
4.4.1 Compressor e Bombas	47
4.4.2 Unidade de Resfriamento (V120)	48
4.4.3 Vaso Acumulador (B112)	48
4.4.4 Trocadores de Calor	48
4.4.5 Colunas	49
4.4.5.1 Colunas de Absorção	53
4.4.5.2 Coluna de Desabsorção	63
4.4.5.3 Coluna de Destilação	66
4.5 Teste de Validade do Simulador	70
4.5.1 Dados Obtidos da Planta Piloto	70
4.5.2 Dados Obtidos da Planta de CO	83
5 ESTUDO PARAMÉTRICO DA PURIFICAÇÃO DE MONÓXIDO DE CARBONO	90
5.1 Absorção dos Gases Ácidos	90
5.1.1 Pressão de Absorção da K111	91
5.1.2 Vazão Mássica de Metanol Para a Coluna K111 ...	93
5.1.3 Temperatura do Metanol Para a Coluna K111	95
5.1.4 Temperatura do Gás Para a Coluna K111	97
5.1.5 Coluna K110	99
5.2 Efeito da Operação de Desabsorção Sobre a Absorção ..	102
5.3 Desabsorção dos Gases Ácidos	108
5.3.1 Temperatura do Trocador W113	108
5.3.2 Coluna de Desabsorção K112	112

5.4 Destilação de Metanol	115
5.4.1 Coluna de Destilação K113	115
5.4.1.1 Estágio de Alimentação	115
5.4.1.2 Metanol da Corrente MET_K110	117
5.4.1.3 Temperatura do Fundo da Coluna	120
5.4.1.4 Metanol da Corrente MET_P/K113	123
6 RESULTADOS E DISCUSSÃO	128
6.1 Estágio de Alimentação das Colunas K112 e K113	128
6.2 Mudanças nas Variáveis de Operação	130
6.3 Temperatura de Condensação do Trocador W113	132
6.4 Configuração de Operação	134
7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES	137
A DEFINIÇÃO DA NOMENCLATURA UTILIZADA NAS FIGURAS	139
B SIMULAÇÃO DA PLANTA DE CO	142

Lista de Tabelas

2.1	Compostos Encontrados no Gás Produzido no Gaseificador da BASF	5
2.2	Processos de Purificação	7
2.3	Propriedades dos Solventes Físicos	10
2.4	Solubilidades de Gases em Solventes Físicos, Relativo ao Dióxido de Carbono à 25 °C	11
4.1	Comparação dos vários modelos de atividade com os dados experimentais obtidos por Green e Venner (DECHEMA, 1977)	37
4.2	Comparação dos vários modelos de atividade com os dados experimentais obtidos por Huges e Maloney (DECHEMA, 1977)	38
4.3	Comparação dos vários modelos de atividade com os dados experimentais obtidos por Kohdutova, Suska, Novak e Pick (DECHEMA, 1977)	39
4.4	Especificação do Trocador de Calor W111	50
4.5	Especificação do Trocador de Calor W113	51
4.6	Especificação do Trocador de Calor W115	52
4.7	Taxa de energia necessária para correção da temperatura do metanol na saída da K111	60
4.8	Taxa de Energia Calculada pela Correlação	62
4.9	Cálculo da HETP	63

4.10	Viscosidade e Composição da Corrente de Alimentação da Coluna K112	65
4.11	Vazão e Velocidade Superficial do Vapor na Coluna K113	68
4.12	Taxa de energia necessária para a correção da temperatura do metanol na saída da coluna (Planta Piloto)	71
4.13	Taxa de Energia Calculada pela Correlação (Planta Piloto)	72
4.14	Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_30	81
4.15	Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_35	81
4.16	Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_36	82
4.17	Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_37	82
4.18	Dados de temperatura da Planta de CO, e obtidas pelo Simulador	89
5.1	Influência da Pressão no Processo de Absorção	91
5.2	Influência da Vazão do Metanol Para a K111 no Processo de Absorção	93
5.3	Influência da Temperatura do Metanol Para a K111 no Processo de Absorção	95
5.4	Influência da Temperatura do Gás no Processo de Absorção	97
5.5	Influência da Vazão de Água na Remoção de NH ₃ e HCN da Corrente de Gás (GAS_V110)	99
5.6	Influência da Vazão do Metanol na Remoção de Água da Corrente de Gás (GAS_K110AGUA)	101
5.7	Influência da Presença do Gás Ácido no Metanol Sobre o Processo de Absorção	102

5.8	Influência da Presença de Água no Metanol Sobre o Processo de Absorção	105
5.9	Influência da Temperatura Sobre a Composição da Corrente GC_W113	110
5.10	Influência da Temperatura Sobre a Composição da Corrente GNC_W113	110
5.11	Influência do Estágio de Alimentação no Desempenho da Coluna de Desabsorção K112	112
5.12	Influência do Estágio de Alimentação no Desempenho da Coluna de Destilação K113	117
5.13	Influência da Vazão Mássica de MET_K110 no Desempenho da Coluna de Destilação K113	120
5.14	Influência da Temperatura do Fundo da Coluna no Desempenho da Coluna de Destilação K113	123
5.15	Influência da Vazão Mássica de MET_P/K113 no Desempenho da Coluna de Destilação K113	123
6.1	Resultados da Simulação SPA e SPNEA	129
6.2	Resultados da Simulação SPA e SPNEAVO	131
6.3	Influência da Temperatura de Condensação do Trocador W113 Sobre o Processo de Purificação	133
6.4	Resultados da Simulação SPA e SPCMCO	135

Lista de Figuras

2.1	Diagrama de Equilíbrio	9
3.1	Unidade de Gaseificação	19
3.2	Absorção dos Gases Ácidos	20
3.3	Desabsorção dos Gases Ácidos	21
3.4	Destilação de Metanol	22
4.1	Diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador, versus dados experimentais obtidos por Green e Venner (DECHEMA, 1977)	41
4.2	Diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador, versus dados experimentais obtidos por Huges e Maloney (DECHEMA, 1977)	42
4.3	Diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador, versus dados experimentais obtidos por Kohdutova, Suska, Novak e Pick (DECHEMA, 1977)	43
4.4	Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_30	55
4.5	Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_35	56
4.6	Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_36	57
4.7	Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_37	58

4.8	Correlação de O' Connel	64
4.9	Cálculo de eficiência para sistemas metanol/água ..	67
4.10	Simulação da Coluna de Absorção AMI_30SC	73
4.11	Simulação da Coluna de Absorção AMI_35SC	74
4.12	Simulação da Coluna de Absorção AMI_36SC	75
4.13	Simulação da Coluna de Absorção AMI_37SC	76
4.14	Simulação da Coluna de Absorção AMI_30	77
4.15	Simulação da Coluna de Absorção AMI_35	78
4.16	Simulação da Coluna de Absorção AMI_36	79
4.17	Simulação da Coluna de Absorção AMI_37	80
4.18	Simulação da Coluna de Absorção K110	84
4.19	Simulação da Coluna de Absorção K111	85
4.20	Simulação da Coluna de Desabsorção K112	86
4.21	Simulação da Coluna de Destilação K113	87
4.22	Simulação dos Trocadores de Calor	88
5.1	Estudo Paramétrico da Absorção dos Gases Ácidos ..	92
5.2	Influência da Pressão na Absorção de CO ₂	94
5.3	Influência da Pressão na % Molar de Metanol na Fase Gasosa	94
5.4	Influência da Vazão Mássica de Metanol na Absorção de CO ₂	96
5.5	Influência da Vazão Mássica de Metanol na % Molar de Metanol na Fase Gasosa	96
5.6	Influência da Temperatura do Metanol na Absorção de CO ₂	98
5.7	Influência da Temperatura do Metanol na % Molar de Metanol na Fase Gasosa	98
5.8	Influência da Temperatura do Gás na Absorção de CO ₂	100
5.9	Influência da Temperatura do Gás na % Molar de Metanol na Fase Gasosa	100
5.10	Efeito da Presença de CO ₂ no Metanol, Sobre a Concentração de CO ₂ no Gás de Saída (CO_PURO)	103

5.11	Efeito da Presença de H ₂ S no Metanol, Sobre a Concentração de H ₂ S no Gás de Saída (CO_PURO)	104
5.12	Efeito da Presença de COS no Metanol, Sobre a Concentração de COS no Gás de Saída (CO_PURO)	104
5.13	Efeito da Presença de H ₂ O no Metanol, Sobre a Concentração de CO ₂ no Gás de Saída (CO_PURO)	107
5.14	Estudo Paramétrico da Desabsorção de Gases Ácidos.	109
5.15	Influência da Temperatura Sobre a Composição do Gás Condensável (GC_W113)	111
5.16	Influência da Temperatura Sobre a Composição do Gás Não Condensável (GNC_W113)	111
5.17	Influência do Estágio de Alimentação Sobre o Consumo de Energia	114
5.18	Estudo Paramétrico da Destilação de Metanol	116
5.19	Influência do Estágio de Alimentação Sobre a % Molar de H ₂ O no Metanol (MET_K113)	118
5.20	Influência da Temperatura do Metanol (MET_K110), Sobre o Consumo de Vapor	119
5.21	Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_K110), Sobre a % Molar de H ₂ O no MET_K113	121
5.22	Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_K110), Sobre o Consumo de Vapor	122
5.23	Influência da Temperatura Sobre a Composição do Metanol no Fundo da Coluna K113 (AGUA_K113)	124
5.24	Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_P/K113), Sobre a % Molar de H ₂ O no MET_K113	126
5.25	Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_P/K113), Sobre o Consumo de Vapor	127

Nomenclatura

a_{ij}	Parâmetro de energia independente da temperatura entre os componentes i e j (cal/gmol-K)
a_1, a_2, a_3	Constantes da equação 4.11 e 4.12
b_{ij}	Parâmetro de energia dependente da temperatura entre os componentes i e j (cal/gmol-K)
b_1 a b_5	Constantes da equação 4.11 e 4.12
C_v	Capacidade calorífica a volume constante
EE	Taxa energética (KJ/h)
f_i	Fugacidade do componente i
H	Entalpia
K_i	Razão de equilíbrio para o componente i
k_{ij}	Parâmetro de interação binário
K_1 e K_2	Constantes da equação 4.15 (KJ/Kg)
K_3	Constante da equação 4.15 (KJh/°CKg ²)
N	Número total de componentes
n_i	Número de moles do componente i
P	Pressão
$P_{c,i}$	Pressão crítica do componente i
$P_{r,i}$	Pressão reduzida do componente i
R	Constante do gás ideal
S	Entropia
T	Temperatura
$T_{c,i}$	Temperatura crítica do componente i

TG	Temperatura do gás (°C)
TL	Temperatura do líquido (°C)
T _{r1}	Temperatura reduzida do componente i
V	Volume
VG	Vazão de gás (Kg/h)
VL	Vazão de líquido (Kg/h)
x ₁	Fração molar do componente i na fase líquida
y ₁	Fração molar do componente i na fase gasosa
Z	Fator de compressibilidade

Letras Gregas

α_{ij}	Volatilidade relativa entre os componentes i e j
γ_1	Coefficiente de atividade do componente i
ϕ_1	Coefficiente de fugacidade do componente i
ω_1	Fator de acentricidade do componente i

Subscritos

i	Identificação do componente e contador de somatório
j	Identificação do componente e contador de somatório
k	Identificação do componente e contador de somatório
c	Propriedade crítica
r	Propriedade reduzida
o	Estado de referência

Sobrescritos

ID	Gás ideal
L	Fase líquida
o	Estado de Referência

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

A tese de título *Estudo Paramétrico da Purificação de Monóxido de Carbono - Processo Rectisol*, procura apresentar resultados que contribuam para o melhor conhecimento da Planta de Monóxido de Carbono (CO), e determine condições de operação que reduzam o custo operacional da planta sem afetar a qualidade do produto final.

O Monóxido de Carbono é utilizado como matéria-prima na síntese do DMF (dimetilformamida), sendo produzido a partir do Coque de Petróleo e Oxigênio. A reação se desenvolve a alta temperatura (acima de 1000 °C), gerando como sub-produtos o CO₂, H₂, H₂O, H₂S, COS, CS₂, Cinzas, etc.. A purificação do CO é baseada na absorção física das impurezas com metanol resfriado a alta pressão, processo mais conhecido como Rectisol.

Devido ao uso final do CO (para a síntese do DMF), a qualidade deve ser rigorosamente controlada. O conhecimento completo da Planta ajuda a controlar a qualidade do CO produzido diante das eventuais mudanças nas condições de operação ou qualidade das matérias-primas. Atualmente algumas informações sobre a Planta de CO encontram-se no manual de operação (BASF, 1982), mas não são suficientes para o conhecimento completo do processo.

O estudo paramétrico é uma poderosa ferramenta na determinação das variáveis que afetam o funcionamento operacional de uma Planta Industrial.

Para realizarmos o estudo paramétrico é necessário simular o processo. A simulação foi realizada com ajuda de um simulador de processos, o qual pertence a Hyprotech Ltd e é desenvolvido para operar em microcomputadores. O microcomputador utilizado é um PC-AT munido com co-processadores aritmético e lógico.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica sobre simuladores e os processos de gaseificação e purificação de CO.

No Capítulo 3 é apresentada a descrição da Planta de Monóxido de Carbono, a qual é responsável pela produção e purificação de CO.

O Capítulo 4 apresenta a descrição das etapas seguidas para montar a simulação da Planta de CO, bem como os testes realizados para comprovar a validade do simulador utilizado.

No Capítulo 5 são apresentados os resultados do estudo paramétrico da purificação de CO. Os processos de absorção, desabsorção e destilação são estudados detalhadamente. A influência que a desabsorção possui sobre o processo de absorção é também analisada.

O Capítulo 6 apresenta diferentes formas de configuração para o processo de purificação de CO, as quais reduzem o custo operacional da Planta sem prejudicar a qualidade do produto final.

Finalmente, no Capítulo 7 são apresentados algumas conclusões e sugestões.

Capítulo 2

REVISÃO

BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo procuramos expor uma breve revisão sobre simuladores e os processos de gaseificação e purificação de Monóxido de Carbono.

2.1 Gaseificação

Há dois principais métodos na produção de gases: carbonização e gaseificação. Na carbonização, pressão atmosférica e temperatura baixa são geralmente as condições de operação. O combustível sólido é tratado termicamente em uma retorta, sendo que o calor necessário é aplicado externamente. O gás de alimentação é o ar. Devido a estas condições, formam-se principalmente gases como o CO_2 , H_2O , SO_2 e NO_x (Smool e Smith, 1985).

Nos processos de gaseificação, o método de aquecimento do combustível sólido é interno, gerando desta forma uma alta temperatura de operação. O gás de alimentação é vapor e/ou oxigênio. Os principais gases formado são o CO , CO_2 , H_2 , CH_4 , H_2O , H_2S , HCN e NH_3 (Smool e Smith, 1985).

Há vários sistemas de gaseificação de combustíveis sólidos, os quais diferem entre si na forma de contato entre os reagentes (leito fixo ou fluidizado), no tipo de fluxo dos reagentes (cocorrente ou contracorrente), etc.

Os principais fatores que devem ser considerados na escolha de determinado sistema de gaseificação são:

- a) disponibilidade do combustível,
- b) utilização do gás resultante e
- c) custo da instalação

A gaseificação é essencialmente baseada na reação química do carbono com oxigênio e vapor. Teoricamente o carbono pode ser convertido em gás exotermicamente por direta oxidação, ou endotermicamente pela redução de vapor e dióxido de carbono. Portanto, a eficiência na conversão do carbono está no controle desta reação.

Os fatores essenciais no controle da reação do carbono são: a temperatura e pressão na câmara de reação, a taxa de reação, a difusão do reagente e dos produtos gasosos, a forma de injeção de ar/vapor ou ar/oxigênio e a forma¹ de como o fluxo de combustível e dos gases reagentes estão arranjados.

Os combustíveis sólidos são uma complexa mistura química. Depois da gaseificação, uma variedade de espécies químicas se desenvolve. Para os processos de purificação de gás, a quantidade de enxofre e o número de compostos nos quais o enxofre aparece é de vital importância. A quantidade de material volátil no combustível de alimentação fornece os tipos de espécies de hidrocarbonetos presentes no gás de saída. Em geral, um combustível de baixa qualidade (alto teor de enxofre e material volátil) na alimentação do gaseificador, trará dificuldades no processo de purificação dos gases.

O próprio processo de gaseificação determinará os compostos de enxofre e carbono que teremos na alimentação da

¹cocorrente ou contracorrente

corrente para o processo de purificação. As condições de operação, especialmente a temperatura, o modo de contato e o tempo de residência do gás e da fase sólida, afetam a composição do gás produzido. Temperaturas de operação elevadas (acima de 1000 °C), reduzem a quantidade de impurezas orgânicas através da degradação térmica. No entanto, nestas condições, o elevado grau de conversão é sempre acompanhado pela geração de grandes quantidades de traços de compostos inorgânicos. Baixas temperaturas de operação (menor que 1000 °C), resultam numa melhor eficiência térmica, mas conduzem a presença de uma ampla variedade de compostos orgânicos que causam problemas para o processo de purificação.

Centenas de espécies químicas são identificadas nas correntes do processo de gaseificação do coque de petróleo. No entanto, somente um pequeno número de espécies químicas encontram-se em quantidades significativas. A Tabela 2.1 (BASF, 1982), lista alguns dos mais importantes compostos gerados na gaseificação do coque de petróleo.

Tabela 2.1 Compostos Encontrados no Gás Produzido no Gaseificador da BASF

COMPOSIÇÃO
monóxido de carbono
dióxido de carbono
nitrogênio
hidrogênio
oxigênio
água
ácido sulfídrico
sulfeto de carbonila
bissulfeto de carbono
amônia
ácido cianídrico

2.2 Processos de Purificação

Sistemas para purificação de gases, historicamente, têm sido utilizados nas indústrias de petróleo e de gás natural para remoção de H_2S e CO_2 da corrente de produtos.

A seleção de um sistema de purificação, depende de diversos fatores: o tipo de combustível gaseificado, o processo de gaseificação utilizado, o uso pretendido do gás produzido e o destino desejado ao enxofre liberado do combustível, são os mais importantes. A consideração destes fatores na maioria dos casos, define o tipo de processo de purificação necessário.

O uso final do gás produzido define o grau de pureza necessário. Em muitas aplicações utiliza-se o gás produzido sem a necessidade de purificação completa. Por outro lado, a produção de gás para sínteses, requer melhores níveis de purificação para evitar o envenenamento de processos catalíticos e alcançar as especificações do produto.

A maioria dos processos que usa solvente líquido na purificação, utiliza uma combinação de absorção do gás e operações de recuperação do solvente. Estes solventes podem ser classificados da seguinte forma:

- 1) solventes físicos;
- 2) solventes químicos;
- 3) misturas de solventes físicos e químicos.

A Tabela 2.2 (Kelly, 1982 e Staton, 1983), apresenta os principais processos de purificação para os solventes líquidos.

Tabela 2.2 Processos de Purificação

NOME DO PROCESSO	SOLVENTE FÍSICO
Fluor Solvente	propileno carbonato (PC)
Purisol	n-metil-pirrolidona (NMP)
Rectisol	metanol
Selexol	dimetil éter de polietileno glicol (DEPG)
Sepasolv MPE	sepasolv
NOME DO PROCESSO	SOLVENTE QUÍMICO
MEA	monoetanolamina
DEA	dietanolamina
DIPA	diisopropanolamina
MDEA	metildietanolamina
DGA	diglicolamina
Benfield	carbonato de potássio quente
NOME DO PROCESSO	MISTURA DE SOLVENTES FÍSICOS E QUÍMICOS
Amisol	metanol com MEA ou DEA
Sulfinol	água com DIPA e sulfolane

2.2.1 Comparação entre Solventes Químicos e Físicos

Nos processos que usam solventes químicos, uma reação química ocorre entre o(s) componente(s) ativo do solvente e os gases ácidos. Desde que a maior parte dos solventes químicos são soluções de um ou mais componentes ativos em água, sua capacidade de remoção, é função da quantidade de componente ativo na solução.

Nos processos com solventes físicos, cada impureza do gás é absorvida no solvente de acordo com sua pressão parcial

na fase gasosa e seu coeficiente de solubilidade, o qual depende da temperatura.

Um mesmo solvente pode ser usado para remover seletivamente vários componentes. Dependendo da necessidade do processo, a remoção completa de apenas um componente pode ser conseguida.

O fluxo de solvente químico necessário para a absorção é aproximadamente proporcional a quantidade de gases ácidos que devem ser removidos. Desde que a capacidade de absorção do solvente químico é praticamente independente da pressão, estes processos são preferidos em tratamentos de gases com baixo conteúdo de gases ácidos e baixa pressão.

De acordo com a lei de Henry's, a quantidade de gás ácido absorvida em um solvente físico, é proporcional à pressão parcial do gás ácido e ao seu coeficiente de solubilidade. Devido a isto, o fluxo de solvente físico necessário para a absorção é praticamente independente da concentração dos gases ácidos na corrente de gás, mas é proporcional ao fluxo total do gás e inversamente proporcional à pressão parcial e ao coeficiente de solubilidade dos gases ácidos a serem removidos.

Geralmente, a aplicação de solventes físicos é mais favorável na purificação onde as pressões parciais dos gases ácidos é alta. Alguns estudos registram que para pressões parciais dos gases ácidos abaixo de 200 psig ($\approx 14,8$ Bar), os solventes químicos são os mais usados, enquanto que para pressões parciais acima de 300 psig ($\approx 21,7$ Bar) são utilizados os solventes físicos. Outros fatores deverão determinar o tipo de solvente que deve ser utilizado nas pressões intermediárias (Kelly, 1981). O diagrama de equilíbrio apresentado na Figura 2.1 ilustra este fato.

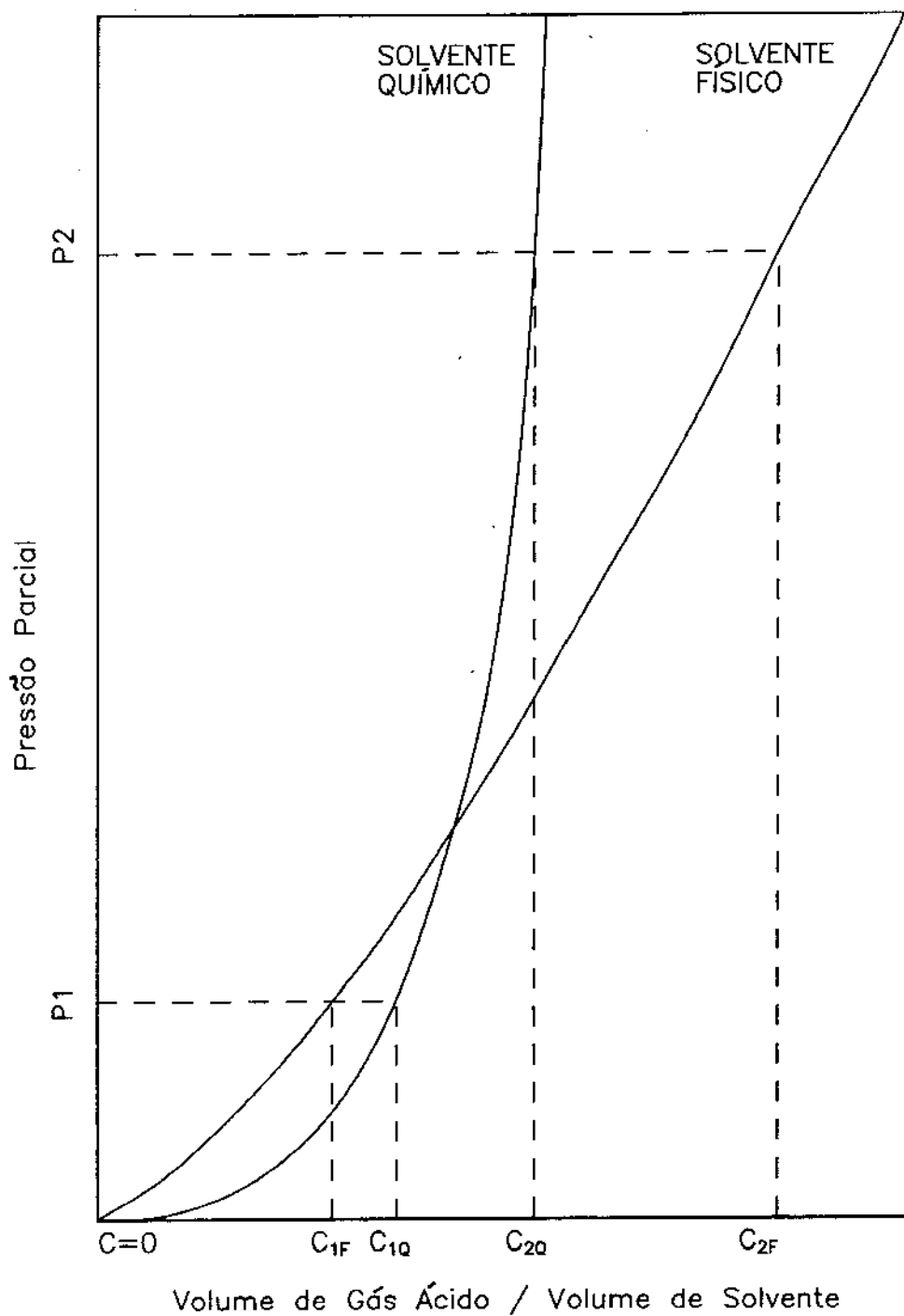


Figura 2.1 Diagrama de Equilíbrio

2.2.2 Solventes Físicos

Na Tabela 2.3 (Newman, 1985), é apresentado algumas propriedades dos solventes mais comuns. A Tabela 2.4 (Newman, 1985), apresenta a solubilidade relativa de vários gases em diversos solventes.

Tabela 2.3 Propriedades dos Solventes Físicos

	NOME DO PROCESSO				
	SELEXOL	FLUOR SOLVENTE	PURISOL	SEPASOLV MPE	RECTISOL
Solvente	DEPG	PC	NMP	Sepasolv	Metanol
Registro	Norton	Fluor	Lurgi	BASF	Linde AG Lurgi
Viscosidade a 25°C, cp	5,8	3,0	1,65	-	0,6
Peso Específico a 25°C, Kg/m ³	1030	1195	1027	-	785
Peso Molecular	280	102	99	320	32
Pressão Vapor a 25°C, mmHg	7,3E-04	8,5E-02	4,0E-01	3,7E-04	-
Ponto Congel. °C	-28	-48	-24	-	-92
Ponto Ebulição a 760 mmHg, °C	-	240	202	320	65
Número Plantas Industriais	32	13	5	4	≈ 100

Tabela 2.4 Solubilidades de Gases em Solventes Físicos,
Relativo ao Dióxido de Carbono à 25 °C

COMP.	DEPG	PC	NMP	SEPASOLV	METANOL -25 °C
H ₂	1,3 E-02	7,8E-03	6,4E-03	5,0E-03	5,4E-03
N ₂	-	8,4E-03	-	-	1,2E-02
O ₂	-	2,6E-02	3,5E-02	-	2,0 E-02
CO	2,8 E-02	2,1E-02	2,1E-02	2,1E-02	2,0 E-02
C ₁	6,7 E-02	3,8E-02	7,2E-02	6,6E-02	5,1 E-02
C ₂	4,2 E-01	1,7E-01	3,8E-01	-	4,2 E-01
C ₂ H ₄	4,9 E-01	3,5E-01	5,5E-01	-	4,6 E-01
CO ₂	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
C ₃	1,02	0,51	1,07	-	2,35
iC ₄	1,87	1,13	2,21	-	-
nC ₄	2,33	1,75	3,48	-	-
COS	2,33	1,88	2,72	2,54	3,92
iC ₅	4,47	3,50	-	-	-
C ₂ H ₂	4,53	2,87	7,37	-	3,33
NH ₃	4,87	-	-	-	23,20
nC ₅	5,53	5,00	-	-	-
H ₂ S	8,93	3,29	10,20	6,86	7,06
nC ₆	11,00	13,50	42,70	-	-
CH ₃ SH	22,70	27,20	34,00	23,10	-
nC ₇	24,00	29,20	50,00	-	-
CS ₂	24,00	30,90	-	-	-
SO ₂	93,30	68,60	-	-	-
C ₆ H ₆	253,00	200,00	-	-	-
C ₄ H ₄ S	540,00	-	-	-	-
H ₂ O	733,00	300,00	4000,00	-	-
HCN	1200,00	-	-	-	-

A decisão de qual processo físico deve ser utilizado não é tão fácil. Dos vários processos físicos existentes comercialmente, SELEXOL e RECTISOL são freqüentemente considerados os mais comuns para a purificação de gases provenientes de combustíveis sólidos (carvão e coque de petróleo). Ambos os processos usam absorção à alta pressão para a remoção dos gases ácidos, e uma combinação de sistemas para a regeneração do solvente. Ambos os processos possuem vantagens e desvantagens similares. As vantagens incluem baixo consumo de energia, baixa corrosividade, e a habilidade de remover gases ácidos seletivamente. A maior desvantagem para ambos os processos é a grande afinidade com os hidrocarbonetos, os quais dificultam a recuperação do solvente.

A volatilidade relativa dos dois solventes fornece a maior diferença entre os dois processos. A perda de solvente para o processo com metanol é significativa. Além do custo de reposição deste metanol, há problemas de emissão deste solvente no meio ambiente. No entanto, a grande volatilidade permite a separação do metanol dos hidrocarbonetos absorvidos usando simplesmente um processo de desabsorção.

A pressão de vapor do DEPG (dimetil-éter de polietileno glicol) é muito baixa, e portanto, as perdas deste solvente são mínimas. Isto pode causar um problema na separação dos hidrocarbonetos absorvidos no solvente através de uma simples desabsorção.

Os dois solventes também diferem consideravelmente na viscosidade. Como o DEPG é consideravelmente mais viscoso do que o metanol, a temperatura de operação deste processo deve ser limitada a valores não muito baixos. Desde que baixas temperaturas correspondam a grande solubilidade dos gases ácidos, o processo com metanol precisa de menos fluxo de solvente para remover a mesma quantidade de gases ácidos.

O grande custo de bombeamento associado ao uso do solvente DEPG é balanceado contra o grande custo de refrigeração, que é requerido pelo sistema com metanol.

Os gases ácidos presentes em maior quantidade na corrente gasosa de combustíveis sólidos são CO_2 , H_2S , COS e CS_2 . Para ambos os solventes, a ordem de solubilidade dos gases ácidos apresentados na Tabela 2.4, mostra que a remoção do COS é mais difícil do que o H_2S . Portanto, altas pressões, baixas temperaturas, ou grande velocidade de circulação de líquido são necessárias para a remoção do COS a níveis suficientemente baixos.

2.2.3 Processo Rectisol

O processo Rectisol é um dos processos de remoção de gás ácido mais utilizado na indústria². Este processo é baseado na pesquisa das propriedades de solventes a baixa temperatura realizado na Alemanha, durante a década de 50 (Kelly, 1981). Lurgi, transportou este conceito para a engenharia de processos (Kelly, 1981). Em princípio, qualquer solvente orgânico tal como acetona ou tolueno pode ser usado no processo Rectisol, mas o metanol geralmente é o escolhido (Kelly, 1981). O processo toma vantagem com o fato da solubilidade dos gases ácidos aumentar com o acréscimo da pressão e decréscimo da temperatura para os solventes físicos.

Uma das primeiras aplicações do processo Rectisol em grande escala, foi numa planta de conversão de carvão na África do Sul em 1954. A remoção do gás ácido foi necessária para proteger processos catalíticos e aumentar o poder calorífico dos gases produzidos. Naquele tempo, não havia controle quanto a poluição do meio ambiente. O processo tem sido aperfeiçoado desde então, mas as características mais importantes do processo continuam sendo as mesmas.

²Vide Tabela 2.3

As condições são favoráveis ao uso do processo Rectisol para os gases produzidos pela oxidação do carvão, coque de petróleo, óleo ou resíduos pesados.

Embora o fornecimento de refrigeração para baixas temperaturas requeira muita energia, esta desvantagem é compensada em valor pela considerável redução do fluxo de solvente para a remoção do CO₂.

DEPG e NMP possuem maior seletividade de H₂S/CO₂ do que o metanol. Entretanto, a seletividade de COS/CO₂ é maior no metanol. Devido as condições de operação³, a quantidade de CO₂ dissolvida em metanol é bem maior do que nos outros solventes.

2.3 Simuladores de Processos

Nas duas últimas décadas, a simulação de processo tem se tornado indispensável para o projeto, análise e otimização de processos. O crescente interesse nesta área é facilmente identificado pela grande quantidade de programas existentes no mercado, bem como pelo grande número de artigos publicados nas revistas especializadas, cerca de 50 artigos por mês (Biegler, 1989).

Simulação de processo segundo Motard (1975), é a representação de um processo químico através de modelos matemáticos que solucionados geram informações sobre o desempenho deste processo. Os modelos matemáticos são usualmente representados por programas de computadores, enquanto que o simulador de processos constitui-se no conjunto destes programas.

³Baixa temperatura e alta pressão.

2.3.1 Estrutura dos Simuladores de Processos

Um simulador de processo segundo Leesley (1982), deverá ter a seguinte estrutura:

- 1) um programa executivo principal;
- 2) um banco de dados das propriedades físicas;
- 3) um conjunto de sub_rotinas de cálculos de propriedades físicas e termodinâmicas;
- 4) um conjunto de modelos matemáticos de operações unitárias.

A seguir é descrito as etapas acima citadas :

1) Programa Executivo

O programa executivo é a parte principal de um simulador de processos. Sua função é o gerenciamento das demais etapas.

2) Banco de Dados

O banco de dados é utilizado como interface entre o programa executivo, as operações unitárias e os cálculos das propriedades termodinâmicas. Nele são armazenadas informações referentes aos componentes, suas propriedades físicas e parâmetros termodinâmicos. Como exemplo de banco de dados utilizado podemos citar o DIPPR (desenvolvido nos Estados Unidos) e o DECHEMA (desenvolvido na Alemanha).

3) Cálculo das Propriedades Termodinâmicas e Físicas

O conjunto de sub_rotinas de cálculo das propriedades termodinâmicas é baseado em minuciosas revisões de técnicas de estimativas de propriedades termodinâmicas.

4) Operações Unitárias

São modelos matemáticos que representam uma operação unitária e descrevem os fenômenos de quantidade de movimento, energia e massa.

2.3.2 Simulador HYSIM

É um simulador de processos pertencente a Hyprotech Ltd, o qual foi desenvolvido para aplicações em indústrias de processamento de gás, óleo, petroquímica, química e combustíveis sintéticos. É um simulador totalmente interativo, o qual combina técnicas sofisticadas, mas manuseio fácil e conveniente.

Com exceção do HYSIM, os simuladores comerciais são baseados na estrutura modular seqüencial (HYSIM, 1991), a qual consiste no cálculo das unidades, uma após a outra, obedecendo a uma hierarquia que é determinada pelo programa executivo. A limitação deste método é que todas as variáveis, em todas as correntes de entrada para a unidade, deverão estar completamente definidas para que o cálculo da unidade possa ser efetuado.

Como o simulador HYSIM é baseado na estrutura modular não seqüencial, é possível a alimentação das informações em qualquer direção, o que torna a simulação do processo mais flexível.

Capítulo 3

DESCRIÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO

Apresentamos neste capítulo de maneira breve, a descrição da Planta de Monóxido de Carbono, a qual é responsável pela produção e purificação de monóxido de carbono.

3.1 Descrição Geral do Processo

A produção e purificação do monóxido de carbono(CO), deve suprir as necessidades de CO na síntese do dimetilformamida (DMF). Para isto, está projetada para uma capacidade anual de:

2.200.000 Nm³ de CO \approx 2.750 ton de CO,
para 8.000 horas de operação. Isso corresponde a uma produção de:

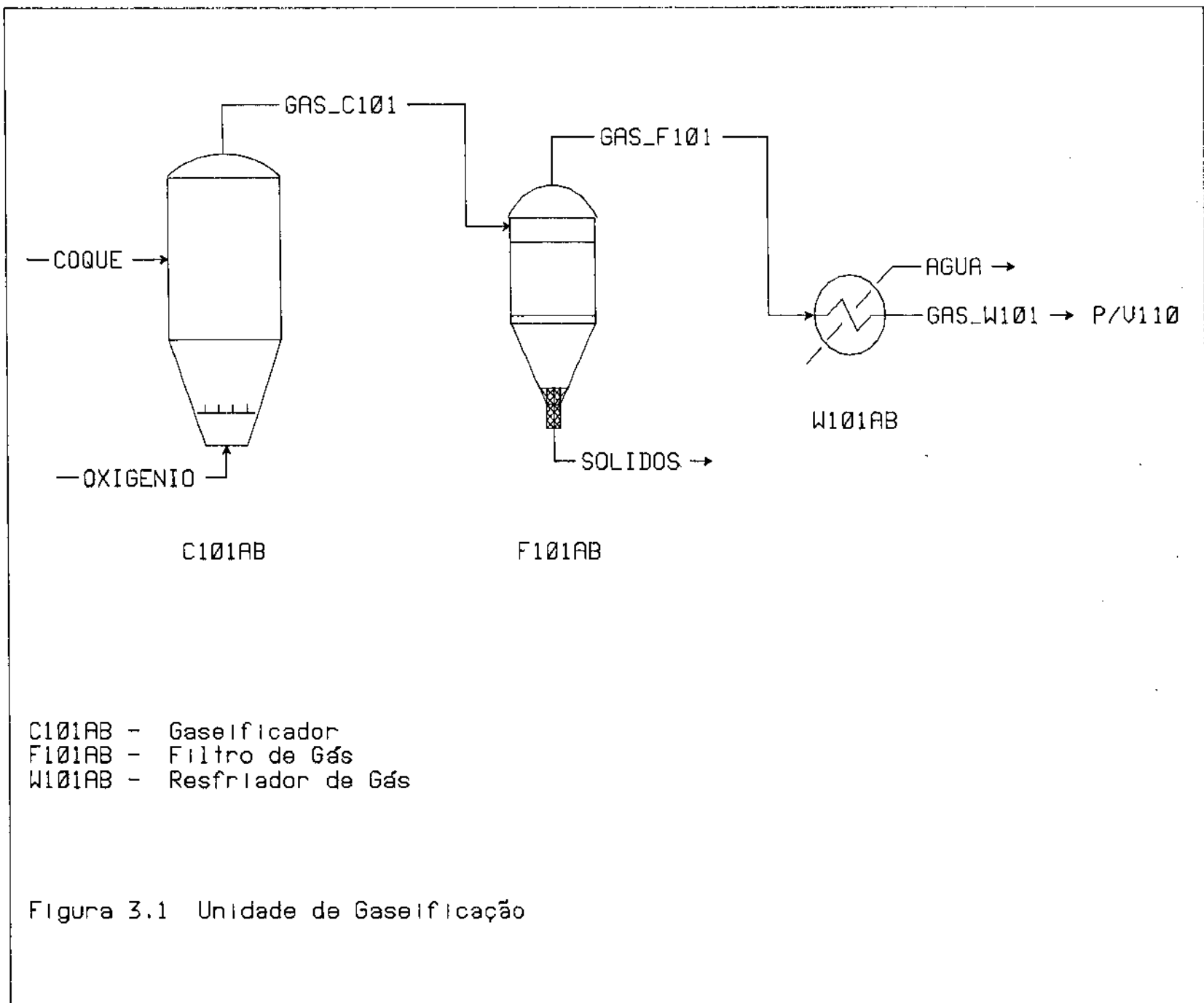
275 Nm³/h de CO \approx 344 Kg/h de CO.

A seção de gaseificação de CO possui dois gaseificadores, os quais podem operar isoladamente ou em paralelo, cada um com capacidade de gerar 200 Nm³/h. Portanto, conforme a necessidade, pode-se produzir de 200 a 400 Nm³/h de CO.

Na seção de gaseificação o processo se desenvolve conforme patente da firma C. OTTO GmbH (BASF, 1982), produzindo CO a partir do coque de petróleo e oxigênio. A reação se realiza à temperatura acima de 1000° C, tendo como sub-produto CO₂. Devido as impurezas presentes na matéria-prima, gases como N₂, H₂, H₂O, H₂S, COS, CS₂, O₂, HCN, NH₃, cinzas, etc., estão presentes no CO produzido nos gaseificadores. Alguns destes contaminantes devem ser removidos o máximo possível. Enquanto as cinzas são retidas através de filtros, contaminantes como H₂O, CO₂, H₂S, COS e CS₂, são removidos através de absorção física com metanol à baixa temperatura e alta pressão (Processo Rectisol).

O processo de purificação do CO consiste de quatro colunas: K110, K111, K112 e K113. A coluna K110 é composta de duas seções, onde na parte inferior os gases sofrem uma lavagem com água e na parte superior são desidratados com metanol. O metanol contaminado com água é enviado para a coluna K113 onde é purificado e retorna ao processo. O gás que sai da coluna K110 vai para a coluna K111 onde é feita a absorção dos gases ácidos (CO₂, H₂S, COS e CS₂). O metanol contaminado da coluna K111 vai para a coluna K112 onde é purificado e retorna ao processo. Desta forma o gás que sai da coluna K111 está pronto para ser utilizado na síntese do DMF.

A planta de CO é apresentada nas Figuras 3.1 a 3.4 e é descrita com maiores detalhes nos próximos itens. No Apêndice A é apresentada a definição da nomenclatura utilizada nas correntes das Figuras 3.1 a 3.4.



C101AB - Gasificador
F101AB - Filtro de Gás
W101AB - Resfriador de Gás

Figura 3.1 Unidade de Gasificação

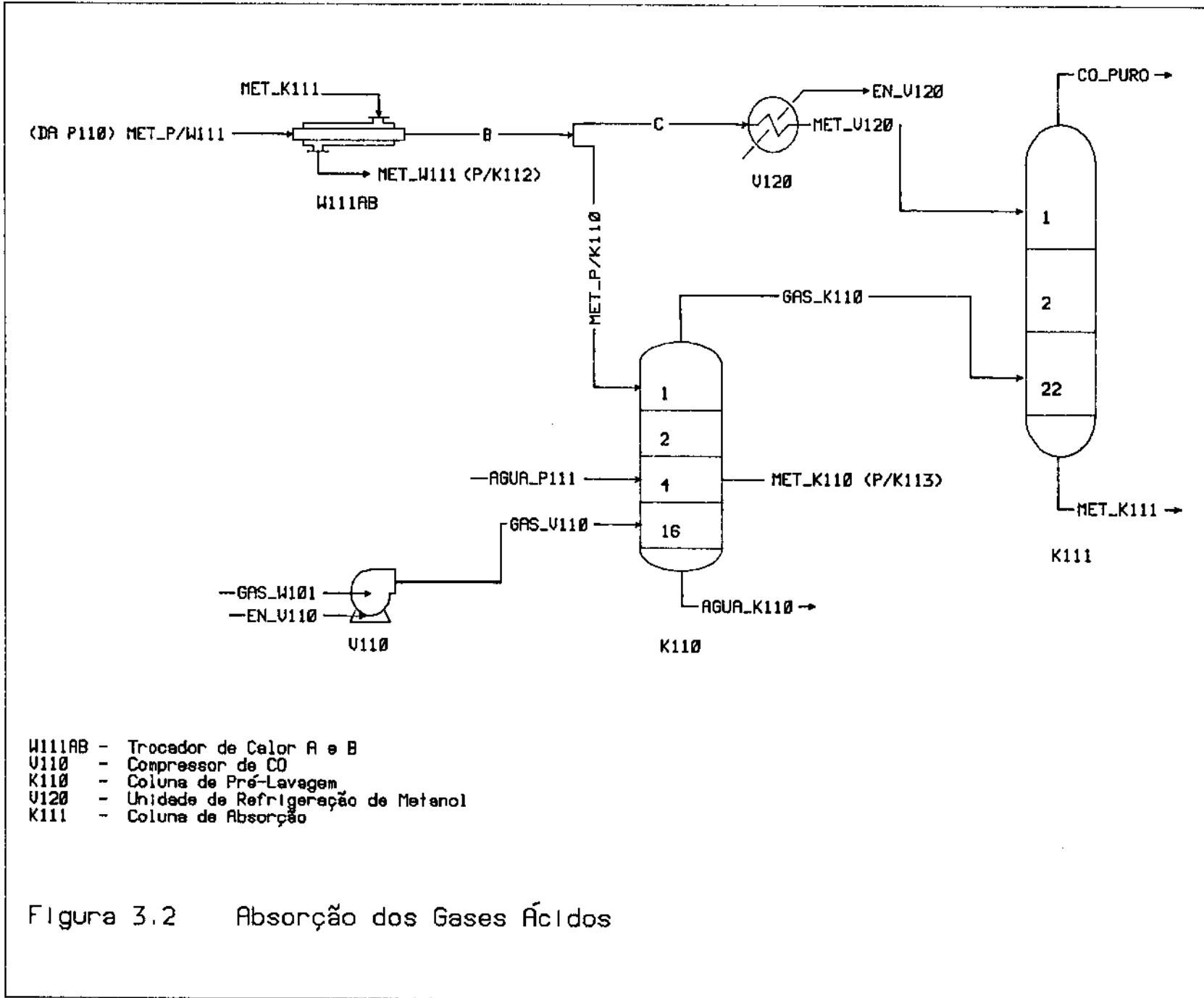


Figura 3.2 Absorção dos Gases Ácidos

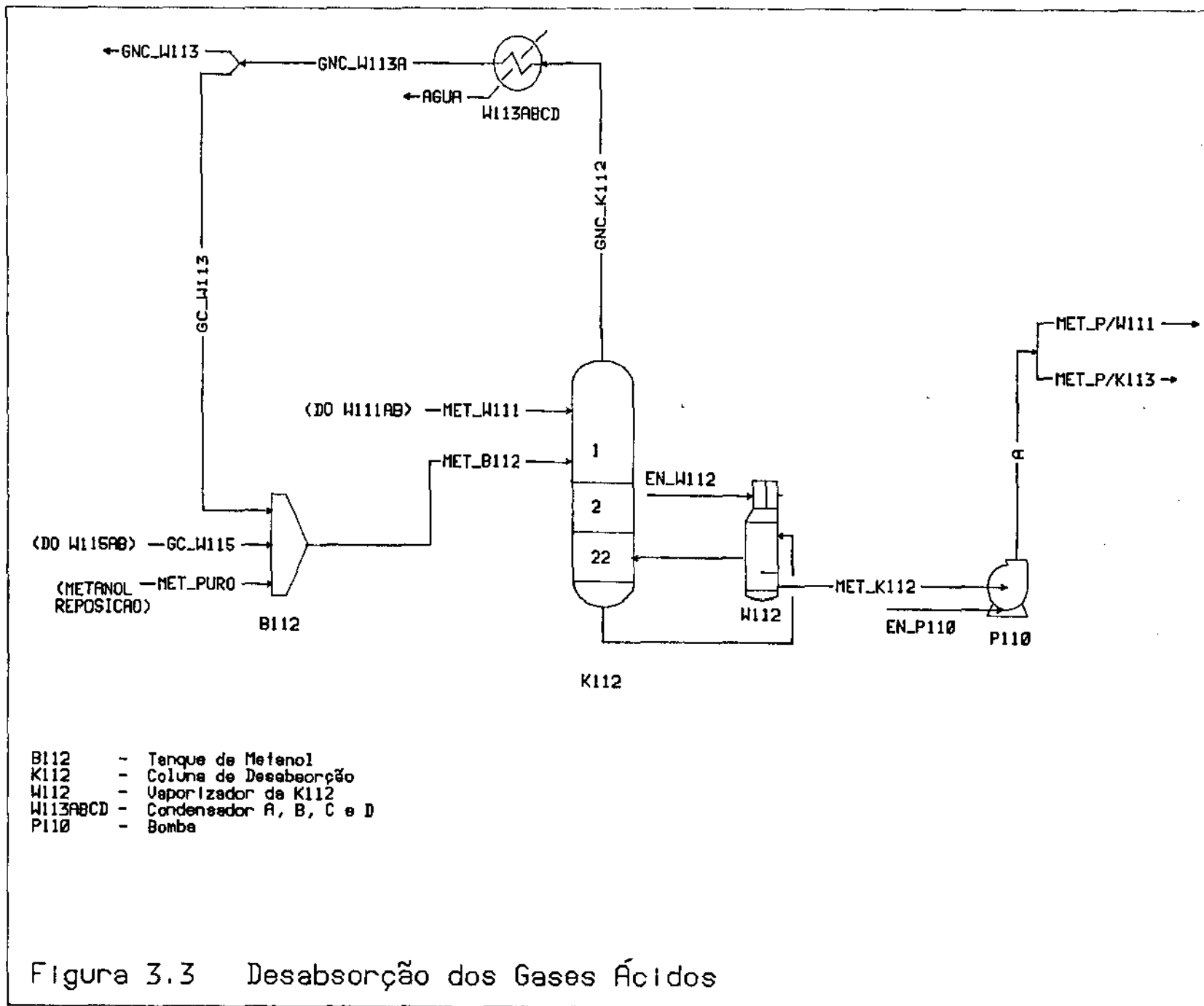


Figura 3.3 Desabsorção dos Gases Ácidos

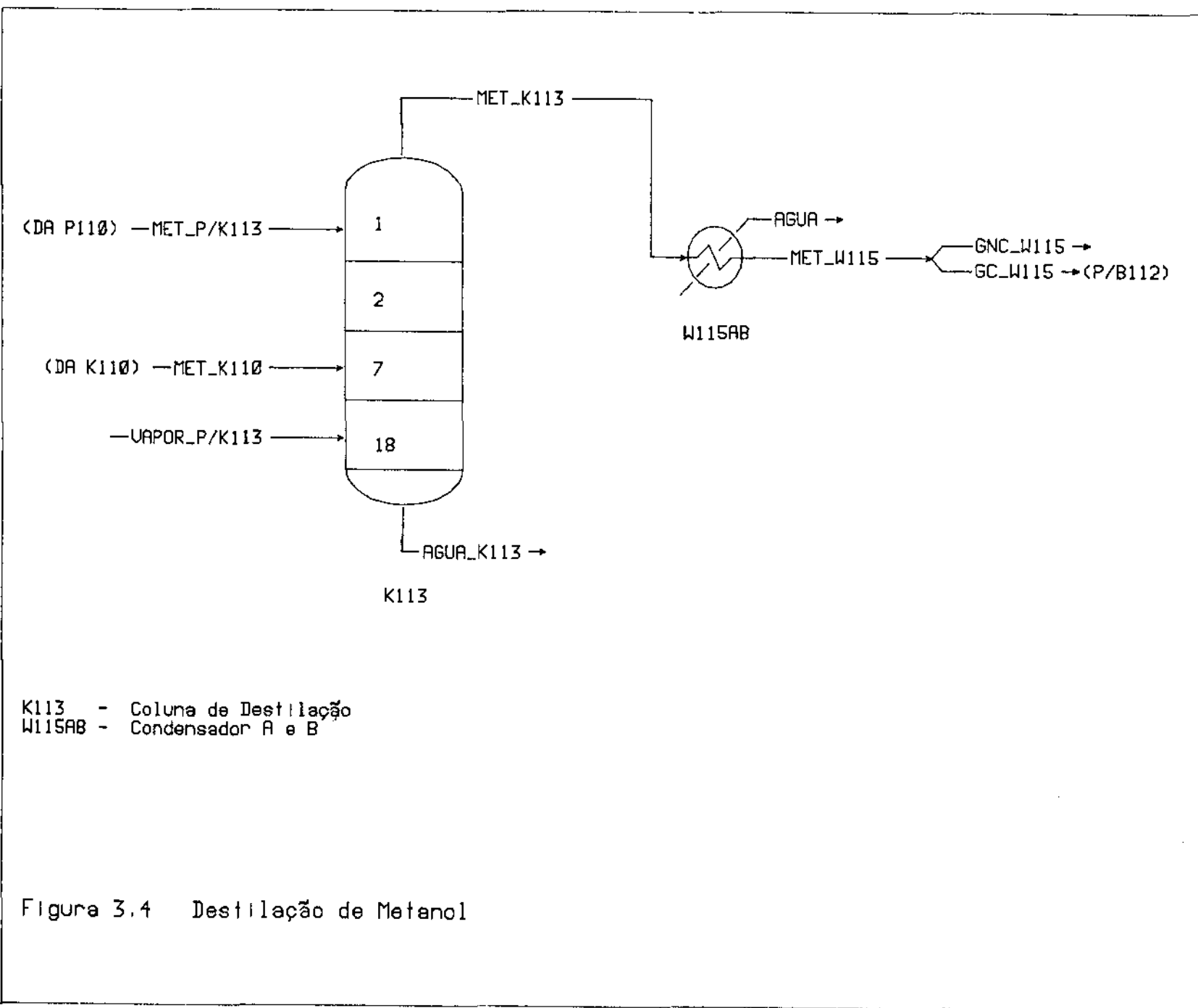


Figura 3.4 Destilação de Metanol

3.2 Especificação das Matérias-Primas e do CO produzido

Na produção e purificação do CO são utilizadas as seguintes matérias-primas: Coque de Petróleo, Oxigênio, Metanol e Nitrogênio. Como especificação é esperado:

a) Coque de Petróleo

C total	mín.	97 - 98 %
Cinzas	máx.	1 %
Metais	máx.	0,1 %
Componentes decompostos	máx.	1 % (1000° C)
Água	máx.	1 %
Enxofre total	máx.	1,5 %
Peso específico...		800 - 900 kg/m ³
Densidade aparente		2003 - 2005 kg/m ³
Granulação		10 - 30 mm

b) Oxigênio (Análise Volumétrica)

O ₂	mín.	99,5 %
Restante		inertes
Pressão		30 bar

c) Metanol

CH ₃ OH	mín.	99,86 %
Densidade d _{20/20}		793,2 kg/m ³
Cor	máx.	5 APHA
Água	máx.	0,15 %

d) Nitrogênio (Análise Volumétrica)

N ₂	mín.	99,9 %
O ₂	máx.	0,1 %
CO ₂	máx.	5 ppm
CO	máx.	5 ppm
Hidrocarbonetos	máx.	1 ppm
Pressão	mín.	30 bar

O Coque de Petróleo e o Oxigênio são utilizados no gaseificador para gerar CO, enquanto que o metanol é o solvente utilizado na purificação dos gases do gaseificador. O Nitrogênio é necessário para a purga no carregamento do coque no gaseificador, no sistema de limpeza dos filtros mangas, e também determinada quantidade é adicionada ao processo para atender as especificações do produto final.

O CO depois da purificação deve ter as seguintes especificações:

<u>Componente</u>		<u>Análise Volumétrica</u>
CO	mín.	96 - 98 %
H ₂	máx.	1 - 2 %
N ₂	máx.	1 - 2 %
O ₂	máx.	0,2 %
CO ₂	máx.	20 ppm
H ₂ S, COS, CS ₂	máx.	20 ppm
CH ₃ OH	máx.	0,2 %
H ₂ O	máx.	0,02 %

3.3 Unidade de Gaseificação

Esta unidade, como mostra a Figura 3.1, é composta por 2 gaseificadores (C101AB), 2 filtros manga (F101AB) e 2 trocadores de calor (W101AB). Devido ao gaseificador (C101) operar de forma descontínua, a unidade de gaseificação possui dois alinhamentos, isto é, enquanto um gaseificador está em operação, o outro fica na reserva ou pode ser operado paralelamente. Os gaseificadores não podem ser operados de forma contínua devido ao acúmulo de cinzas nas paredes internas do gaseificador, as quais provocam aumento de temperatura e pressão.

O tempo de operação de um gaseificador depende da qualidade do coque, bem como da maneira de operar o gaseificador. Alta concentração de cinzas no coque, e interrupções na operação (a qual provoca entupimento dos bicos ejetores de oxigênio), acarretam um curto período de operação. Pouca concentração de cinzas no coque, e operação sem interrupções acarretam um longo período de operação. Geralmente o tempo de operação varia de 5 a 14 dias. A limpeza do gaseificador demora no máximo 1 dia.

O gaseificador utilizado nesta planta é do tipo Leito Fixo. Este termo é usado para significar um leito de combustível suportado por uma grade, ou outro meio, e mantido a uma altura constante acima do suporte. Portanto, as extremidades acima e abaixo do leito estão fixas no espaço, mas no interior do leito, o coque move-se lentamente do topo para baixo através da zona de gaseificação, e o resíduo acumula-se no fundo. Na realidade, este é um leito movimentando-se com extremidades fixas, mas Leito Fixo é comumente empregado para descrever este tipo de sistema em tecnologia de gaseificação (Kirk e Othmer, 1957). A grande vantagem do leito fixo, é o longo tempo de residência do coque no gaseificador, o qual permite uma grande conversão do carbono.

O gaseificador C101AB opera sob pressão atmosférica e com uso de oxigênio para a reação. Devido a estas características e as especificações das matérias-primas, os gases do gaseificador tem as seguintes especificações garantidas pela firma C. OTTO GmbH (BASF, 1982):

<u>Componente</u>		<u>Análise Volumétrica</u>	
CO	ca.	97	%
CO ₂	ca.	0,40	%
H ₂	ca.	1,00	%
N ₂	ca.	1,00	%
Enxofre	ca.	0,40	%
O ₂	máx.	0,20	% * previsto pela BASF

Após o gaseificador, os gases passam pelo filtro manga (F101AB) onde as cinzas que foram arrastadas pelo gás são retidas.

Os gases que saem do gaseificador, bem como o próprio gaseificador, são continuamente refrigerados. No entanto, os gases que saem do filtro manga devem passar pelo trocador W101AB antes de serem enviados para o compressor V110.

3.4 Unidade de Purificação

Os gases que saem do trocador W101AB vão para o compressor V110 onde são pressurizados. Deste modo o CO contaminado está pronto para ser purificado. O processo de purificação utilizado na planta de CO é baseado na absorção física das impurezas (gases ácidos), com metanol sob baixa temperatura e alta pressão. Este processo é comercialmente conhecido como Rectisol, já mencionado anteriormente.

3.4.1 Absorção dos Gases Ácidos

Os gases que saem do compressor V110 (como mostrado na Figura 3.2), vão para a coluna K110, mais conhecida como coluna de pré-lavagem. Esta coluna possui duas seções: na seção inferior, os gases sofrem uma pré-lavagem com água para reter HCN e/ou NH_3 , os quais podem prejudicar a absorção principal na coluna K111. Os gases que saem desta seção carregam consigo uma outra impureza que é a água, a qual precisa ser removida. Desta forma a seção superior da coluna K110 se encarrega de remover a água da corrente gasosa através do uso de metanol. O metanol utilizado vem da coluna K112, passa pelos trocadores W111A e W111B, sendo que determinada quantidade é enviada a coluna K110. O metanol que sai da coluna K110 está contaminado com H_2O e é enviado para a destilação na coluna K113.

Os gases que saem da coluna K110 vão para a coluna K111, onde o metanol absorve os gases ácidos (CO_2 , H_2S , COS , CS_2) do CO. Desta maneira, o monóxido de carbono está purifi-

cado e pode ser utilizado na síntese do DMF. O metanol utilizado na purificação do CO vem da coluna K112, passa pelos trocadores W111A, W111B e pela unidade de resfriamento V120. O metanol contaminado com gases indesejáveis passa através dos trocadores W111A e W111B, e é enviado para a coluna K112.

3.4.2 Desabsorção dos Gases Ácidos

A remoção dos gases ácidos do metanol contaminado, os quais são enviados da coluna K111, como mostra a Figura 3.3, é realizado através do uso de calor e da redução de pressão na coluna K112. A coluna possui um vaporizador, o W112, o qual é operado de forma a manter a temperatura de saída do metanol no vaporizador a temperatura de ebulição. Os gases ácidos que são removidos pelo topo da coluna K112 contém além dos contaminantes e CO, metanol em estado gasoso. Este gás do topo da coluna K112 passa pelos trocadores W113A, W113B, W113C e W113D, onde o metanol é condensado e enviado para o vaso acumulador B112. Os gases não condensados no trocador são eliminados. No B112 são também acumulados o metanol da coluna de destilação K113 e o metanol de reposição. Portanto, o vaso B112 é o regulador de refluxo do metanol enviado para a coluna K112.

O metanol do fundo da coluna K112, já livre dos gases ácidos, é o responsável pela recirculação do metanol no processo. O metanol é recirculado através da bomba P110AB, sendo que uma parte vai para a coluna K113 e o restante para o sistema de absorção.

3.4.3 Destilação de Metanol

O metanol contaminado com H₂O deve ser recuperado através de destilação na coluna K113 (Figura 3.4), onde é alimentado no 7º prato. Para ajudar a destilação, um pouco de metanol da recirculação é enviado da coluna K112 e entra no topo da coluna.

A destilação é conseguida através da injeção de vapor no fundo da coluna, o qual deve manter a temperatura do fundo da coluna no mínimo em 100° C. O metanol destilado é condensado nos trocadores W115A e W115B, sendo enviado para o vaso acumulador B112. Os gases não condensados nos trocadores são eliminados.

3.4.4 Descrição dos Equipamentos

Apresentamos neste item a descrição dos principais equipamentos utilizados no processo de purificação:

1) K110

Coluna de pré-lavagem

0.35 x 8.38 m

12 e 4 pratos com borbulhador

Pressão de trabalho = depende da pressão do gás

Diferencial de pressão \approx 0 mbar

Pressão de projeto = 25 bar

Temperatura de projeto = 50 °C

2) K111

Coluna de absorção

0.5/0.3 x 15.25 m

anéis pall de 25 mm

altura de empacotamento = 10 m

cinco redistribuidores

Pressão de trabalho = depende da pressão do gás

Diferencial de pressão \approx 0 mbar

Pressão de projeto = 25 bar

Temperatura de projeto = -10/+50 °C

3) K112

Coluna de Desabsorção
0.5/0.35 x 16.25 m
anéis pall de 25 mm
altura de empacotamento = 10 m
cinco redistribuidores
vaporizador W112
Pressão de trabalho \approx atmosférica
Diferencial de pressão \approx 15 mbar
Pressão de projeto = 5 bar
Temperatura de projeto = 100 °C

4) K113

Coluna de destilação
0.3 x 8.1 m
18 pratos com borbulhador
Pressão de trabalho \approx atmosférica
Diferencial de pressão \approx 15 mbar
Pressão de projeto = 5 bar
Temperatura de projeto = 120 °C

5) W111

Permutador de calor tipo casco e tubo horizontal
TEMA tipo BFM
125 tubos internos de 14 x 2500 mm
8 passes no tubo
13,5 m² de superfície de troca térmica
Diâmetro do casco é de 324 mm
2 trajetos no casco (contracorrente)
32 chicanas
Lado interno dos tubos: Pressão projeto = 25 bar
Temp. projeto = -10 °C
Lado Externo dos tubos: Pressão projeto = 25 bar
Temp. projeto = 80 °C

6) W113

Condensador de calor tipo casco e tubo horizontal

TEMA tipo BFM

80 tubos internos de 14 x 2500 mm

1 passe no tubo

9 m² de superfície de troca térmica

Diâmetro do casco é de 219 mm

1 trajeto no casco (contracorrente)

15 chicanas

Lado interno dos tubos: Pressão projeto = 5 bar

Temp. projeto = 50 °C

Lado Externo dos tubos: Pressão projeto = 5 bar

Temp. projeto = 80 °C

7) W115

Condensador de calor tipo casco e tubo horizontal

TEMA tipo BFM

34 tubos internos de 14 x 2500 mm

1 passe no tubo

3,8 m² de superfície de troca térmica

Diâmetro do casco é de 168 mm

1 trajeto no casco (contracorrente)

22 chicanas

Lado interno dos tubos: Pressão projeto = 5 bar

Temp. projeto = 50 °C

Lado Externo dos tubos: Pressão projeto = 5 bar

Temp. projeto = 70 °C

Capítulo 4

SIMULAÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO

Apresentamos neste capítulo a descrição das etapas seguidas para montar a simulação da Planta de Monóxido de Carbono, e os testes realizados para comprovar a validade do simulador utilizado.

4.1 Estrutura da Simulação

O simulador utilizado neste trabalho foi o HYSIM, pertencente a Hyprotech Ltd. Este simulador é completamente interativo e é baseado na estrutura modular não seqüencial, o que permite ao usuário uma grande flexibilidade na alimentação das informações.

Um simulador comercial não é desenvolvido para um caso particular, mas sim para trabalhar de forma genérica, isto é, cada caso tem que ser analisado e corrigido no que for necessário.

Devido a complexidade da planta de CO, foi necessário dividir a planta em três partes:

- 1) Unidade de gaseificação
- 2) Absorção e desabsorção dos gases ácidos
- 3) Destilação

A absorção, desabsorção e destilação fazem parte do processo de purificação e estão interligadas. A necessidade da divisão da Planta de CO para a simulação, torna-se mais clara nos próximos itens.

4.2 Escolha do Pacote de Propriedades

No simulador, a escolha do pacote de propriedades é um dos itens mais importantes, pois permite a predição das propriedades termodinâmicas, físicas e de transporte.

Na simulação da Planta de CO foi necessário o uso de dois pacotes de propriedades. Para as unidades de gaseificação, absorção e desabsorção dos gases ácidos foi escolhido a equação de estado de Peng Robinson (PR). Esta escolha deve-se ao fato de que este pacote é indicado para aplicações em indústria petroquímica, óleo e gás. Além disso, componentes como H_2 , N_2 , CO_2 , H_2S , H_2O , CH_3OH receberam especial tratamento para serem utilizados pelo pacote de propriedades PR (Hyprotech, 1987). É bom salientar no entanto, que para sistemas metanol/água, onde a proporção dos dois componentes é significativa, o pacote de propriedade PR não pode ser aplicado. Esta conclusão foi obtida diante de problemas ocorridos na coluna de destilação K113, onde a proporção de metanol e água é significativa. Portanto, tivemos que optar por outro pacote de propriedades para a destilação, sendo escolhido ao invés de uma equação de estado um pacote de propriedades que usa um modelo de atividade. O pacote de propriedades escolhido foi o de Wilson. Para a escolha deste modelo de atividade foi realizado um estudo, o qual é apresentado posteriormente.

4.2.1 Peng Robinson

A escolha deste pacote de propriedades para ser usado nas unidades de gaseificação, absorção e desabsorção de gases ácidos, já foi justificada anteriormente. A equação de estado PR, é aplicada a sistemas simples, duas ou três fases com grande grau de eficiência e confiabilidade. Esta equação é aplicada sobre uma faixa de condições amplas, como a mostrada abaixo (Hyprotech, 1991):

	Temperatura, °C	Pressão, psia
PR	> -271 °C	< 15.000

A equação de estado PR tem a seguinte forma:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V(V+b) + b(V-b)} \quad (4.1)$$

$$Z^3 - (1-B)Z^2 + (A-2B-3B^2)Z - (AB-B^2-B^3) = 0, \quad (4.2)$$

onde:

$$b = \sum_{i=1}^N x_i b_i ;$$

$$b_i = 0.077796 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}} ;$$

$$a = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij}) ;$$

$$a_i = a_{ci} \alpha_i ;$$

$$a_{ci} = 0.457235 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}} ;$$

$$\alpha_i^{0.5} = 1 + m_i (1 - T_{ri}^{0.5}) ;$$

$$m_1 = 0.37646 + 1.54226\omega_1 - 0.26992\omega_1^2 ;$$

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} ;$$

$$B = \frac{bP}{RT} .$$

A entalpia e entropia são calculadas rigorosamente pelo simulador, o qual utiliza as seguintes relações termodinâmicas:

$$\frac{H-H^{ID}}{RT} = Z-1 + \frac{1}{RT} \int_{\infty}^V \left[T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad (4.3)$$

$$\frac{S-S_0^{ID}}{R} = \ln Z - \ln \frac{P}{P^0} + \int_{\infty}^V \left[\frac{1}{R} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - \frac{1}{V} \right] dV . \quad (4.4)$$

Para a equação de estado PR, temos:

$$\frac{H-H^{ID}}{RT} = Z-1 - \frac{1}{2^{1.5} b R T} \left[a - T \frac{da}{dT} \right] \ln \left(\frac{V + (2^{0.5} + 1)b}{V + (2^{0.5} - 1)b} \right) \quad (4.5)$$

$$\frac{S-S_0^{ID}}{R} = \ln(Z-B) - \ln \frac{P}{P^0} + \frac{A}{2^{1.5} B} \left(\frac{T}{a} \frac{da}{dT} \right) \ln \left[\frac{Z + (2^{0.5} + 1)B}{Z - (2^{0.5} - 1)B} \right] , \quad (4.6)$$

onde: ID = gás ideal
 ° = estado de referência
 R = constante do gás ideal
 H = Entalpia
 S = Entropia

4.2.2 Wilson

Embora modelos de equações de estado têm provado serem confiáveis na predição de propriedades de muitos sistemas líquidos de hidrocarbonetos, sob uma faixa ampla de condições de operação, suas aplicações tem sido limitadas a componentes não-polares ou levemente polares. Sistemas químicos não ideais ou polares têm sido manejados tradicionalmente, usando-se modelos duplos. Isto é, uma equação de estado é usada para a predição dos coeficientes de fugacidade da fase vapor (normalmente assume-se gás ideal ou a equação de estado de Redlich Kwong, apesar da equação de estado da Virial ser usada em casos específicos), enquanto que o modelo de coeficiente de atividade é usado para a fase líquida.

A separação das fases ou razão de equilíbrio K_1 para o componente i , definido em termos do coeficiente de fugacidade da fase vapor e coeficiente de atividade da fase líquida é calculado da seguinte expressão:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (4.7)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i f_i^0}{P \phi_i} \quad (4.8)$$

onde:

- γ_i = coeficiente de atividade do componente i
- f_i^0 = fugacidade do estado padrão do componente i
- P = pressão do sistema
- ϕ_i = coeficiente de fugacidade do componente i

Embora para soluções ideais o coeficiente de atividade é unitário, para a maioria dos sistemas químicos (não-ideal), esta aproximação é incorreta. Os modelos de atividade foram desenvolvidos para prever o coeficiente de atividade dos componentes na fase líquida. As correlações deduzidas foram baseadas na função energia livre de Gibbs excesso, a qual é definida como a diferença entre o valor real da energia livre de Gibbs e o valor da energia livre de Gibbs caso a mistura fosse ideal, nas mesmas condições de temperatura e pressão.

Para uma mistura multi-componente consistindo de n_i moles do componente i , a energia livre de Gibbs excesso é representada pela seguinte expressão:

$$G^E = RT \sum (n_i \ln \gamma_i) . \quad (4.9)$$

As equações de modelo de atividade existentes no simulador são: Margules, Van Laar, Wilson, NRTL e Uniquac. Todos esses modelos envolvem o conceito de parâmetro de iteração binário, os quais devem ser ajustados com dados experimentais ou calculados. Estes parâmetros tem sido regredidos baseado nos dados de equilíbrio líquido-vapor do DECHEMA (Gmehling e Onken, 1977), usando modelo de gás ideal para a fase vapor.

Afim de selecionarmos o melhor modelo de atividade, usamos dados de equilíbrio líquido-vapor do DECHEMA para testar os vários modelos. Foram escolhidos três conjuntos de dados experimentais do DECHEMA, os quais foram comparados com os resultados obtidos no simulador. Os resultados são apresentados nas Tabelas 4.1 a 4.3.

Como podemos observar nas Tabelas 4.1 a 4.3, a equação de Wilson é a que apresenta os menores desvios em todos os três conjunto de dados, portanto, justifica-se a sua escolha

Tabela 4.1 Comparação dos vários modelos de atividade com os dados experimentais obtidos por Green e Venner (DECHEMA, 1977)

EXPERIMENTAL		MARGULES-IDEAL		VAN LAAR-IDEAL		WILSON-IDEAL		NRTL-IDEAL		UNIQUAC-IDEAL	
X	Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y
0,05	0,2780	-0,0025	-0,0022	-0,0024	-0,0021	-0,0024	-0,0018	-0,0024	-0,0019	-0,0024	-0,0021
0,10	0,4250	-0,0005	0,0003	-0,0006	0,0004	-0,0009	0,0010	-0,0001	0,0011	-0,0008	0,0005
0,20	0,6020	0,0058	0,0187	0,0050	0,0186	0,0032	0,0196	0,0060	0,0201	0,0042	0,0187
0,30	0,6920	0,0160	0,0216	0,0148	0,0216	0,0111	0,0226	0,0150	0,0235	0,0134	0,0216
0,40	0,7520	0,0292	0,0238	0,0279	0,0235	0,0233	0,0243	0,0269	0,0254	0,0263	0,0234
0,50	0,7980	0,0357	0,0213	0,0349	0,0209	0,0302	0,0216	0,0327	0,0226	0,0335	0,0208
0,60	0,8380	0,0335	0,0163	0,0334	0,0160	0,0298	0,0165	0,0304	0,0173	0,0326	0,0159
0,70	0,8780	0,0287	0,0140	0,0292	0,0138	0,0272	0,0142	0,0265	0,0145	0,0290	0,0137
0,80	0,9150	0,0210	0,0081	0,0216	0,0081	0,0211	0,0085	0,0198	0,0083	0,0218	0,0082
0,90	0,9600	0,0048	0,0064	0,0072	0,0065	0,0074	0,0069	0,0065	0,0064	0,0074	0,0067
DESVIO MÉDIO		0,0180	0,0133	0,0177	0,0131	0,0157	0,0137	0,0166	0,0141	0,0171	0,0132
MAX. DESVIO		0,0357	0,0238	0,0349	0,0235	0,0302	0,0243	0,0327	0,0254	0,0335	0,0234

Dif. X: $X = X_{EXP} - X_{SIMULADO}$

Dif. Y: $Y = Y_{EXP} - Y_{SIMULADO}$

Tabela 4.2 Comparação dos vários modelos de atividade com os dados experimentais obtidos por Hughes e Maloney (DECHEMA, 1977)

EXPERIMENTAL		MARGULES-IDEAL		VAN LAAR-IDEAL		WILSON-IDEAL		NRTL-IDEAL		UNIQUAC-IDEAL	
X	Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y
0,0321	0,1900	0,0025	0,0095	0,0026	0,0095	0,0026	0,0097	0,0025	0,0095	0,0026	0,0096
0,0372	0,2220	-0,0021	-0,0043	-0,0021	-0,0042	-0,0020	-0,0040	-0,0021	-0,0041	-0,0021	-0,0041
0,0523	0,2940	0,0007	0,0171	0,0007	0,0172	0,0008	0,0175	0,0008	0,0173	0,0007	0,0172
0,0595	0,3080	-0,0010	-0,0014	-0,0010	-0,0014	-0,0010	-0,0009	-0,0008	-0,0011	-0,0010	-0,0013
0,0750	0,3520	-0,0010	-0,0075	-0,0010	-0,0075	-0,0011	-0,0069	-0,0008	-0,0070	-0,0011	-0,0074
0,0876	0,3900	-0,0081	-0,0231	-0,0083	-0,0231	-0,0085	-0,0224	-0,0078	-0,0224	-0,0084	-0,0230
0,1540	0,4900	0,0107	-0,0066	0,0183	-0,0066	0,0175	-0,0058	0,0191	-0,0055	0,0175	-0,0065
0,1580	0,5160	0,0039	-0,0121	0,0034	-0,0121	0,0023	-0,0112	0,0043	-0,0109	0,0029	-0,0120
0,1820	0,5520	0,0106	-0,0016	0,0100	-0,0016	0,0086	-0,0007	0,0110	-0,0003	0,0094	-0,0015
0,2250	0,5930	0,0387	0,0195	0,0380	0,0194	0,0363	0,0204	0,0390	0,0209	0,0372	0,0195
0,2900	0,6430	0,0254	-0,0112	0,0245	-0,0114	0,0212	-0,0104	0,0250	-0,0096	0,0232	-0,0114
0,3490	0,7030	0,0245	0,0036	0,0232	0,0033	0,0189	0,0042	0,0229	0,0053	0,0217	0,0033
0,8130	0,9180	0,0142	0,0032	0,0149	0,0032	0,0145	0,0036	0,0133	0,0034	0,0151	0,0033
0,9180	0,9630	-0,0029	-0,0024	-0,0026	-0,0022	-0,0024	-0,0019	-0,0031	-0,0024	-0,0024	-0,0021
DESVIO MEDIO		0,0110	0,0088	0,0108	0,0088	0,0098	0,0085	0,0109	0,0085	0,0104	0,0087
MAX. DESVIO		0,0387	0,0231	0,0380	0,0231	0,0363	0,0224	0,0390	0,0224	0,0372	0,0230

Tabela 4.3 Comparação dos vários modelos de atividade com os dados experimentais obtidos por Kohutova, Suska, Novak e Pick (DECHEMA, 1977)

EXPERIMENTAL		MARGULES-IDEAL		VAN LAAR-IDEAL		WILSON-IDEAL		NRTL-IDEAL		UNIQUAC-IDEAL	
X	Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y	Dif. X	Dif. Y
0,0280	0,1710	-0,0009	-0,0059	-0,0008	-0,0059	-0,0008	-0,0057	-0,0009	-0,0059	-0,0008	-0,0058
0,0420	0,2300	0,0011	-0,0031	0,0012	-0,0031	0,0012	-0,0028	0,0012	-0,0030	0,0012	-0,0030
0,0650	0,3790	-0,0206	-0,0077	-0,0206	-0,0076	-0,0208	-0,0070	-0,0202	-0,0071	-0,0208	-0,0075
0,1400	0,4960	0,0032	-0,0033	0,0028	-0,0033	0,0020	-0,0024	0,0036	-0,0022	0,0024	-0,0032
0,1730	0,5500	0,0087	0,0066	0,0082	0,0065	0,0069	0,0074	0,0091	0,0078	0,0076	0,0066
0,2385	0,6260	0,0164	0,0114	0,0155	0,0113	0,0130	0,0123	0,0163	0,0130	0,0145	0,0113
0,3005	0,6700	0,0293	0,0101	0,0281	0,0099	0,0247	0,0108	0,0285	0,0117	0,0268	0,0099
0,3485	0,6970	0,0370	0,0066	0,0358	0,0063	0,0317	0,0072	0,0357	0,0082	0,0343	0,0063
0,4515	0,7630	0,0278	0,0062	0,0268	0,0058	0,0220	0,0065	0,0250	0,0076	0,0253	0,0057
0,5215	0,7860	0,0572	0,0093	0,0564	0,0089	0,0517	0,0096	0,0542	0,0106	0,0550	0,0088
0,6020	0,8175	0,0783	0,0140	0,0779	0,0136	0,0738	0,0142	0,0751	0,0151	0,0768	0,0135
0,6910	0,8665	0,0677	0,0216	0,0679	0,0213	0,0652	0,0218	0,0650	0,0223	0,0674	0,0212
0,7930	0,9090	0,0719	0,0252	0,0725	0,0251	0,0713	0,0255	0,0702	0,0256	0,0725	0,0251
0,8470	0,9340	0,0548	0,0219	0,0555	0,0219	0,0551	0,0223	0,0538	0,0220	0,0557	0,0220
0,8910	0,9540	0,0387	0,0174	0,0393	0,0175	0,0393	0,0179	0,0382	0,0175	0,0395	0,0176
DESVIO MEDIO		0,0342	0,0113	0,0339	0,0112	0,0320	0,0116	0,0331	0,0120	0,0334	0,0112
MAX. DESVIO		0,0783	0,0252	0,0779	0,0251	0,0738	0,0255	0,0751	0,0256	0,0768	0,0251

como o modelo de atividade a ser utilizado na simulação da coluna de destilação.

As Figuras 4.1 a 4.3 representam o diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador utilizando a equação de Wilson, e os dados experimentais do DECHEMA. Podemos observar que os resultados obtidos pelo simulador se ajustam bem aos pontos experimentais para os três conjuntos de dados, o que nos demonstra a eficiência do modelo de atividade de Wilson para este tipo de sistema.

A equação de Wilson não pode ser usada em sistemas que envolve equilíbrio líquido-líquido. O modelo de atividade Wilson tem a seguinte forma:

$$\ln \gamma_i = 1.0 - \ln \sum_{j=1}^{j=N} x_j A_{ij} - \sum_{k=1}^{k=N} \left[\frac{x_k A_{ki}}{\sum_{j=1}^{j=N} x_j A_{kj}} \right], \quad (4.10)$$

onde:

γ_i = coeficiente de atividade do componente i ;

$$A_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp \left[- \frac{a_{ij} + b_{ij} T}{RT} \right];$$

x_i = fração molar do componente i na fase líquida ;

T = temperatura (K) ;

N = número total de componentes ;

a_{ij} = parâmetro de energia independente da temperatura entre os componentes i e j (cal/gmol-K) ;

b_{ij} = parâmetro de energia dependente da temperatura entre os componentes i e j (cal/gmol-K) ;

V_i = volume do componente i (litros/gmol)

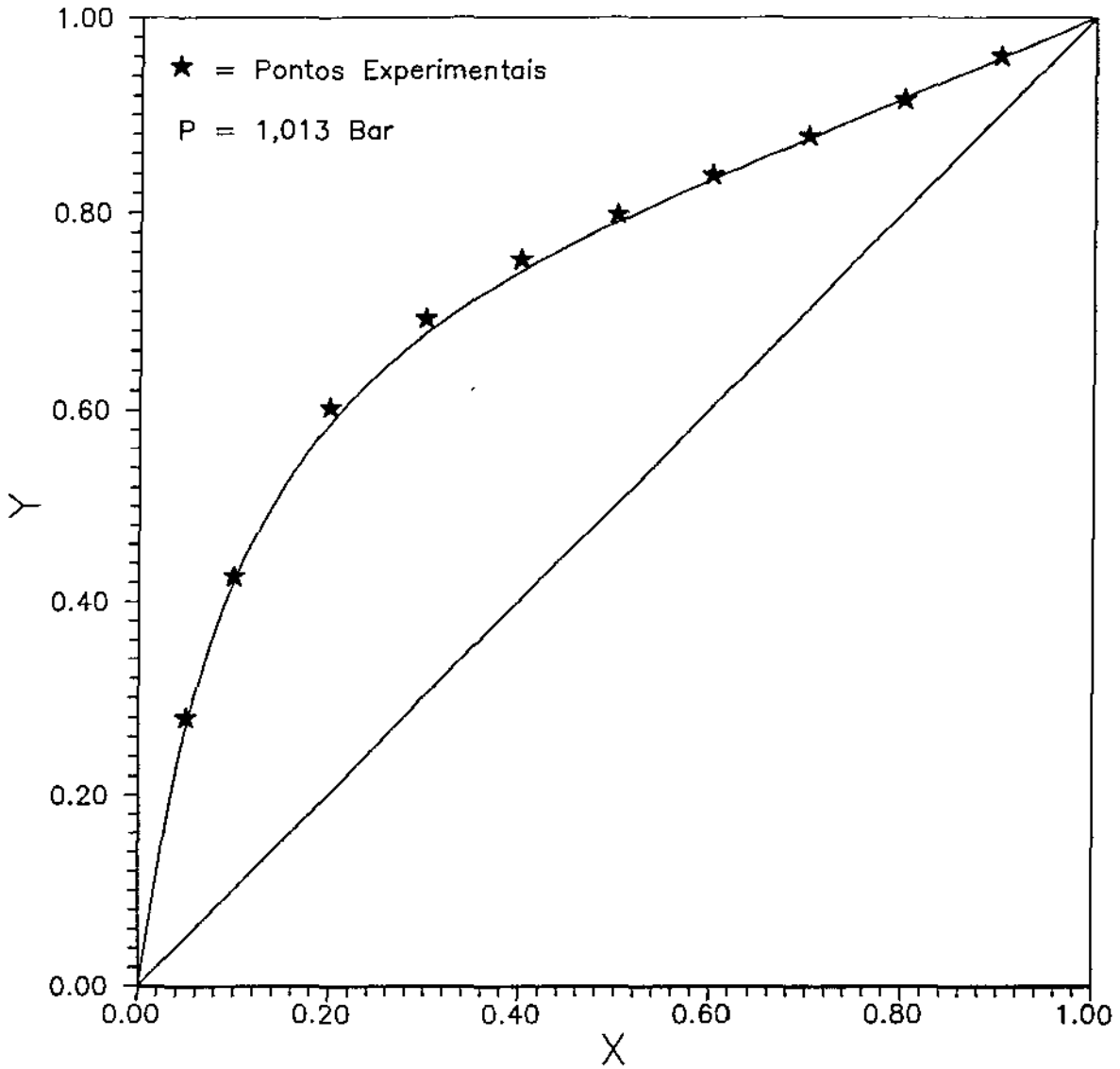


Figura 4.1 Diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador, versus dados experimentais obtidos por Green e Venner (DECHEMA, 1977).

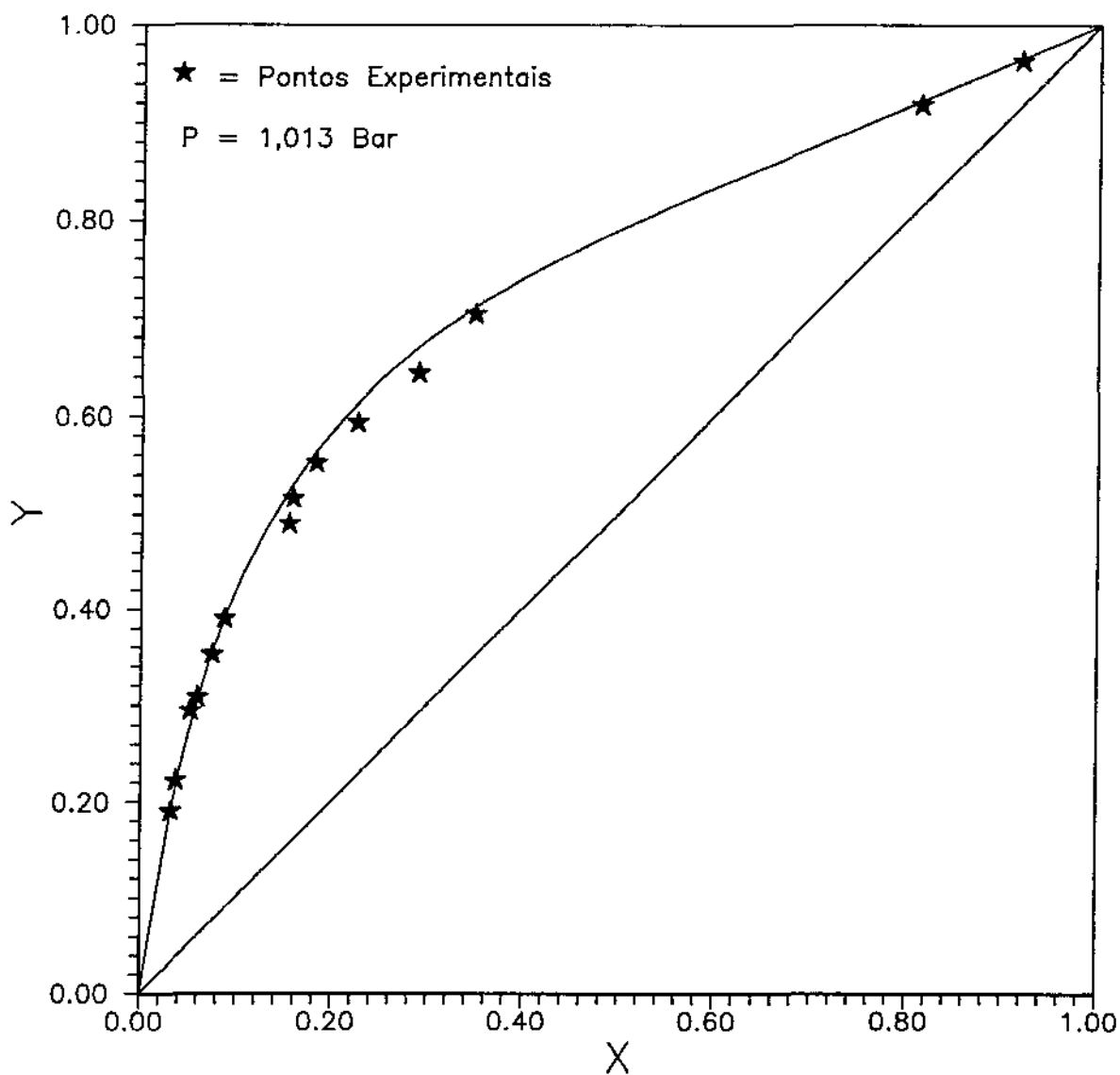


Figura 4.2 Diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador, versus dados experimentais obtidos por Huges e Maloney (DECHEMA, 1977)

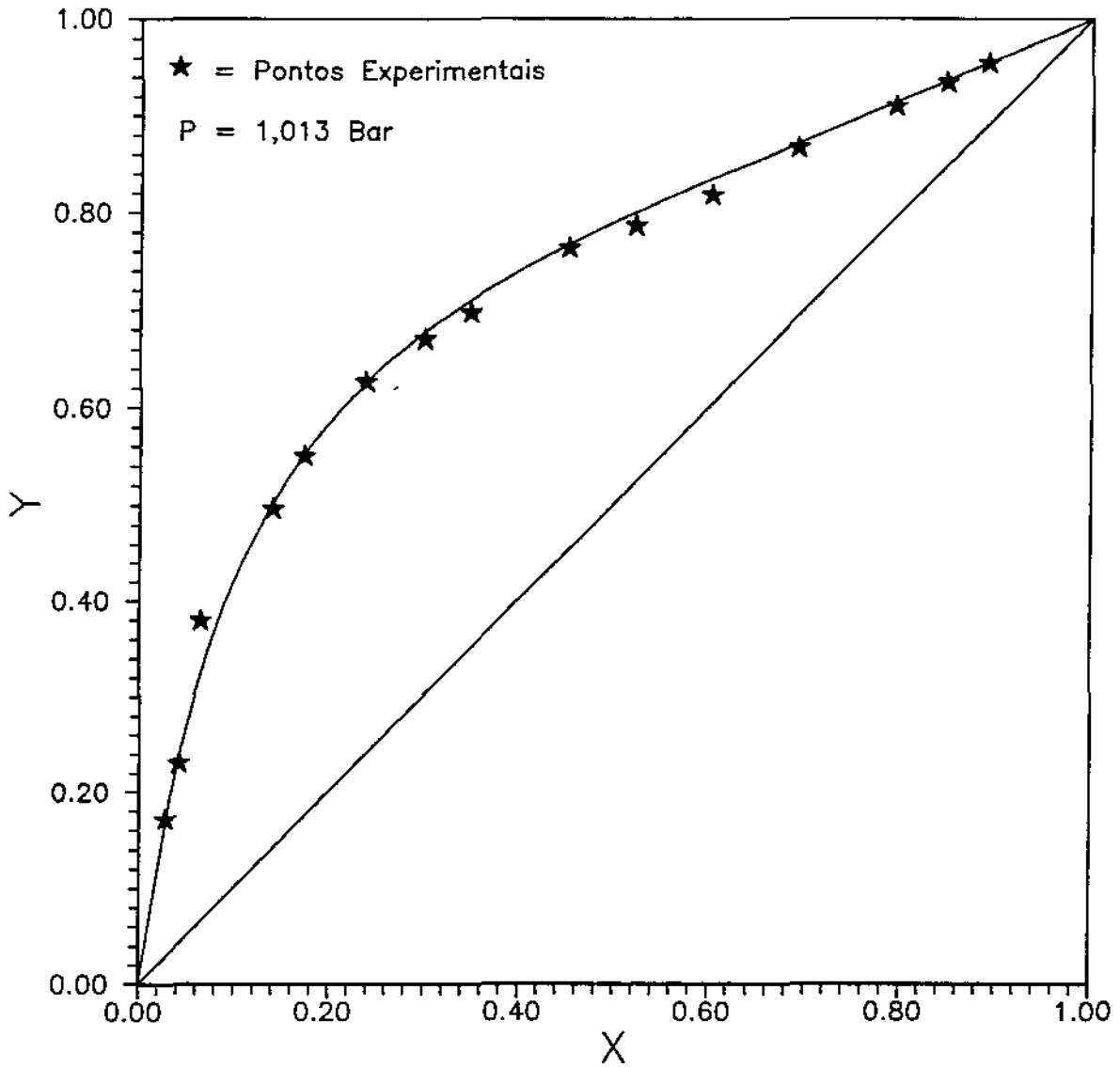


Figura 4.3 Diagrama de equilíbrio do sistema metanol/água obtido no simulador, versus dados experimentais obtidos por Kohdutova, Suska, Novak e Pick (DECHEMA, 1977)

Os cálculos da entalpia e entropia do líquido para o modelo de atividade é baseado na correlação de CAVETT:

para $T_{ri} < 1$:

$$\frac{H^L - H^{ID}}{T_{ci}} = \max \left(\frac{\Delta H_i^{oL}(sb)}{T_{ci}}, \frac{\Delta H_i^{oL}(sp)}{T_{ci}} \right), \quad (4.11)$$

para $T_{ri} \geq 1$:

$$\frac{H^L - H^{ID}}{T_{ci}} = \frac{\Delta H_i^{oL}(sp)}{T_{ci}}, \quad (4.12)$$

onde:

$$\frac{\Delta H_i^{oL}(sb)}{T_{ci}} = a_1 + a_2 (1 - T_{ri})^{1.5} a_3 (T_{ri}^{0.1});$$

$$\frac{\Delta H_i^{oL}(sp)}{T_{ci}} = \max(0, b_1 + b_2 T_{ri}^2 + b_3 T_{ri}^3 + b_4 T_{ri}^4 + b_5 P_{ri} T_{ri}^2).$$

A entalpia e entropia do gás dependem do modelo escolhido para representar o comportamento da fase vapor. Para Gás ideal:

$$H = H^{ID}, \quad (4.13)$$

$$S = S_o^{ID} = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C_{vd} T}{T} + R \ln \frac{V_2}{V_1}. \quad (4.14)$$

4.3 Unidade de Gaseificação

Com o pacote de propriedades já definido, podemos começar a montar a simulação. Esta unidade é composta pelo gaseificador, filtro e trocador de calor. Na realidade, devido a complexidade do modelo do gaseificador, não foi possível simular o gaseificador (C101) de uma maneira rigorosa. Os efeitos de transferência de calor, reações da combustão, tipo, forma e condições de operação do gaseificador são peculiares e tornam difícil a simulação do gaseificador através do simulador. Como o objetivo do trabalho é fazer o estudo paramétrico do processo de purificação do CO, optamos por simular o gaseificador de uma forma simples, a qual nos fornece os produtos do gaseificador levando em consideração as especificações garantidas pela C. Otto GmbH (BASF, 1982). A simulação do gaseificador é descrita no próximo item.

É bom salientarmos que devido ao tipo de simulação do gaseificador, a simulação do filtro e trocador não foi necessária, já que para o estudo paramétrico do processo de purificação o que interessa é a composição dos gases que saem do gaseificador, não levando em consideração o balanço energético e o arraste de cinzas pelo gás.

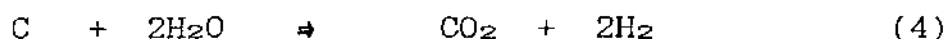
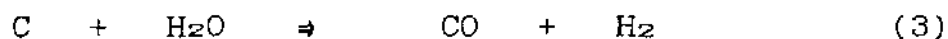
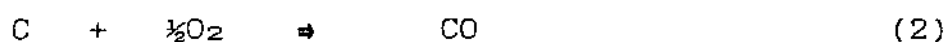
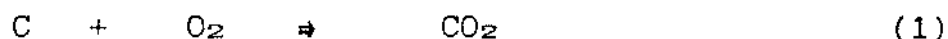
4.3.1 Gaseificador

O simulador possui reatores do tipo estequiométrico, equilíbrio, Gibbs, CSTR e PFR, os quais no entanto, não são totalmente aplicáveis ao caso em estudo. A solução foi usar uma combinação destes tipos de reatores. Os reatores utilizados foram o de Gibbs e o estequiométrico. Com o reator de Gibbs foi reproduzido a produção dos gases CO, CO₂, H₂ e O₂. Os gases derivados do enxofre (H₂S, COS e CS₂) são reproduzidos através de um reator estequiométrico.

A seguir é descrito as reações que envolvem a gaseificação, bem como a estrutura dos dois reatores utilizados.

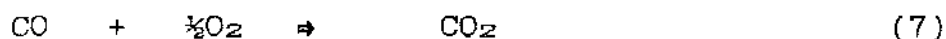
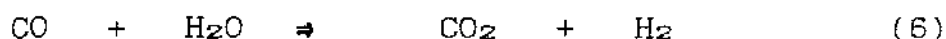
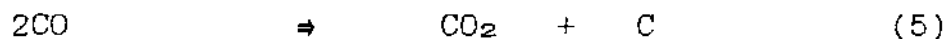
4.3.1.1 Reações da Gaseificação

As reações básicas envolvidas são (Ilsley, Littlewood e Thring, 1962):

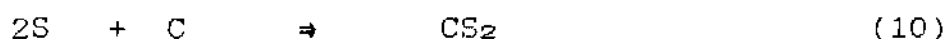
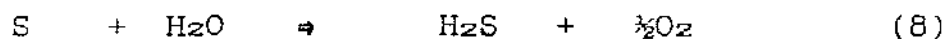


As reações 1 e 2 são as principais oxidações e reações de produção dos gases, e são fortemente exotérmicas. 3 e 4 são as duas reações endotérmicas, sendo que a reação 3 é predominante a temperaturas acima de 1000° C, enquanto que a temperaturas entre 500 e 600° C a reação 4 predomina. Nas temperaturas intermediárias, as proporções formadas de CO e CO₂ variam.

Em adição as reações heterogêneas discutidas acima, há também as três seguintes reações homogêneas:



O mecanismo de formação dos gases do enxofre (H₂S, COS e CS₂) tem sido estudado, mas até o momento as reações que ocorrem durante a gaseificação com o enxofre não são totalmente conhecidas (Kelly, 1981). Para podermos utilizar o reator estequiométrico do simulador, consideramos que ocorrem as seguintes reações com o enxofre:



Devido as impurezas do combustível a ser gaseificado, outras reações podem ocorrer durante a gaseificação. As reações acima apresentadas, no entanto, são as mais significativas e necessárias para a simulação.

4.3.1.2 Reatores de Gibbs e Estequiométrico

No reator de Gibbs assume-se que a corrente de saída está em equilíbrio físico e químico. Neste tipo de reator, não é necessário o conhecimento da estequiometria da reação. A composição da mistura resultante é calculada baseada na condição de que a energia livre de Gibbs do sistema reagente, no equilíbrio, tem o seu valor mínimo.

O reator estequiométrico é um reator de conversão. A conversão dos componentes tem que ser fornecida para cada reação.

Através das especificações da matéria-prima¹, do uso dos reatores de Gibbs e Estequiométrico e das especificações garantidas pela firma C. Otto GmbH para os gases do gaseificador², a simulação tornou-se possível.

É bom salientarmos que a simulação do gaseificador levou em conta somente o balanço de massa, sem se preocupar com o balanço energético. Devido a complexidade do gaseificador, o balanço energético não foi considerado, já que o interesse está somente na composição dos gases efluentes do gaseificador.

Desta forma a composição dos gases que irão para o compressor V110 já estão simulados.

4.4 Absorção dos Gases Ácidos e Recuperação do Solvente

A simulação da absorção dos gases ácidos e recuperação do solvente é apresentada nos próximos itens.

4.4.1 Compressor e Bombas

Estes equipamentos são de fácil simulação, já que possuímos todos os dados necessários. O compressor V110 é considerado

¹Vide item 3.2 - Especificação das matérias-primas e do CO produzido

²Vide item 3.3 - Unidade de Gaseificação

como uma operação adiabática e a eficiência é assumida como 75%. As bombas P111 e P113 são também calculadas com uma eficiência de 75%. Como a pressão de entrada e saída destes equipamentos é conhecida, a temperatura da corrente e potência do equipamento é calculada automaticamente. Somente para a bomba P110 a eficiência é calculada, já que possuímos além da pressão a temperatura de entrada e saída deste equipamento. Com uma eficiência de 45% para a bomba P110, conseguimos reproduzir os dados da planta.

4.4.2 Unidade de resfriamento (V120)

É a unidade utilizada para resfriar o metanol (V120), a qual no simulador é descrita através do uso de um trocador de calor (de um lado somente). A corrente de entrada é resfriada ou aquecida para as condições de saída requeridas. Para este equipamento fornecemos a temperatura e pressão de saída que queremos para o metanol, a qual é correspondente aos valores encontrados na planta. O simulador calcula qual o fluxo energético necessário para conseguir as condições de saída.

4.4.3 Vaso Acumulador (B112)

Esta operação é representada no simulador por um simples misturador. A operação do misturador combina duas ou mais correntes de entrada para produzir uma única corrente de saída. Um completo balanço de energia e massa é produzido nesta operação. Neste caso as propriedades das correntes de entrada para esta operação são conhecidas (temperatura, pressão e composição), e portanto, as propriedades da corrente de saída são calculadas automaticamente pelo simulador.

4.4.4 Trocadores de Calor

O simulador possui diversos procedimentos para cálculo de trocador de calor. A condensação e vaporização são manejadas de forma rigorosa. A perda de carga através do trocador pode

ser fornecida ou calculada, assim como o coeficiente global de troca térmica. Usamos primeiramente o simulador para calcular a perda de carga dos trocadores. Os resultados para o trocador W111, W113 e W115 são mostrados nas Tabelas 4.4 a 4.6. O coeficiente global de troca térmica não foi calculado devido a falta de informações sobre as temperaturas intermediárias dos trocadores. Possuímos somente a temperatura de entrada e saída para cada conjunto de trocadores³.

Como vamos simular cada conjunto de trocadores de calor como fossem somente um trocador, a perda de carga calculada nas Tabelas 4.4 a 4.6 deverá ser multiplicada pelo número de trocadores.

Para a simulação usamos os resultados da perda de carga calculados anteriormente, e instalamos os trocadores para calcular a pressão da corrente de saída.

4.4.5 Colunas

Estas operações são as mais importantes do processo, devendo a simulação ser a mais realista possível. O simulador Hysim foi planejado para simular todos os tipos de colunas. O método utilizado (Russel, 1983), é uma combinação de técnicas existentes, pertencendo a classe "inside-outside" de métodos originados por Boston.

A eficiência de Murphree modificada é usada pelo simulador, para cada estágio. Outro detalhe importante é que o cálculo da coluna é feito através de estágios, sendo desta forma necessário para as colunas de recheio o valor da HETP (altura de empacotamento equivalente a um prato teórico). Nos próximos itens é discutido a simulação das colunas.

³conjunto de trocadores corresponde ao mesmo tipo de trocador colocado em série, por ex.: W111AB corresponde a dois trocadores W111 em série.

Tabela 4.4 Especificação do Trocador de Calor W111

HYSIM

Nome da Operação: W111AB

ESPECIFICAÇÃO

Trocador (TEMA) Tipo BFM

DADOS DO LADO DO TUBO

Passes	8,0000
Fat. Incrust.	0,0000
Tubos/Casco	125,0000

Dados do Tubo:

Comprimento	2,5000	Metros
D.E.	17,1450	mm
Espessura	1,6510	mm
Passo	23,8130	mm
Orientação	Horizontal	
Disposição	30,0000	°

DADOS DO LADO DO CASCO

Trajetos	2,0000
Fat. Incrust.	0,0000
Diâmetro	324,0000 mm
Área	13,5000 m ²

Dados da Chicana:

Tipo	Simple
Orientação	Vertical
Corte	16,0000
Espaçamento	70,0000 mm

DADOS DE ENTRADA ----- LADO DO CASCO ----- LADO DO TUBO -----

Nome da Corrente	MET_K111	MET_P110A
Pressão Bar	11,8332	17,2133
Fluxo Kg/h	2917,7808	2937,6199

DADOS DE SAÍDA -----

Nome da Corrente	MET_W111	MET_P110W
Pressão Bar	11,7758	16,7017
Fluxo Kg/h	2917,7808	2937,6199

Tabela 4.5 Especificação do Trocador de Calor W113

HYSIM

Nome da Operação: W113ABCD

ESPECIFICAÇÃO

Trocador (TEMA) Tipo BFM

DADOS DO LADO DO TUBO

Passes 1,0000
 Fat. Incrust. 0,0000
 Tubos/Casco 80,0000

Dados do Tubo:

Comprimento 2,5000 Metros
 D.E. 17,1450 mm
 Espessura 1,6510 mm
 Passo 23,8130 mm
 Orientação Horizontal
 Disposição 30,0000 °

DADOS DO LADO DO CASCO

Trajetos 1,0000
 Fat. Incrust. 0,0000
 Diâmetro 219,0000 mm
 Área 9,0000 m²

Dados da Chicana:

Tipo Simples
 Orientação Vertical
 Corte 34,0000
 Espaçamento 150,0000 mm

DADOS DE ENTRADA ----- LADO DO CASCO ----- LADO DO TUBO -----

Nome da Corrente	GNC_K112	AGUA_P/W113
Pressão Bar	1,1055	4,6133
Fluxo Kg/h	1077,7024	7714,4321

DADOS DE SAÍDA -----

Nome da Corrente	GNC_W113A	AGUA_W113
Pressão Bar	1,0990	4,6114
Fluxo Kg/h	1077,7024	7714,4321

Tabela 4.6 Especificação do Trocador de Calor W115

HYSIM

Nome da Operação: W115AB

ESPECIFICAÇÃO

Trocador (TEMA) Tipo BFM

DADOS DO LADO DO TUBO

Passes 1,0000
 Fat. Incrust. 0,0000
 Tubos/Casco 34,0000

Dados do Tubo:

Comprimento 2,5000 Metros
 D.E. 17,1450 mm
 Espessura 1,6510 mm
 Passo 23,8130 mm
 Orientação Horizontal
 Disposição 30,0000 °

DADOS DO LADO DO CASCO

Trajetos 1,0000
 Fat. Incrust. 0,0000
 Diâmetro 168,0000 mm
 Área 3,8000 m²

Dados da Chicana:

Tipo Simplex
 Orientação Vertical
 Corte 25,0000
 Espaçamento 100,0000 mm

DADOS DE ENTRADA ----- LADO DO CASCO ----- LADO DO TUBO -----

Nome da Corrente	MET_K113	AGUA_P/W115
Pressão Bar	1,0628	4,6133
Fluxo Kg/h	70,3613	7714,4321

DADOS DE SAÍDA -----

Nome da Corrente	MET_W115	AGUA_W115
Pressão Bar	1,0627	4,6001
Fluxo Kg/h	70,3613	7714,4321

4.4.5.1 Colunas de Absorção

As colunas a serem simuladas são a K110 e K111, as quais são as responsáveis pela absorção dos gases ácidos. Quando começamos a obter os primeiros resultados da simulação destas colunas, observamos que a temperatura de saída do metanol da coluna K111 estava totalmente diferente dos dados encontrados na planta. Estudamos o caso e concluímos que o modelo de cálculo do simulador para este tipo de coluna de absorção, não considera rigorosamente os efeitos térmicos associados aos calores de absorção, transferência de calor entre as correntes de líquido e gás, evaporação e condensação do solvente. Para o balanço de massa da coluna, o cálculo da eficiência corrige as distorções decorrentes da hipótese de equilíbrio para os estágios. Desta forma uma correção no balanço energético da coluna K111 deverá ser efetuado.

a) Cálculo da Eficiência:

A solubilidade e velocidade do gás e do líquido, viscosidade, mecanismo de absorção, bem como o tipo de recheio ou prato são alguns dos fatores que afetam a eficiência das colunas. O cálculo da eficiência através dos métodos de transferência de massa, ou o uso de alguma correlação empírica pode ser usado na predição da eficiência.

Uma outra alternativa para predizer a eficiência é usar o próprio simulador, isto é, com os dados de balanço de massa e energia da coluna, a eficiência no simulador é modificada até que o balanço de massa para a coluna simulada se iguale aos dados reais. Este é o método que utilizamos para predizer a eficiência das colunas de absorção. Como não possuímos informações seguras sobre o balanço de massa nas colunas, para a Planta de CO, usamos os dados obtidos de uma Planta Piloto.

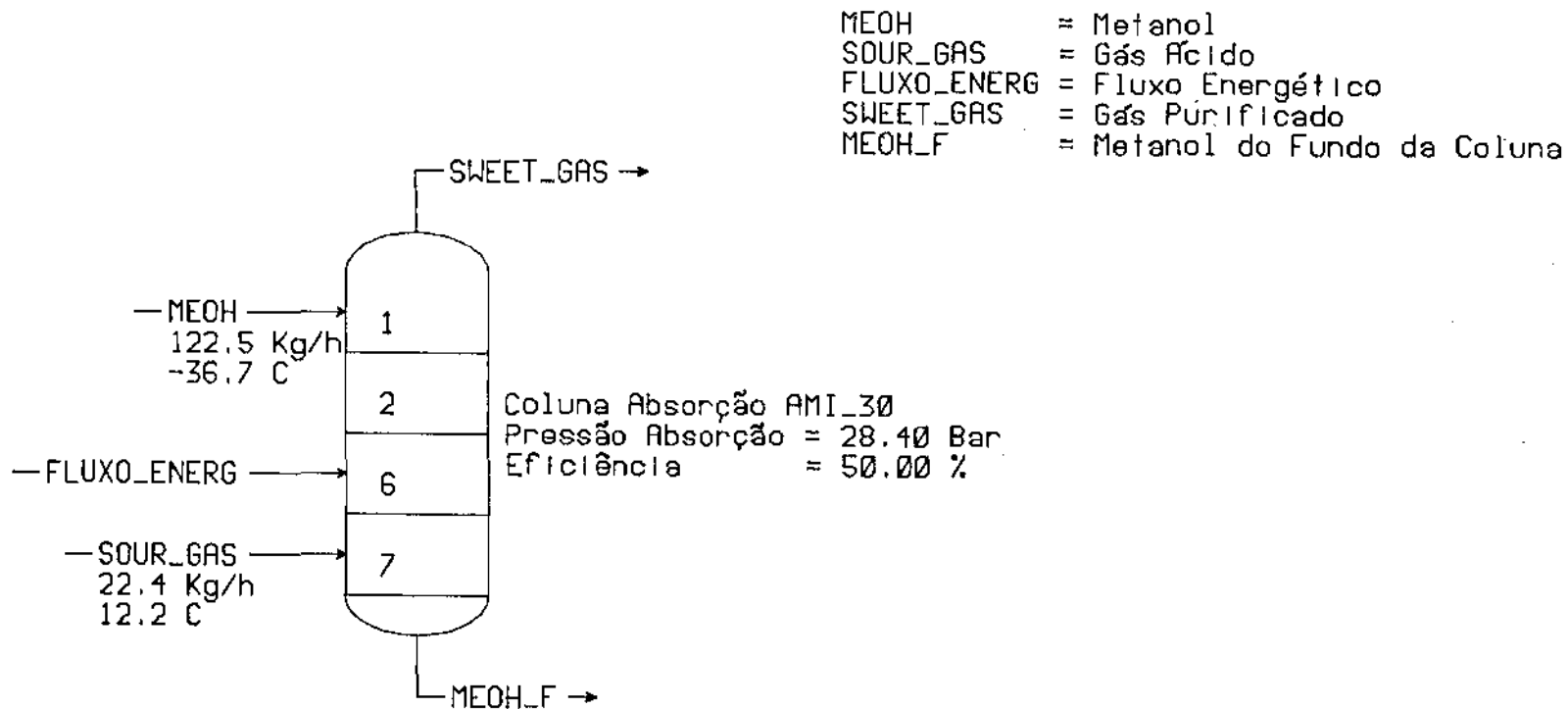
Os dados utilizados são de uma Planta Piloto de Gaseificação e Purificação de Carvão localizada na Universidade da Carolina do Norte (Kelly, 1981). Possuímos os dados de balan-

ção de massa e energia para a coluna de absorção, a qual usa o mesmo processo que o da Planta de CO para a purificação do gás (Processo Rectisol). Os componentes do gás a ser purificado, bem como as condições de operação da coluna, são semelhantes ao da Planta de CO.

Como o simulador, como citado anteriormente, possui um modelo simples de cálculo para o balanço energético, para este tipo de sistema, a solução foi corrigir o balanço energético da coluna manualmente e deste modo determinarmos a eficiência da coluna. Adicionamos à coluna de absorção uma corrente de energia a qual manipulamos para obtermos a temperatura correta do metanol na saída da coluna.

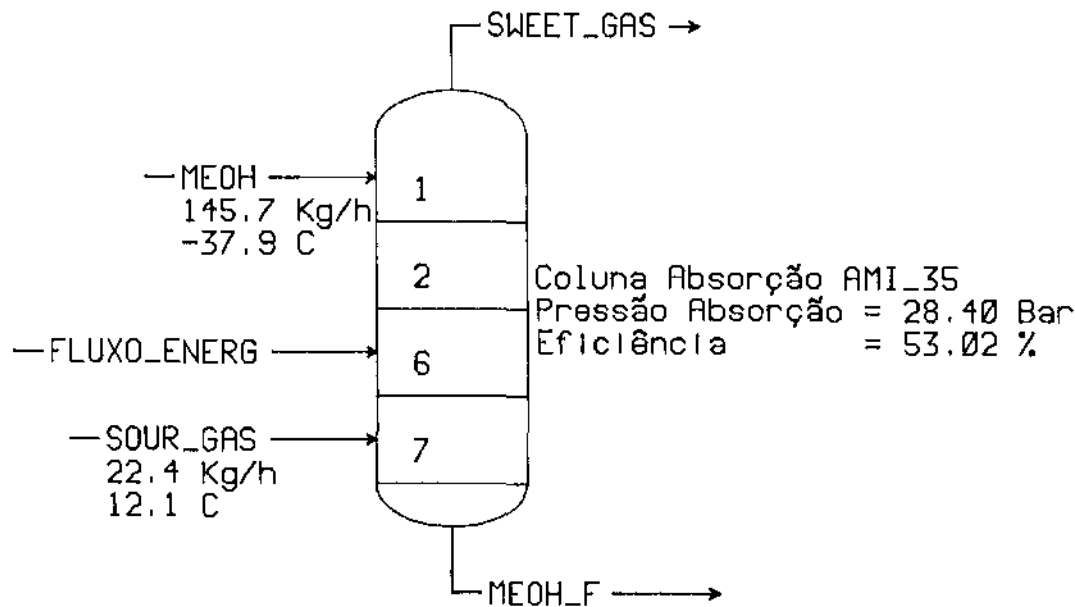
As Figuras 4.4 a 4.7 mostram os resultados das simulações para quatro condições de operações diferentes. A composição da corrente gasosa que sai da coluna de absorção na Planta Piloto é representada nas figuras por SWEET_GAS, enquanto que a composição calculada pelo simulador, para determinada eficiência, é representada nas figuras por SG_SIMULADO. A eficiência foi determinada levando em consideração a composição de CO₂, isto é, fomos mudando a eficiência dos estágios no simulador até conseguirmos reproduzir o mesmo resultado de composição de CO₂ que o encontrado na Planta Piloto. O dióxido de carbono (CO₂) é o contaminante em maior quantidade encontrado na corrente de gás a ser purificada, além de sua solubilidade em metanol ser menor do que a maioria dos outros gases ácidos (Tabela 2.4). Por estes motivos é que escolhemos o CO₂ como componente chave na determinação da eficiência para a coluna de absorção.

Como mostrado nas Figuras 4.4 a 4.7, a eficiência da coluna de absorção mudou para cada caso. No entanto, esta variação de 50 à 66% era esperada, já que as condições de operação para cada caso são diferentes. Para a coluna de absorção da Planta de CO optamos por fazer a média destas



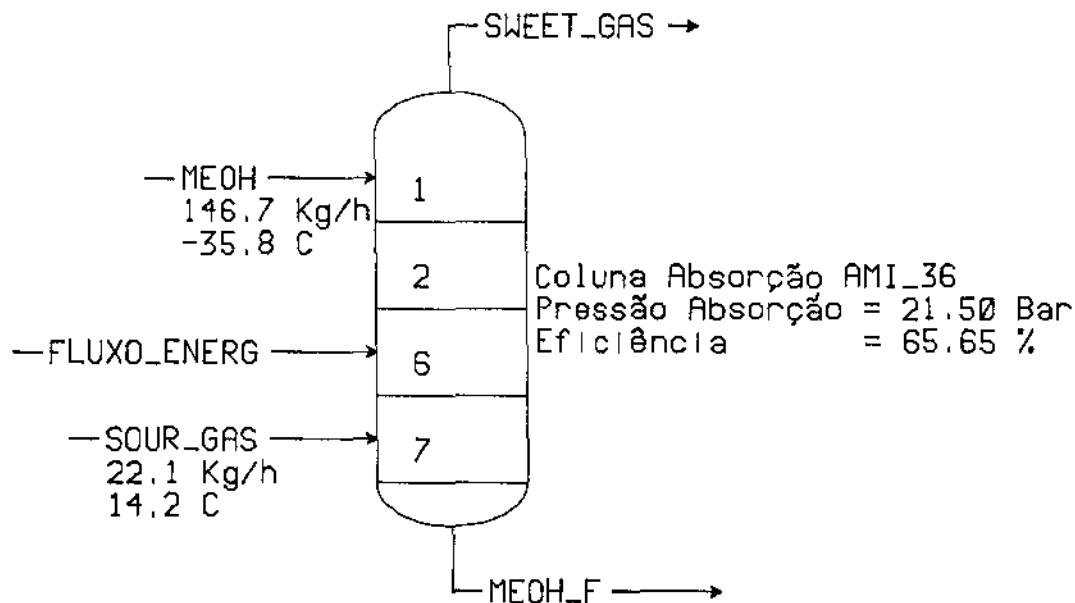
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	SWEET_GAS	SG_SIMULADO
CO2	24.6000	0.0000	1.4600	1.4600
H2S	0.9096	0.0000	0.0476	0.0200
COS	0.0423	0.0000	0.0032	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0000	0.0100
H2	33.1700	0.0000	43.1900	44.7400
CO	21.0600	0.0000	28.4800	28.1300
N2	18.5000	0.0000	24.8900	23.7700
CH4	1.6400	0.0000	1.9500	1.8700

Figura 4.4 Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_30



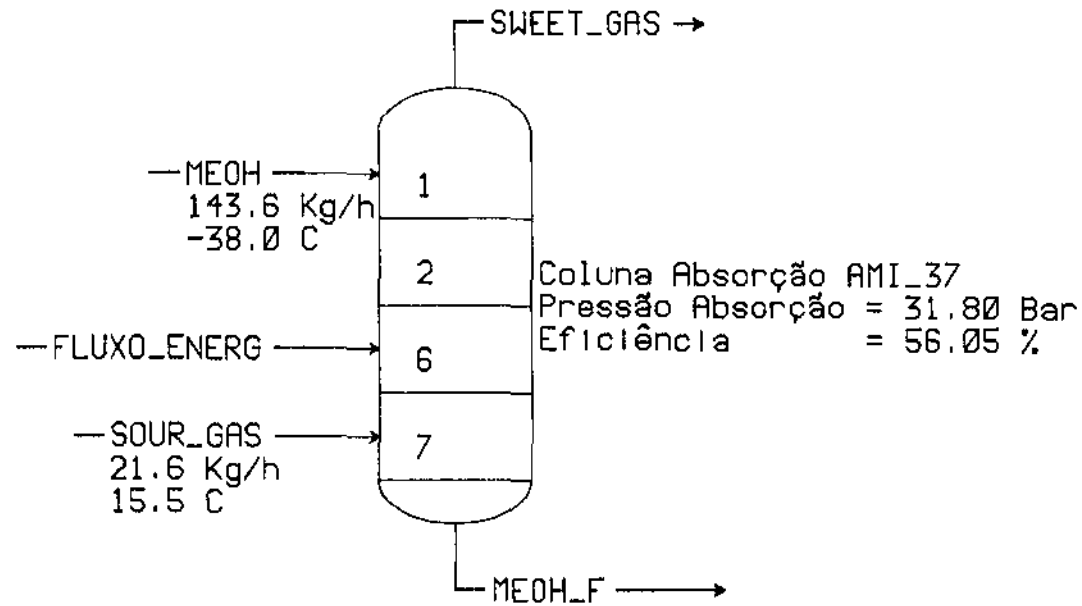
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	SWEET_GAS	SG_SIMULADO
CO2	28.0100	0.0000	0.9500	0.9500
H2S	0.8072	0.0000	0.0371	0.0100
COS	0.0450	0.0000	0.0034	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0000	0.0100
H2	33.1900	0.0000	45.5000	47.2700
CO	20.2000	0.0000	27.8500	28.4200
N2	15.7000	0.0000	23.2300	21.0300
CH4	2.0100	0.0000	2.4400	2.3000

Figura 4.5 Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_35



COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	SWEET_GAS	SG_SIMULADO
CO2	20.9000	0.0000	0.4200	0.4200
H2S	0.8918	0.0000	0.0682	0.0000
COS	0.0476	0.0000	0.0038	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0000	0.0100
H2	33.4400	0.0000	44.3100	43.5200
CO	17.0300	0.0000	20.5800	21.9800
N2	26.1900	0.0000	33.0400	32.6400
CH4	1.2700	0.0000	1.6800	1.4200

Figura 4.6 Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_36



COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	SWEET_GAS	SG_SIMULADO
CO2	25.0500	0.0000	0.6400	0.6400
H2S	0.8631	0.0000	0.0405	0.0100
COS	0.0475	0.0000	0.0027	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0000	0.0100
H2	38.9300	0.0000	54.9600	53.4600
CO	18.8100	0.0000	23.9200	25.5100
N2	14.8200	0.0000	19.3000	19.1000
CH4	1.1500	0.0000	1.1600	1.2600

Figura 4.7 Cálculo da Eficiência Através da Simulação da Coluna de Absorção AMI_37

quatro eficiências. Portanto, a eficiência para cada estágio da coluna de absorção K111 a ser simulada é 56,18%.

Este cálculo de eficiência é para a absorção principal (coluna K111), mas devido a falta de informações vamos extrapolar este valor para a parte superior da coluna K110 (secação dos gases com metanol). Esta extrapolação não prejudicará a simulação, já que o valor encontrado para a eficiência (56,18%), é um valor razoável para colunas de absorção. Encontramos na literatura (Perry, Green e Maloney, 1984), indicações de que a eficiência para colunas de absorção varia entre 50-100%.

Para a parte inferior da coluna K110 (lavagem com água), usamos um valor de 50% para a eficiência. Este valor é a eficiência mínima encontrada para colunas de absorção na literatura. Esta aproximação não prejudica a simulação, já que a função principal desta coluna é simplesmente remover HCN e NH₃, os quais se encontram na corrente em pequenas quantidades. Simulamos com eficiências diferentes esta seção da coluna e observamos que não ocorria grandes modificações em seu comportamento, portanto esta aproximação é válida.

b) Correção do balanço energético da coluna K111

O projeto de uma coluna de absorção de gases é complicada devido aos efeitos térmicos associados aos calores de absorção, transferência de calor entre as correntes de líquido e gás, evaporação e condensação do solvente.

Várias alternativas para corrigir o balanço energético da coluna K111 foram estudadas, mas devido as complicações de cada caso, optamos pela correção do balanço energético através da adição de energia à coluna. Como possuímos dados a respeito da planta de CO em várias condições de operação, simulamos estes casos e adicionamos uma corrente de energia a coluna K111 para corrigir a temperatura do metanol. Desta forma possuímos várias simulações corrigidas de forma manual,

a qual nos fornece a taxa de energia necessária para cada caso. A Tabela 4.7 apresenta a taxa de energia para as várias condições de operação, bem como os valores das variáveis que consideramos como sendo as que possuem maior influência na temperatura do metanol.

Tabela 4.7 Taxa de energia necessária para correção da temperatura do metanol na saída da K111

Nome da Simulação	Energia KJ/h	VL Kg/h	VG Kg/h	T _L °C	T _G °C
A030781	24350	1804,10	159,982	-9,0	19,33
A160781	25525	1767,01	124,720	-7,5	20,00
A1820781	26230	1881,04	139,931	-9,0	21,50
A080781	26750	1814,80	124,596	-9,0	17,00
A090781	26800	1805,56	109,501	-9,5	19,00
A020781	27330	1763,78	139,969	-9,8	19,10
A060781	29265	1805,65	139,700	-9,6	18,00
A050781	29050	1837,03	149,680	-9,5	17,25
A1920781	33550	1930,73	135,168	-8,0	24,00
A060191	54000	3436,60	364,131	-8,3	22,70
A070191	58200	3438,47	362,599	-8,7	23,30
A080191	60900	3437,45	350,802	-8,5	22,00
A100191	62300	3469,81	190,973	-9,3	23,30
A050191	63000	3369,99	361,042	-9,3	23,70
A150191	67250	3452,49	180,430	-8,7	23,70
A120191	70230	3458,79	190,920	-10,0	23,30
A160191	70530	3438,39	181,550	-8,7	23,30

Cada simulação (ex.: A030781) corresponde à condições de operação de determinado período, dia, mês e ano.

O próximo passo foi achar uma correlação que nos forneça a correção da taxa de energia automaticamente. Esta correlação deve conter as variáveis citadas na Tabela 4.7, as

quais são consideradas como sendo as variáveis que possuem maior influência na temperatura do metanol na saída da K111.

No pacote estatístico do SAS encontram-se vários métodos que produzem a estimativa dos parâmetros de um modelo linear ou não linear. Para este caso usamos o NLIN, método de regressão não linear, o qual produz a estimativa dos parâmetros de um modelo através da minimização da soma dos erros ao quadrado. No NLIN há vários métodos iterativos que podem ser usados na estimativa dos parâmetros. Optamos em usar o método da Secante, o qual estima as derivadas do modelo a ser usado. Este método é também chamado de método da Falsa Posição, ou método DUD. É bom salientar que a expressão da correlação, ou melhor, o modelo não linear e os valores iniciais para os parâmetros devem ser fornecidos.

Como o modelo não linear tem que ser fornecido, tentamos vários modelos, mas o que apresentou melhores resultados é o descrito a seguir:

$$FE = K1 \times VG + K2 \times VL + K3 \times VG \times VL \times (TL - TG), \quad (4.15)$$

onde:	K1 e K2	- constantes	(KJ/Kg);
	K3	- constante	(KJh/°CKg ²);
	VG	- vazão de gás	(Kg/h);
	VL	- vazão de líquido	(Kg/h);
	TL	- temperatura do líquido	(°C);
	TG	- temperatura do gás	(°C);
	FE	- taxa energética	(KJ/h).

Através deste modelo e com ajuda do método NLIN, os parâmetros K1, K2 e K3 foram estimados. A seguir apresentamos os valores estimados e os seus respectivos desvios:

Parâmetro	Valor	Desvio Padrão	% Desvio
K1	-125,6220695	20,498256852	16,32
K2	21,4860410	1,011696445	4,71
K3	-0,0007912	0,000149860	18,94

Na Tabela 4.8 é apresentado os resultados. Podemos observar que os desvios são na maioria dos casos inferiores a 10%, o que nos mostra que a correlação é adequada para as condições de operação da Planta de CO.

Tabela 4.8 Taxa de Energia Calculada pela Correlação

Nome da Simulação	FE	FEAJUSTADO	% Desvio
A030781	24350	25135,3	3,22
A160781	25525	27093,7	6,15
A1820781	26230	29189,7	11,28
A080781	26750	27992,5	4,64
A090781	26800	29497,1	10,06
A020781	27330	25958,7	5,02
A060781	29265	26755,6	8,57
A050781	29050	26487,3	8,82
A1920781	33550	31111,3	7,27
A060191	54000	58790,2	8,87
A070191	58200	59896,9	2,92
A080191	60900	58889,5	3,30
A100191	62300	67654,3	8,59
A050191	63000	58822,1	6,63
A150191	67250	67484,0	0,35
A120191	70230	67730,9	3,56
A160191	70530	66876,1	5,18

É bom salientar que somente a coluna K111 precisa de correção, já que é a coluna onde os efeitos térmicos da absorção são mais significativos. A correlação foi programada com ajuda da calculadora (linguagem de programação própria do simulador), sendo automaticamente corrigida quando alguma de suas variáveis muda de valor.

c) Cálculo da HETP

Esta informação é necessária para as colunas que possuem recheio, já que no simulador o cálculo é feito através de estágios. Para o cálculo da HETP (altura de empacotamento equivalente a um prato teórico), usamos os valores que se encontram no Perry's Chemical Engineer's Handbook (Perry, Green e Maloney, 1984), os quais são mostrados na tabela abaixo:

Tabela 4.9 Cálculo da HETP

Tamanho do Recheio mm (in)	H E T P m
25 (1)	0,4 - 0,5
38 (1½)	0,5 - 0,7
50 (2)	0,7 - 0,9
75 (3)	0,9 - 1,0

Estes valores são aplicados à sistemas de absorção e desabsorção, onde ocorre somente absorção ou desabsorção física dos gases.

4.4.5.2 Coluna de Desabsorção

Para simular a coluna de desabsorção K112, foi necessário obter informações sobre a eficiência e o valor da HETP.

O cálculo da HETP é obtido diretamente da Tabela 4.9, apresentada no item anterior.

Para o cálculo da eficiência, encontramos na literatura (Perry, Green e Maloney, 1984), uma correlação empírica desenvolvida por O'Connell obtida a partir de dados práticos, a qual aplica-se à sistemas de hidrocarbonetos e não hidrocarbonetos. A eficiência é calculada em função da volatilida-

de relativa e da viscosidade da alimentação, as quais são avaliadas na temperatura média aritmética dos valores do topo e base da coluna.

A correlação de O'Connel é apresentada na Figura abaixo:

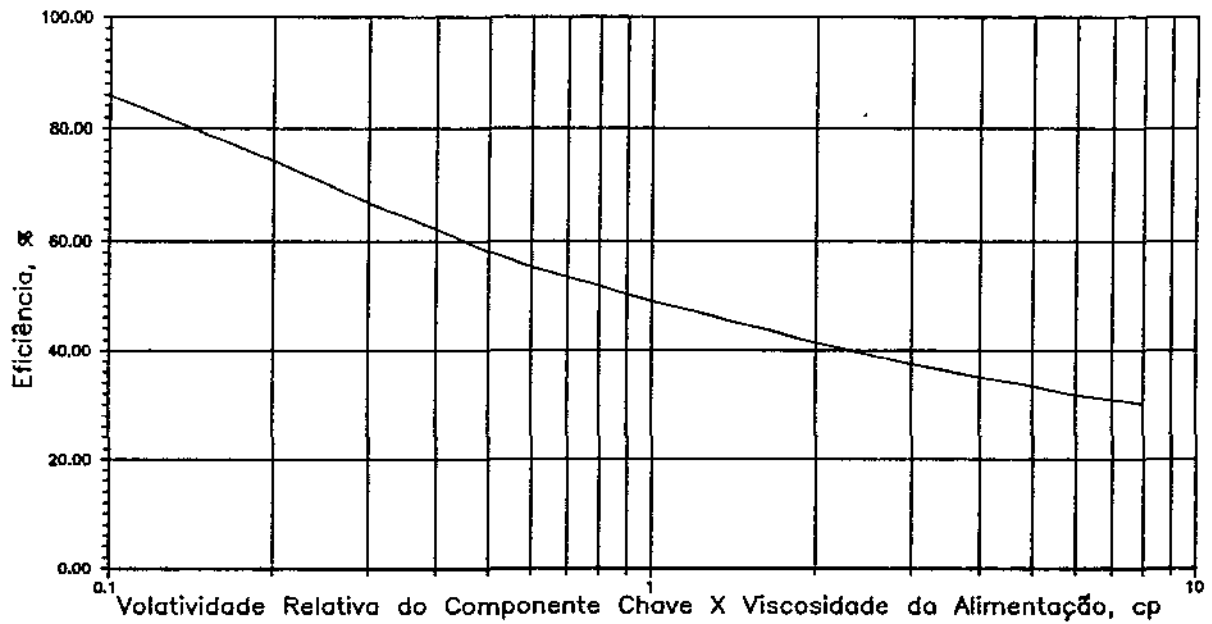


Figura 4.8 Correlação de O'Connel

Para a coluna K112, a temperatura do topo é de 63,6° C e da base 69° C. Portanto, a temperatura média é de 66,3° C. Na Tabela 4.10, apresentamos valores da viscosidade e composição da corrente de alimentação da coluna K112.

Tabela 4.10 Viscosidade e Composição da Corrente de Alimentação da Coluna K112

DESCRIÇÃO	UNIDADE	ALIMENTAÇÃO	VAPOR	LÍQUIDO
Temperatura	°C	66,3000	66,3000	66,3000
Pressão	Bar	1,1055	1,1055	1,1055
Viscosidade	Cp	----	----	0,3254
COMPONENTES		ALIMENTAÇÃO	VAPOR	LÍQUIDO
H ₂	Fração Molar	0,00	0,03	0,00
H ₂ O	"	0,09	0,01	0,09
N ₂	"	0,01	0,20	0,00
O ₂	"	0,00	0,06	0,00
CO	"	0,18	6,82	0,00
CO ₂	"	0,05	1,75	0,00
H ₂ S	"	0,04	1,08	0,00
CS ₂	"	0,18	0,31	0,18
COS	"	0,01	0,17	0,00
Metanol	"	99,44	89,57	99,73
HCN	"	0,00	0,00	0,00
Amônia	"	0,00	0,00	0,00

Os cálculos da volatilidade relativa são descritos a seguir.

A volatilidade relativa é definida como:

$$\alpha_{ij} = \frac{Y_i/X_i}{Y_j/X_j} \quad (4.16)$$

onde: i e j são os componentes;
 Y é a fração molar na fase vapor;
 X é a fração molar na fase líquida.

Dos componentes ácidos presentes na corrente de alimentação (CO_2 , H_2S , COS e CS_2), o CS_2 é o mais difícil de ser removido da corrente. Desta forma, escolhemos o CS_2 como componente chave para o cálculo da volatilidade relativa.

Portanto para $i = \text{CS}_2$ e $j = \text{Metanol}$, a volatilidade relativa é calculada como:

$$\alpha_{ij} = \frac{0,31/0,18}{89,57/99,73} = 1,917 .$$

Desta forma, o produto volatilidade relativa x viscosidade de alimentação = 0,62. Através deste valor e com ajuda da Figura 4.8, encontramos para cada estágio da coluna K112 uma eficiência de 55% .

Podemos observar, que este valor é próximo ao valor encontrado para a coluna de absorção K111, o que demonstra que os resultados estão coerentes, já que a desabsorção é o processo inverso da absorção.

4.4.5.3 Coluna de Destilação

Para simular esta coluna precisamos conhecer o valor da eficiência dos estágios, o qual é totalmente diferente dos valores apresentados anteriormente.

A Figura 4.9 apresenta valores de eficiência para destilação do sistema metanol/água em função da velocidade superficial do vapor, obtidos por Kastanek e Standart (Perry, Green e Maloney, 1984). A coluna na qual foram obtidos esses valores, opera a pressão atmosférica e possui pratos com borbulhador. Através deste gráfico conseguimos obter a eficiência para a coluna K113, a qual também opera a pressão atmosférica e utiliza prato com borbulhador.

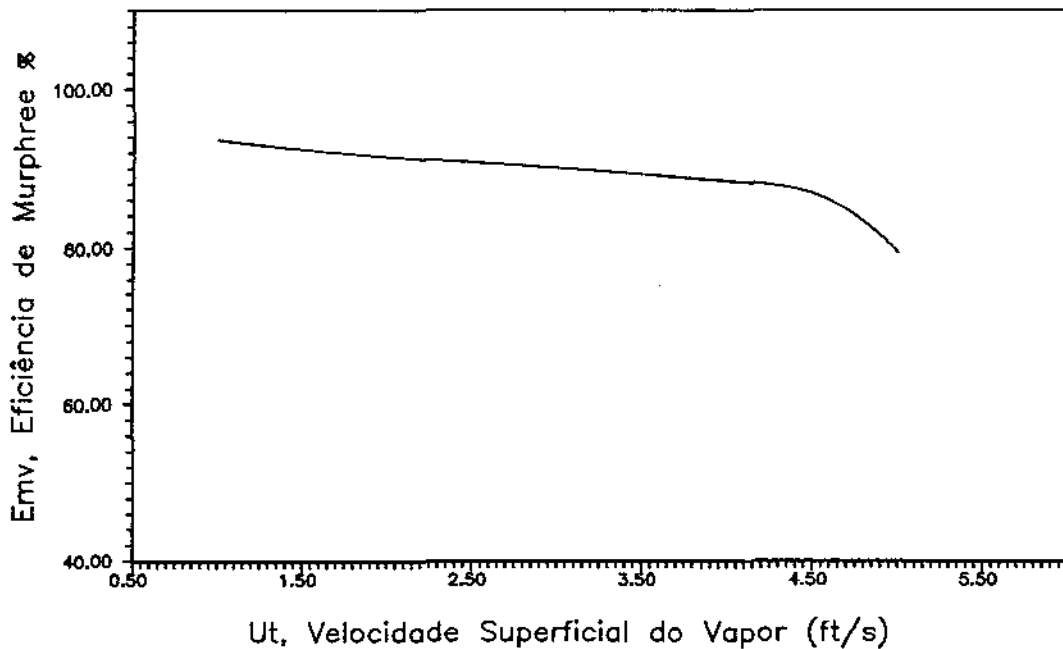


Figura 4.9 Cálculo de eficiência para sistemas metanol/água

A Tabela 4.11 apresenta valores da vazão de vapor para os diversos estágios da coluna K113, obtidos com ajuda do simulador, bem como a velocidade superficial do vapor.

Tabela 4.11 Vazão e Velocidade Superficial do Vapor na Coluna K113

NÚMERO ESTÁGIO	VAZÃO DE VAPOR	
	Kg/h	m ³ /h
1	70,36	57,840
2	69,56	57,284
3	69,50	57,277
4	69,43	57,266
5	69,34	57,252
6	69,21	57,233
7	69,06	57,198
8	72,41	60,330
9	72,43	60,373
10	72,37	60,366
11	72,26	60,348
12	72,01	60,310
13	71,47	60,229
14	70,32	60,056
15	67,78	59,695
16	62,13	58,968
17	50,52	57,621
18	38,40	56,445
VAZÃO DE VAPOR MEDIO		58,672

ÁREA DA COLUNA K113	0,08240	m ²
VELOCIDADE SUPERFICIAL DO VAPOR	0,19779	m/s
	0,64892	ft/s

Através da velocidade superficial do vapor na coluna e da Figura 4.9, encontramos uma eficiência de 93,3% para cada estágio da coluna K113.

4.5 Teste de Validade do Simulador

Antes de efetuarmos a análise paramétrica do processo de purificação da Planta de Monóxido de Carbono, devemos verificar, se o simulador pode ser utilizado para este tipo de sistema, e se a correlação utilizada na correção do balanço energético da coluna de absorção é eficiente.

A coluna de absorção K111 possui grande importância dentro da Planta de CO. Esta coluna, como descrito anteriormente, precisou ser corrigida no seu balanço energético. Com o intuito de verificar a confiabilidade do simulador para este tipo de coluna, utilizamos dados experimentais de uma Planta Piloto, e comparamos os resultados obtidos pelo simulador com os dados experimentais da própria Planta Piloto e do programa MCOMP, desenvolvido por Kelly (Kelly, 1981). Os resultados são apresentados no item 4.5.1.

Utilizando os dados coletados na Planta de CO da BASF Química da Bahia, simulamos todo o processo de Purificação de CO e com isto conseguimos comparar os resultados obtidos pelo simulador com os dados coletados na Planta. No item 4.5.2 apresentamos os resultados desta comparação.

4.5.1 Dados Obtidos da Planta Piloto

Através dos dados experimentais da Planta Piloto, podemos simular uma coluna de absorção e verificar se o simulador produz resultados satisfatórios.

Os dados utilizados são de uma Planta Piloto de Gaseificação e Purificação de Carvão localizada na Universidade da Carolina do Norte (Kelly, 1981). Possuímos os dados de balanço de massa e energia para a coluna de absorção, a qual usa o mesmo processo da Planta de CO para purificação do gás (Processo Rectisol). Os componentes do gás a ser purificado, bem como as condições de operação da coluna, são semelhantes ao da Planta de CO.

Da Tabela 4.9 calculamos o valor do HETP para a coluna, enquanto que a eficiência é a mesma da K111. O balanço energético, como explicado anteriormente, deverá ser corrigido.

Para a correção do balanço energético desta coluna, utilizaremos a correlação apresentada anteriormente para a coluna K111. O modelo não-linear encontrado anteriormente será utilizado, mas os valores dos parâmetros K1, K2 e K3 deverão ser estimados novamente através dos dados experimentais da Planta Piloto.

A Tabela 4.12 apresenta a taxa de energia necessária para as diversas condições de operação, e o valor das variáveis que fazem parte da correlação.

Tabela 4.12 Taxa de energia necessária para a correção da temperatura do metanol na saída da coluna (Planta Piloto)

Nome da Simulação	Energia KJ/h	VL Kg/h	VG Kg/h	T _L °C	T _G °C
AMI_36	4615	146,670	22,0612	-35,767	14,1667
AMI_30	5010	122,483	22,4235	-36,739	12,2444
AMI_35	5810	145,659	22,4073	-37,950	12,1444
AMI_37	7490	143,639	21,6480	-37,961	15,5111

Os valores e desvios estimados para os parâmetros K1, K2 e K3, para os dados experimentais da Planta Piloto apresentados na Tabela 4.12, são:

Parâmetro	Valor	Desvio Padrão	% Desvio
K1	328,1617668	14,774645703	4,50
K2	-423,7054091	10,081303991	2,38
K3	-0,3682651	0,007809111	2,12

Na Tabela 4.13 apresentamos os resultados da taxa de energia ajustada através da correlação e os respectivos desvios. Podemos observar que os desvios são pequenos e

portanto a correlação com os novos valores dos parâmetros é adequada para as condições de operação da Planta Piloto.

Tabela 4.13 Taxa de Energia Calculada pela Correlação (Planta Piloto)

Nome Simulação	FE	FEAJUSTADO	% DESVIO
AMI_36	4615	4595,48	0,42
AMI_30	5010	5005,45	0,09
AMI_35	5810	5847,81	0,65
AMI_37	7490	7475,47	0,19

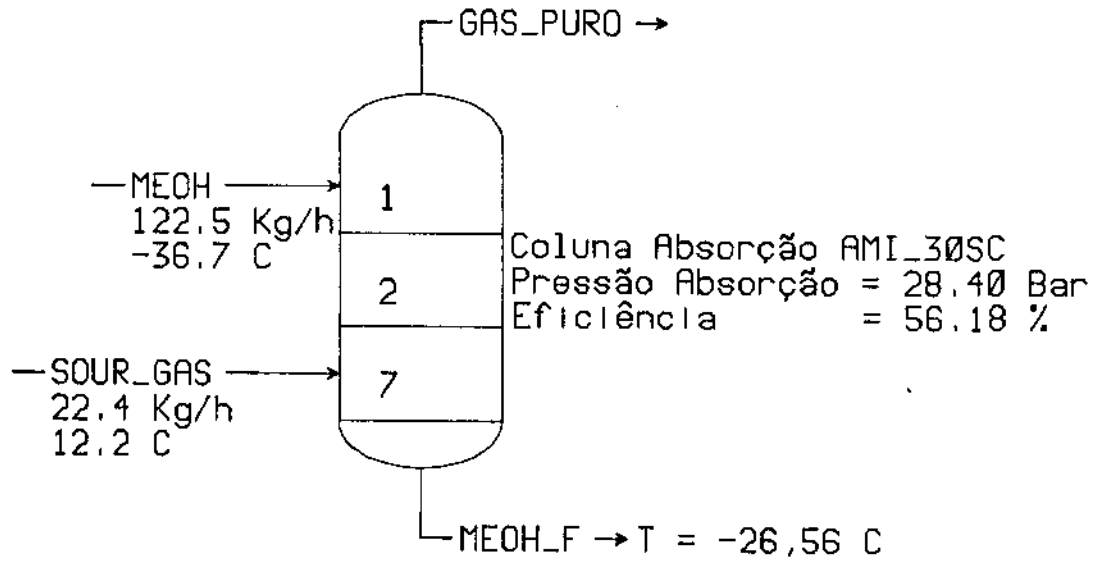
Nas Figuras 4.10 a 4.13 é apresentado a simulação dos vários casos: AMI_30SC, AMI_35SC, AMI_36SC e AMI_37SC, os quais representam as diversas condições de operação da Planta Piloto. Podemos observar através das Figuras, que nestas simulações o balanço energético da coluna não foi corrigido.

As Figuras 4.14 a 4.17 apresentam a simulação dos mesmos casos: AMI_30, AMI_35, AMI_36 e AMI_37, no entanto, para estes casos foi criado uma taxa de energia para corrigir o balanço energético da coluna através da correlação acima descrita.

Os dados das correntes de entrada MEOH e SOUR_GAS, pressão da coluna e altura de empacotamento foram obtidos da Planta Piloto.

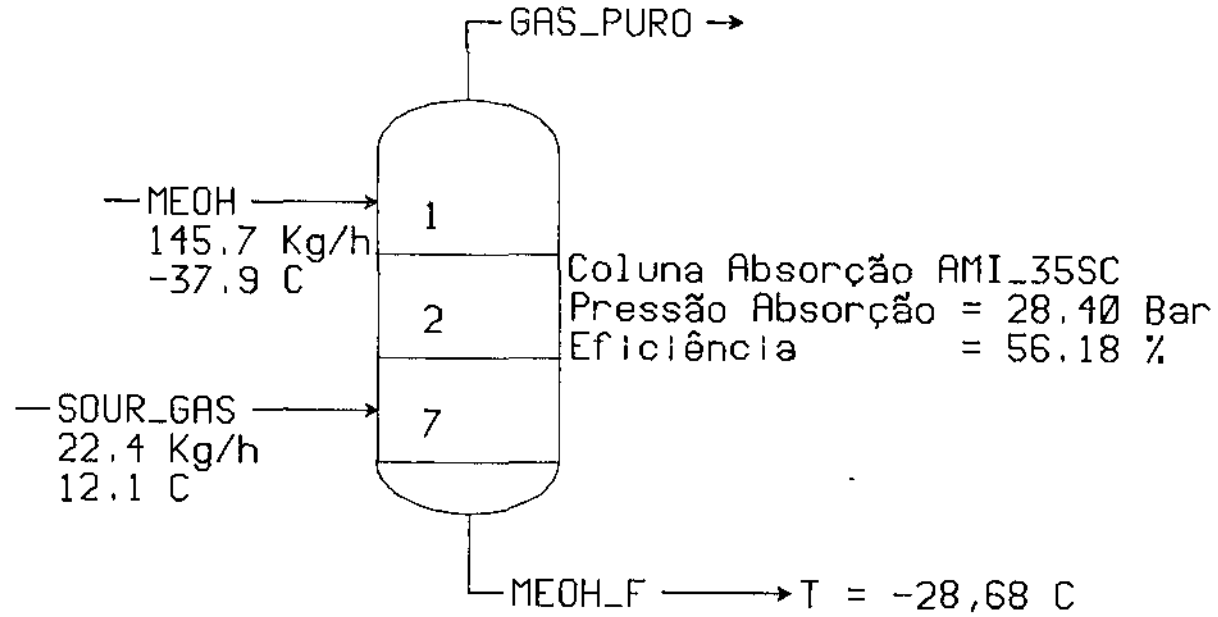
Nas Tabelas 4.14 a 4.17, encontram-se os resultados da composição da corrente gasosa e temperatura do metanol que saem da coluna. Os resultados das Tabelas representam os dados experimentais da Planta Piloto, do programa MCOMP e das simulações com e sem correção do balanço energético da coluna. O programa MCOMP utiliza o coeficiente global de transferência de massa para descrever o transporte que ocorre na coluna, e foi desenvolvido especialmente para predizer o comportamento de uma coluna de absorção para este tipo de sistema (Kelly, 1981).

MEOH = Metanol
 SOUR_GAS = Gás Ácido
 GAS_PURO = Gás Purificado
 MEOH_F = Metanol do Fundo da Coluna



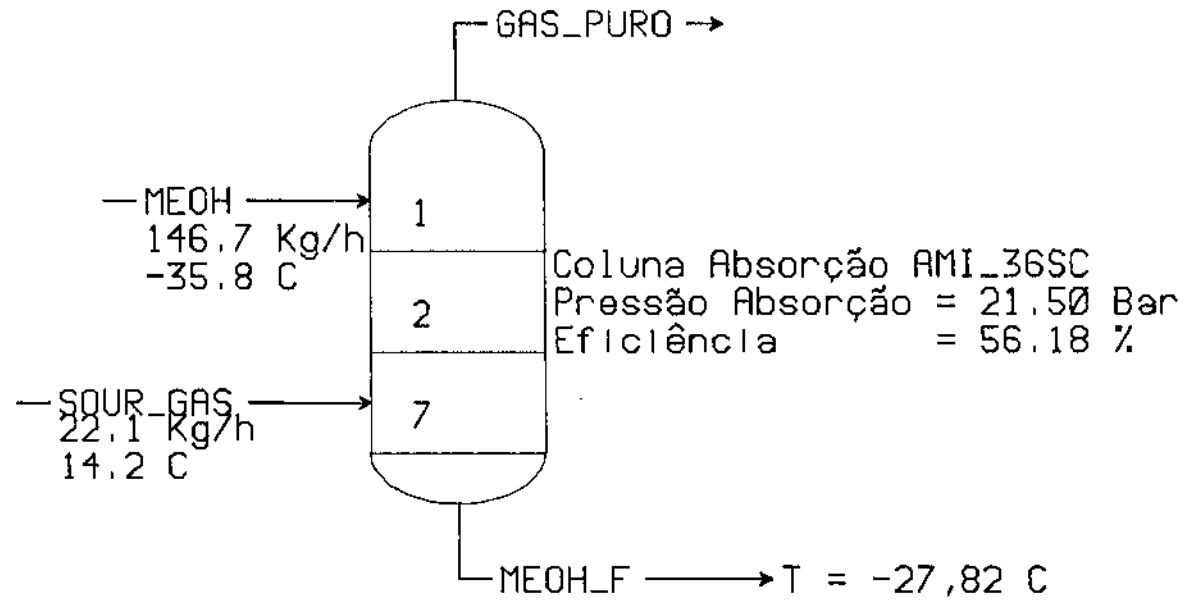
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	24.6000	0.0000	0.7500
H2S	0.9096	0.0000	0.0100
COS	0.0423	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	33.1700	0.0000	45.0900
CO	21.0600	0.0000	28.3500
N2	18.5000	0.0000	23.9200
CH4	1.6400	0.0000	1.8700

Figura 4.10 Simulação da Coluna de Absorção AMI_30SC



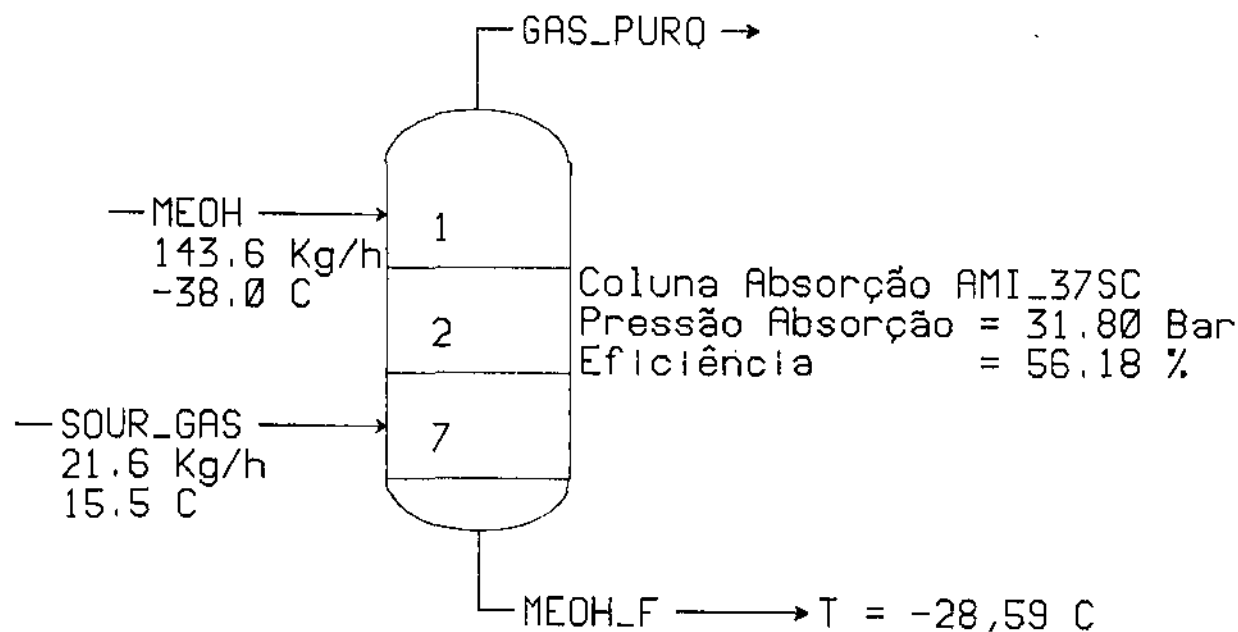
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	28.0100	0.0000	0.6000
H2S	0.8072	0.0000	0.0100
COS	0.0450	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	33.1900	0.0000	47.4600
CO	20.2000	0.0000	28.5400
N2	15.7000	0.0000	21.0900
CH4	2.0100	0.0000	2.2900

Figura 4.11 Simulação da Coluna de Absorção AMI_35SC



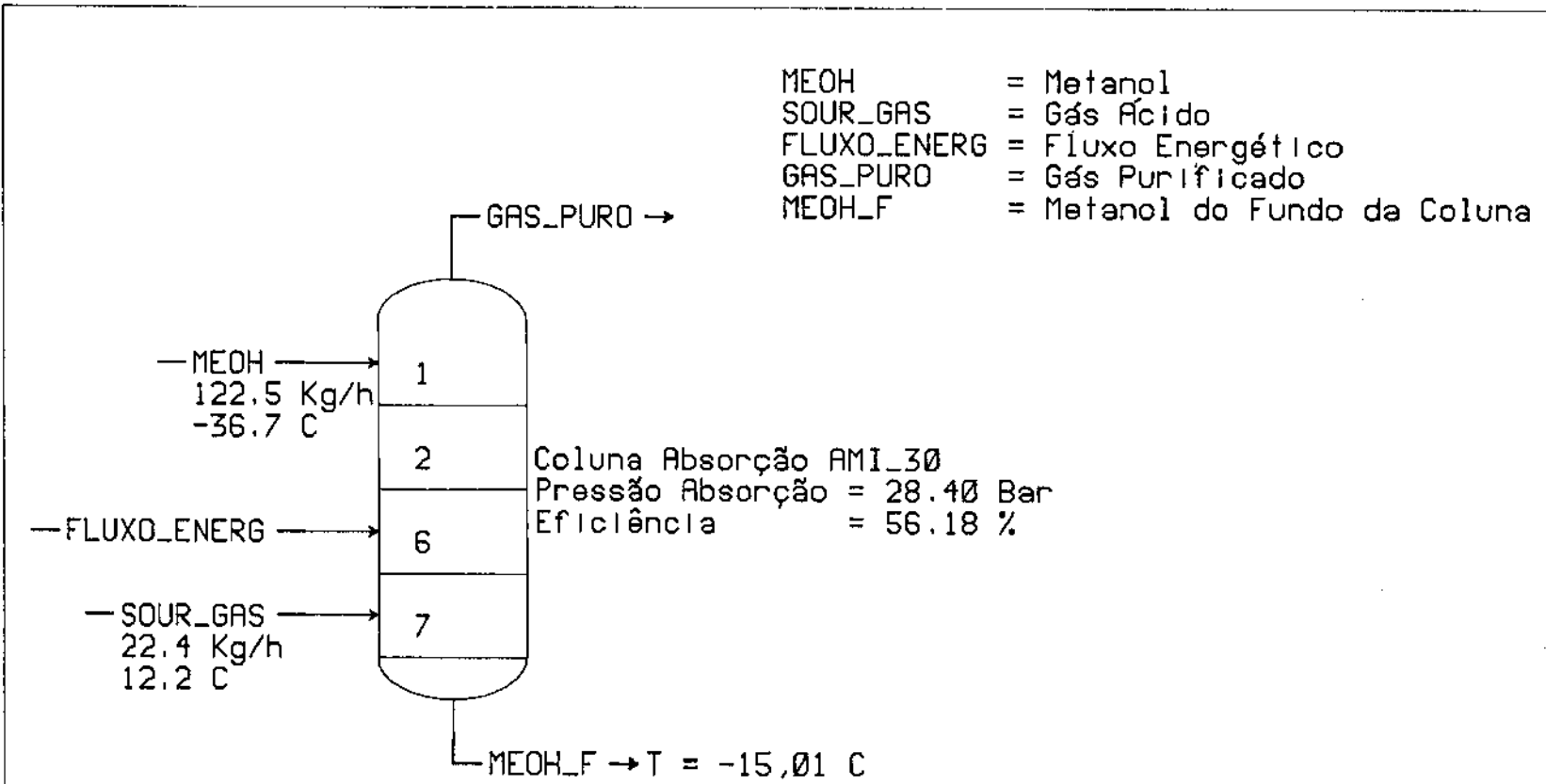
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	20.9000	0.0000	0.7300
H2S	0.8918	0.0000	0.0100
COS	0.0476	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	33.4400	0.0000	43.3800
CO	17.0300	0.0000	21.9100
N2	26.1900	0.0000	32.5400
CH4	1.2700	0.0000	1.4100

Figura 4.12 Simulação da Coluna de Absorção AMI_36SC



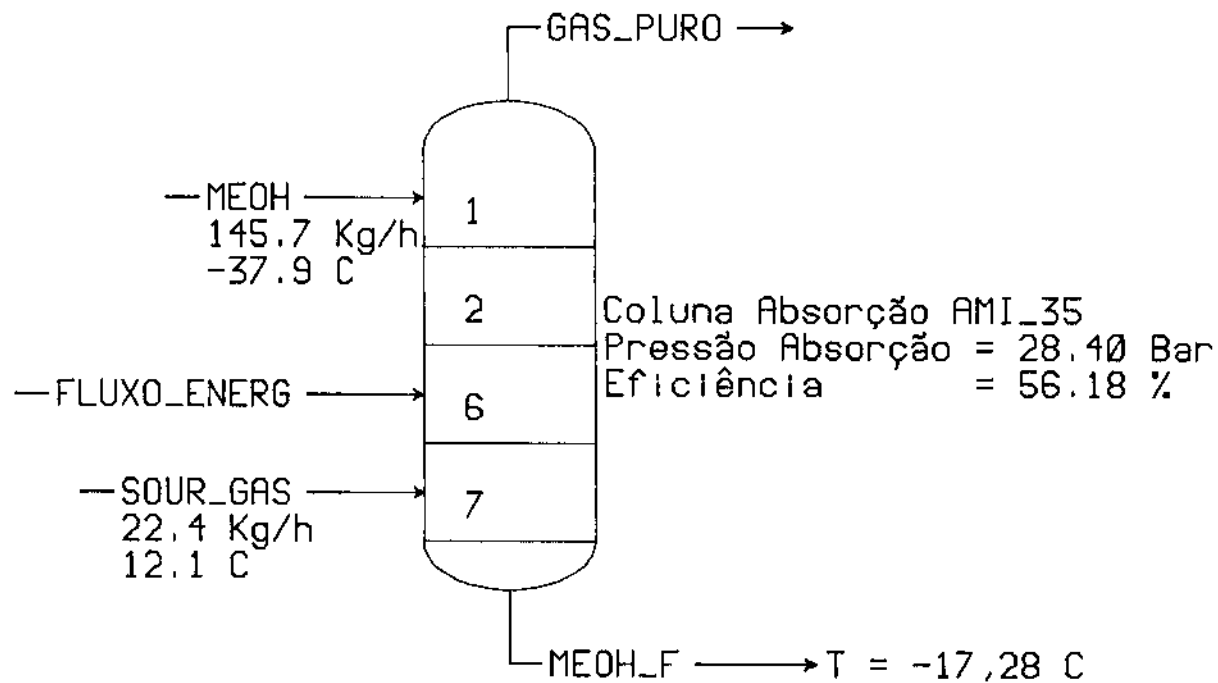
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	25.0500	0.0000	0.5100
H2S	0.8631	0.0000	0.0100
COS	0.0475	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	38.9300	0.0000	53.5500
CO	18.8100	0.0000	25.5600
N2	14.8200	0.0000	19.1100
CH4	1.1500	0.0000	1.2500

Figura 4.13 Simulação da Coluna de Absorção AMI_37SC



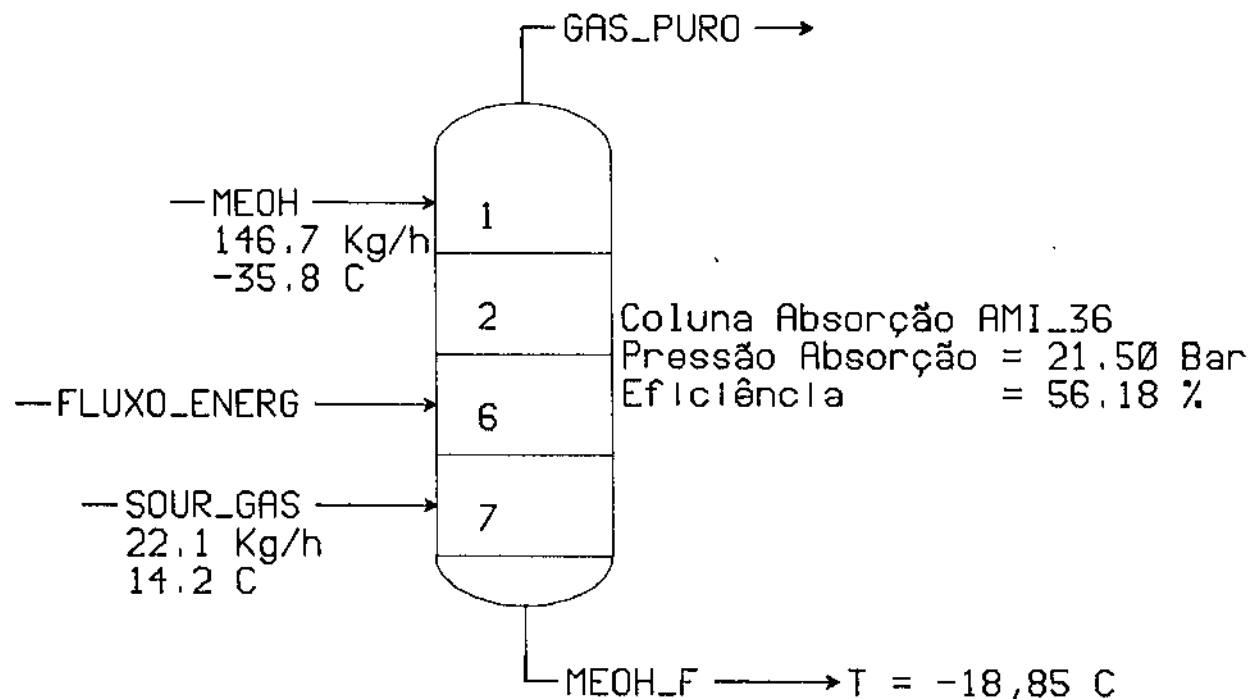
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	24.6000	0.0000	0.9200
H2S	0.9096	0.0000	0.0100
COS	0.0423	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	33.1700	0.0000	45.0000
CO	21.0600	0.0000	28.2900
N2	18.5000	0.0000	23.8900
CH4	1.6400	0.0000	1.8800

Figura 4.14 Simulação da Coluna de Absorção AMI_30



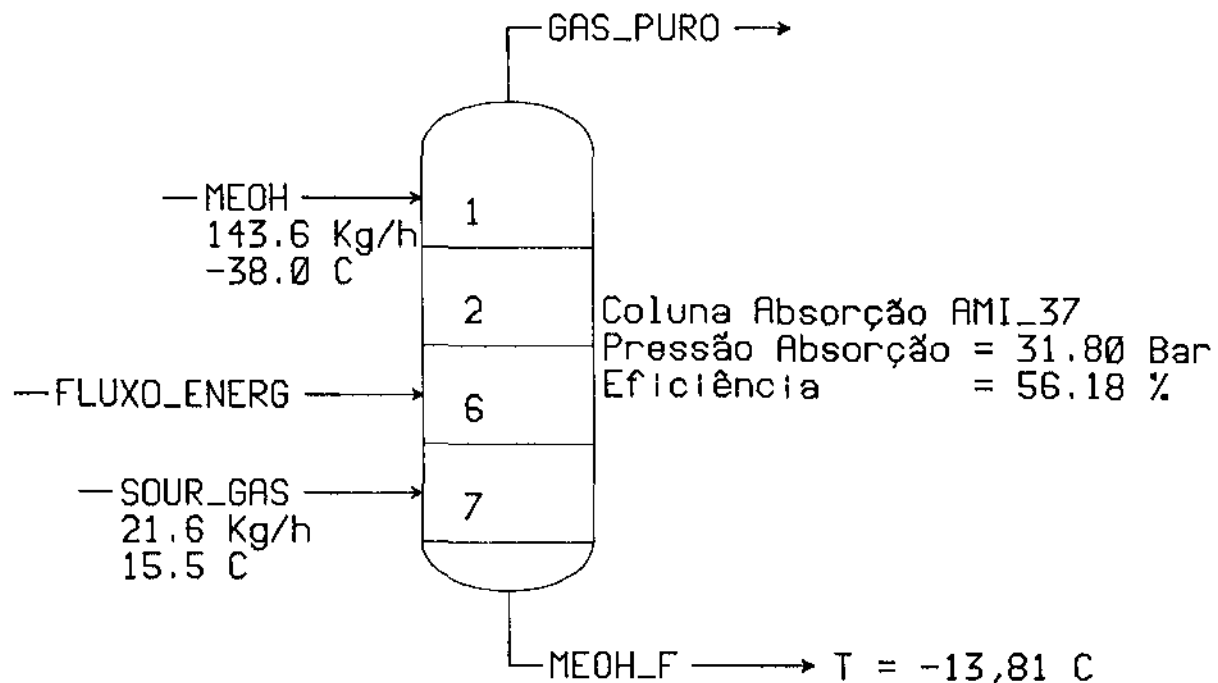
COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	28.0100	0.0000	0.7100
H2S	0.8072	0.0000	0.0100
COS	0.0450	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	33.1900	0.0000	47.3900
CO	20.2000	0.0000	28.5000
N2	15.7000	0.0000	21.0800
CH4	2.0100	0.0000	2.3100

Figura 4.15 Simulação da Coluna de Absorção AMI_35



COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	20.9000	0.0000	0.8600
H2S	0.8918	0.0000	0.0100
COS	0.0476	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	33.4400	0.0000	43.3100
CO	17.0300	0.0000	21.8700
N2	26.1900	0.0000	32.5100
CH4	1.2700	0.0000	1.4200

Figura 4.16 Simulação da Coluna de Absorção AMI_36



COMP. (% Molar)	SOUR_GAS	MEOH	GAS_PURO
CO2	25.0500	0.0000	0.6300
H2S	0.8631	0.0000	0.0100
COS	0.0475	0.0000	0.0000
MEOH	0.0000	100.0000	0.0100
H2	38.9300	0.0000	53.4700
CO	18.8100	0.0000	25.5100
N2	14.8200	0.0000	19.1100
CH4	1.1500	0.0000	1.2600

Figura 4.17 Simulação da Coluna de Absorção AMI_37

Tabela 4.14 Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_30

	PLANTA PILOTO	PROGRAMA MCOMP	SIMULADOR	
			AMI_30SC	AMI_30
COMPOSIÇÃO DA CORRENTE GAS PURO (% MOLAR)				
CO ₂	1,4600	1,3780	0,7500	0,9200
H ₂ S	0,0480	0,0020	0,0100	0,0100
COS	0,0030	traços	0,0000	0,0000
MEOH	traços	0,0130	0,0100	0,0100
H ₂	43,1900	44,4590	45,0900	45,0000
CO	28,4800	27,6980	28,3500	28,2000
N ₂	24,8900	24,3450	23,9200	23,8900
CH ₄	1,9500	2,0850	1,8700	1,8800
TEMPERATURA DA CORRENTE MEOH_F (°C)				
MEOH_F	-15,09	-14,74	-26,56	-15,01

Tabela 4.15 Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_35

	PLANTA PILOTO	PROGRAMA MCOMP	SIMULADOR	
			AMI_35SC	AMI_35
COMPOSIÇÃO DA CORRENTE GAS PURO (% MOLAR)				
CO ₂	0,9500	0,3600	0,6000	0,7100
H ₂ S	0,0370	traços	0,0100	0,0100
COS	0,0030	traços	0,0000	0,0000
MEOH	traços	0,0090	0,0100	0,0100
H ₂	45,5000	47,2240	47,4600	47,3900
CO	27,8500	27,9980	28,5400	28,5000
N ₂	23,2300	21,7540	21,0900	21,0800
CH ₄	2,4400	2,6580	2,2900	2,3100
TEMPERATURA DA CORRENTE MEOH_F (°C)				
MEOH_F	-17,38	-16,05	-28,68	-17,28

Tabela 4.16 Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_36

	PLANTA PILOTO	PROGRAMA MCOMP	SIMULADOR	
			AMI_36SC	AMI_36
COMPOSIÇÃO DA CORRENTE GAS_PURO (% MOLAR)				
CO ₂	0,4200	0,4330	0,7300	0,8600
H ₂ S	0,0680	traços	0,0100	0,0100
COS	0,0040	traços	0,0000	0,0000
MEOH	traços	0,0160	0,0100	0,0100
H ₂	44,3100	43,3450	43,3800	43,3100
CO	20,5800	21,4140	21,9100	21,8700
N ₂	33,0400	33,2610	32,5400	32,5100
CH ₄	1,6800	1,5400	1,4100	1,4200
TEMPERATURA DA CORRENTE MEOH_F (°C)				
MEOH_F	-18,73	-18,24	-27,82	-18,85

Tabela 4.17 Comparação dos Resultados para a Coluna de Absorção AMI_37

	PLANTA PILOTO	PROGRAMA MCOMP	SIMULADOR	
			AMI_37SC	AMI_37
COMPOSIÇÃO DA CORRENTE GAS_PURO (% MOLAR)				
CO ₂	0,6400	0,7940	0,5100	0,6300
H ₂ S	0,0410	0,0020	0,0100	0,0100
COS	0,0030	traços	0,0000	0,0000
MEOH	traços	0,0140	0,0100	0,0100
H ₂	54,9600	52,5680	53,5500	53,4700
CO	23,9200	25,1310	25,5600	25,5100
N ₂	19,3000	20,0310	19,1100	19,1100
CH ₄	1,6000	1,4600	1,2500	1,2600
TEMPERATURA DA CORRENTE MEOH_F (°C)				
MEOH_F	-13,78	-13,21	-28,59	-13,81

Podemos observar que nos resultados das simulações onde o balanço energético foi corrigido: AMI_30, AMI_35, AMI_36 e AMI_37, o simulador mostra um bom desempenho na predição da composição da corrente gasosa e temperatura do metanol. Podemos concluir portanto, que a simulação da coluna de absorção para este tipo de sistema, é satisfatória.

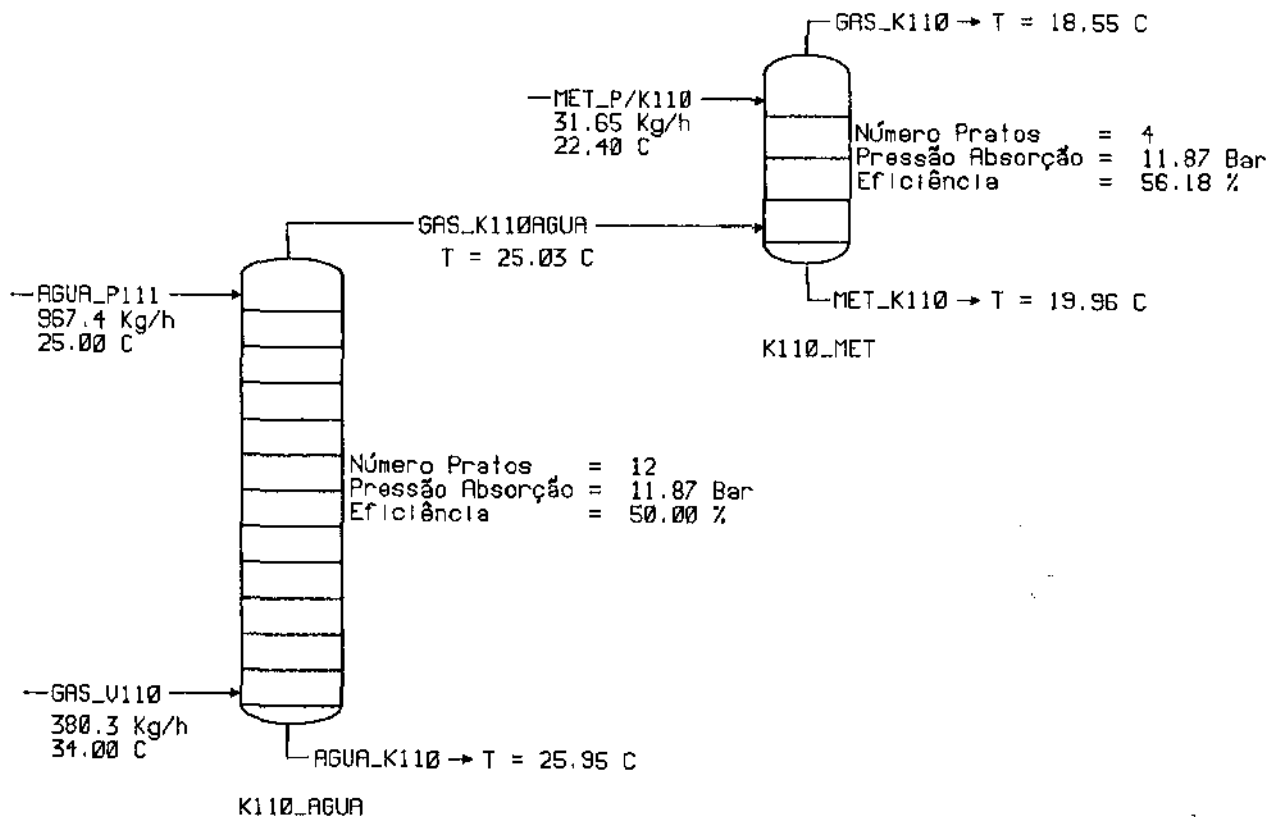
Quando verificamos os resultados das simulações das colunas que não tiveram correção do balanço energético: AMI_30SC, AMI_35SC, AMI_36SC e AMI_37SC, notamos que a temperatura do metanol obtida pelo simulador é totalmente diferente da temperatura real, o que nos demonstra a necessidade de correção do balanço energético para a coluna.

4.5.2 Dados Obtidos da Planta de CO

Através dos dados coletados na Planta de CO, a simulação do processo de purificação pode ser realizada, e os resultados obtidos comparados com os dados da Planta.

As informações necessárias para a simulação (eficiência, HETP e correção do balanço energético para a coluna K111), são as mesmas descritas anteriormente. Nas Figuras 4.18 a 4.22 apresentamos o resultado da simulação do Processo de Purificação de CO. No Apêndice A encontra-se a definição da nomenclatura utilizada nas correntes das Figuras 4.18 a 4.22. Nem todos os equipamentos estão representados nas Figuras. A simulação completa da Planta de CO encontra-se no Apêndice B.

Devido a falta de informações sobre o balanço de massa deste processo, não foi possível analisar de forma quantitativa, os resultados de composição obtidos pelo simulador nas diversas colunas. No entanto, podemos observar que a composição do gás puro (corrente CO_PURO), encontra-se próximo das especificações descritas no item 3.2.



COMP. (<% Molar)	GAS_U110	GAS_K110AGUA	GAS_K110	MET_K110
H2	0.6900	0.6900	0.6800	0.0000
H2O	0.0000	0.3000	0.0100	4.4200
N2	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
O2	0.2000	0.2000	0.2000	0.0000
CO	96.7500	97.0000	96.4400	0.1900
CO2	0.4000	0.4000	0.3900	0.0400
H2S	0.3100	0.2900	0.2900	0.0800
CS2	0.0900	0.0600	0.0200	0.8600
COS	0.0600	0.0600	0.0600	0.0300
MEOH	0.0000	0.0000	0.9100	94.3700
HCN	0.2500	0.0000	0.0000	0.0100
NH3	0.2500	0.0000	0.0000	0.0000

Figura 4.18 Simulação da Coluna de Absorção K110

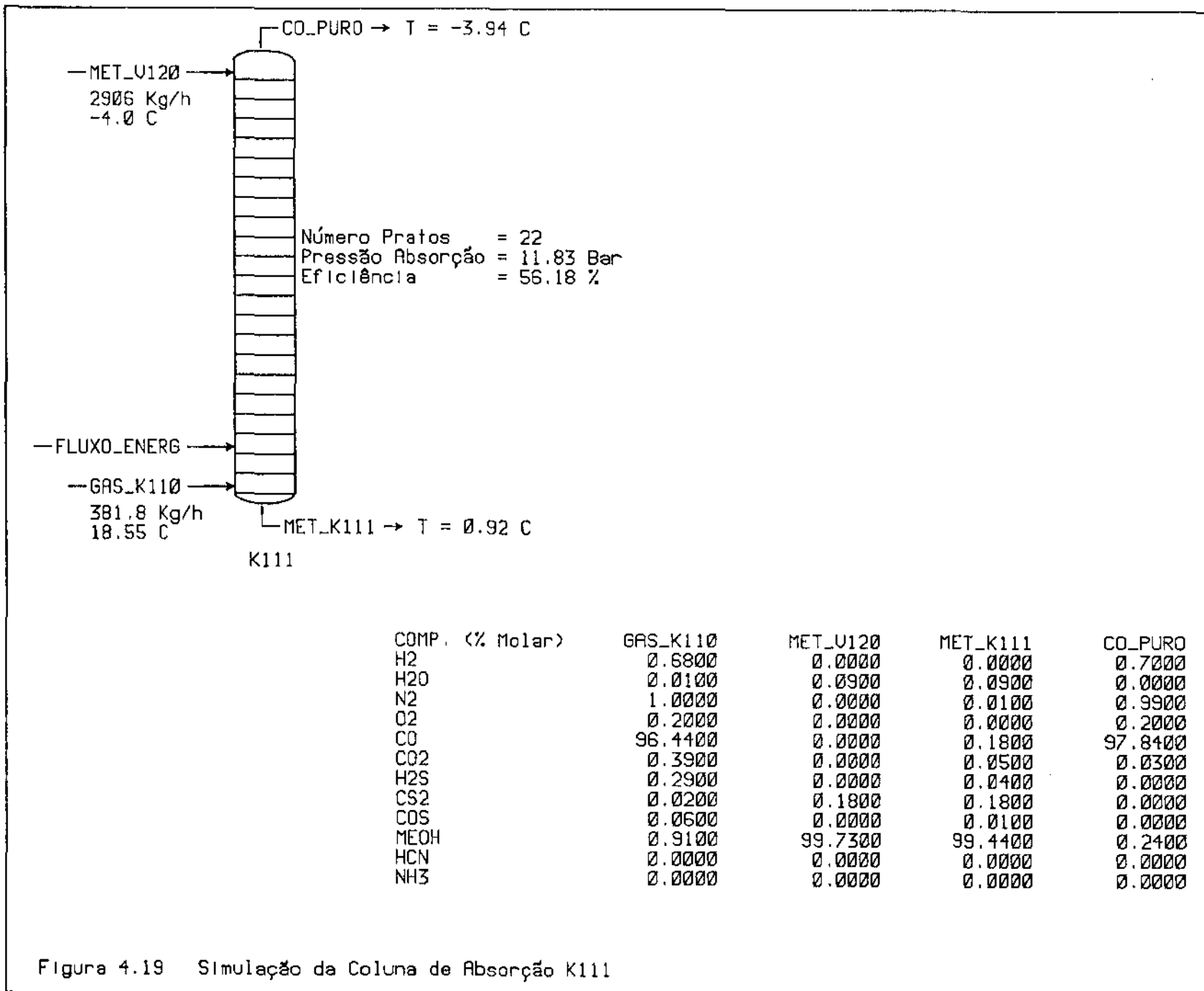


Figura 4.19 Simulação da Coluna de Absorção K111

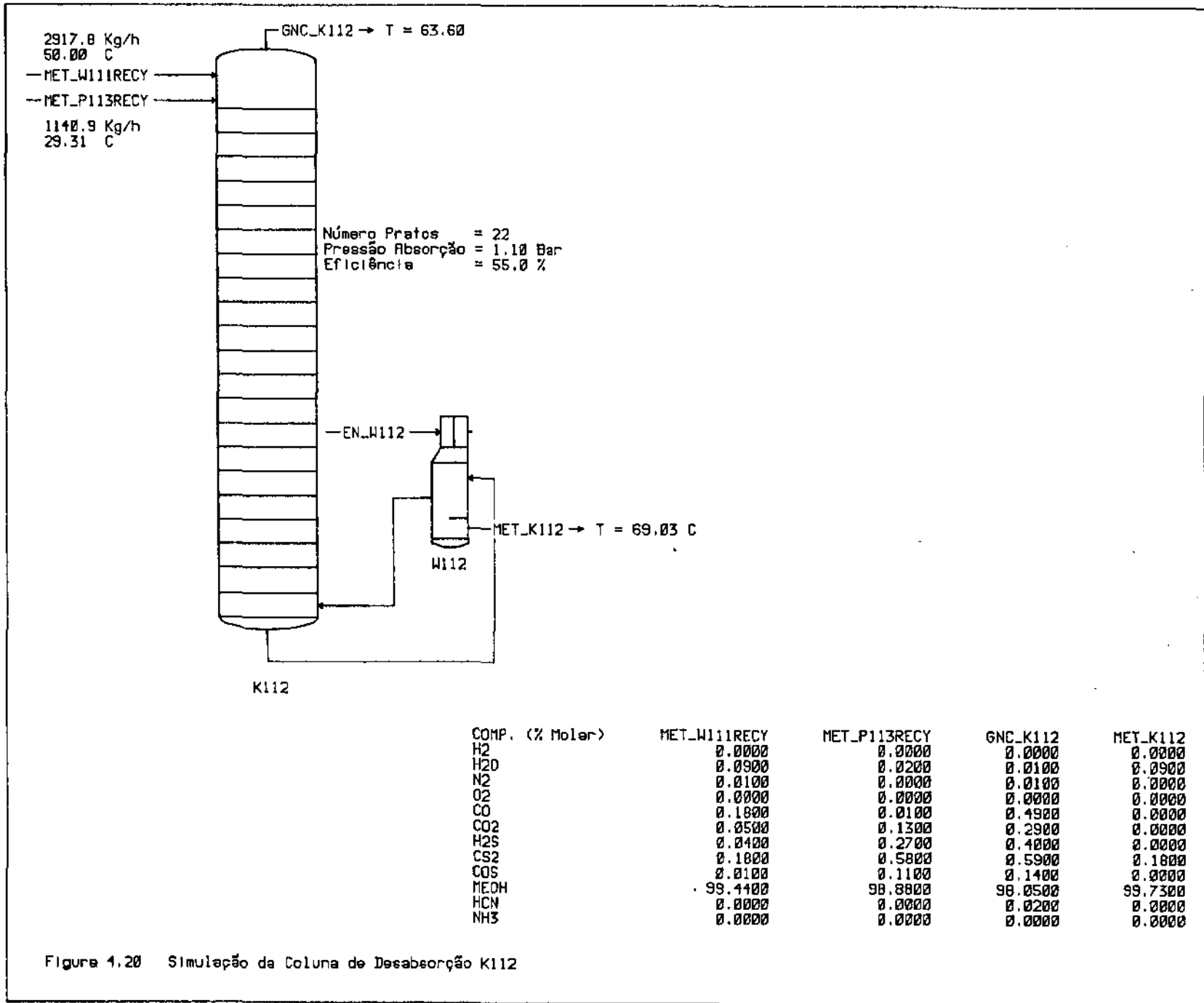
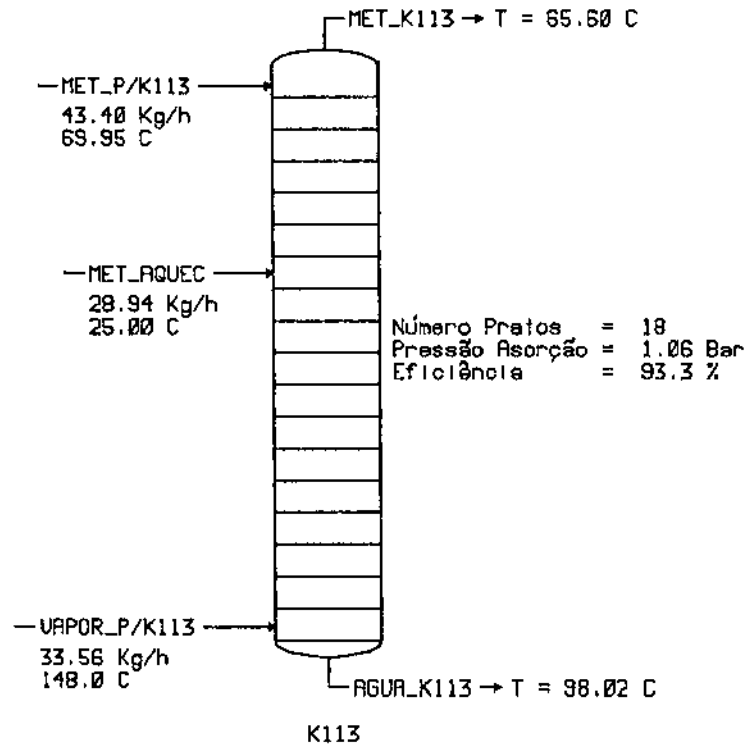


Figura 4.20 Simulação da Coluna de Desabsorção K112



COMP. (% Molar)	MET_P/K113	MET_AQUEC	MET_K113	AGUA_K113
H2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H2O	0.0900	4.4200	0.1100	97.9400
N2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
O2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO	0.0000	0.1900	0.0800	0.0000
CO2	0.0000	0.0400	0.0200	0.0000
H2S	0.0000	0.0800	0.0300	0.0000
CS2	0.1800	0.8600	0.4700	0.0000
COS	0.0000	0.0300	0.0100	0.0000
MEOH	99.7300	94.3700	99.2800	2.0600
HCN	0.0000	0.0100	0.0000	0.0000
NH3	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Figura 4.21 Simulação da Coluna de Destilação K113

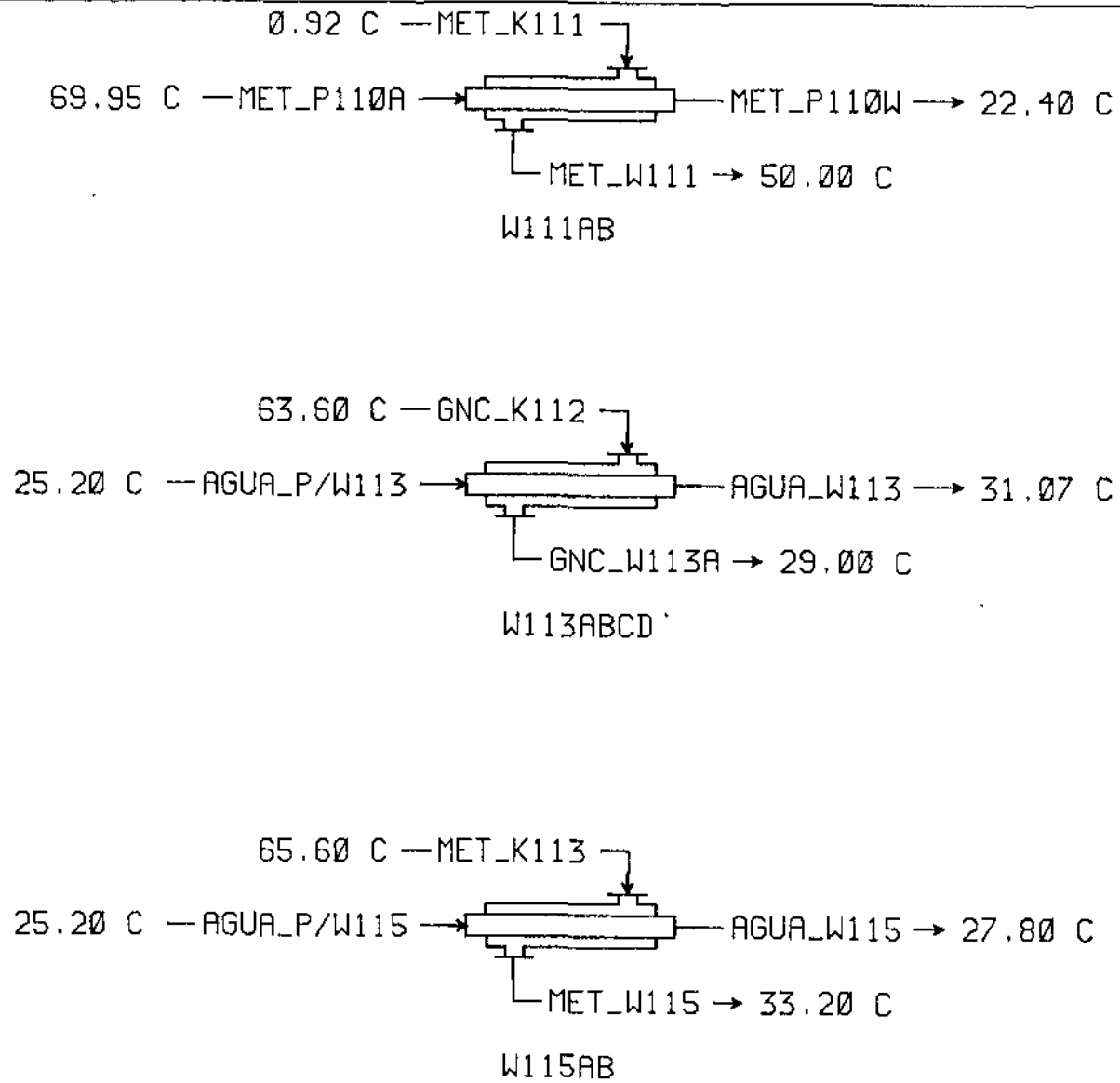


Figura 4.22 Simulação dos Trocadores de Calor

Na Tabela 4.18 apresentamos a temperatura para diversas correntes obtidas pelo simulador e coletadas na Planta de CO. Podemos observar que as diferenças entre as temperaturas preditas e reais são pequenas, o que representa a boa performance do simulador para este processo.

Tabela 4.18 Dados de temperatura da Planta de CO, e obtidas pelo Simulador

NOME DA CORRENTE	TEMPERATURA EM °C	
	PLANTA CO	SIMULADOR
GAS_K110AGUA	25,00	25,03
AGUA_K110	28,00	25,95
GAS_K110	18,40	18,55
MET_K110	21,00	19,96
MET_K111	2,00	0,92
GNC_K112	63,60	63,59
MET_K112	69,00	69,03
MET_P110W	22,50	22,40
MET_K113	69,60	65,60
AGUA_K113	98,00	98,02

A temperatura do metanol que sai do fundo da coluna K111, obtida pelo simulador e apresentada na Tabela 4.18, é o resultado com a correção da coluna de absorção K111. Se a correção do balanço energético da coluna K111 não fosse efetuado, a temperatura obtida pelo simulador seria de -2,55 °C. Com a mudança desta temperatura todo o balanço energético do Processo de Purificação ficaria alterado.

Podemos concluir portanto, que a simulação do Processo de Purificação do CO resulta em dados confiáveis, os quais podem ser analisados e utilizados na melhoria do processo. No próximo capítulo a simulação do Processo de Purificação é utilizada na pesquisa de novos parâmetros de operação.

Capítulo 5

ESTUDO PARAMÉTRICO DA PURIFICAÇÃO DE MONÓXIDO DE CARBONO

Neste capítulo apresentamos os resultados do estudo paramétrico da purificação de Monóxido de Carbono. Os processos de absorção, desabsorção e destilação são estudados detalhadamente. A influência que a desabsorção possui sobre o processo de absorção também é analisada.

5.1 Absorção dos Gases Ácidos

O estudo paramétrico desta etapa do processo de Purificação de CO consiste em avaliar como a pressão de absorção, a temperatura e vazão mássica do metanol, e a temperatura do gás para a coluna K111, influenciam a absorção dos gases ácidos. Também mudamos a vazão mássica de água e metanol para a coluna K110, a fim de avaliar o comportamento da coluna na remoção do HCN, NH₃ e secagem do gás.

Devido ao baixo conteúdo de gases ácidos presentes na gaseificação do coque de petróleo¹, o qual torna o estudo paramétrico de difícil análise, criamos uma corrente de gás com maior conteúdo de contaminantes.

Na Figura 5.1 é apresentado um modelo padrão de simulação do processo de absorção de gases ácidos. Através deste modelo foi realizado o estudo paramétrico da absorção de gases ácidos, o qual é descrito nos próximos itens. A definição da nomenclatura utilizada na Figura 5.1 encontra-se no Apêndice A.

5.1.1 Pressão de Absorção da K111

A Tabela 5.1 apresenta a composição da corrente do gás purificado (CO_PURO), sob diversas pressões da coluna K111. Os componentes H₂O, H₂S, CS₂, COS, HCN e NH₃ estão ausentes da corrente do gás purificado em todas as simulações, e portanto, não são apresentados na tabela.

Tabela 5.1 Influência da Pressão no Processo de Absorção

PRESSÃO DA K111	% MOLAR DOS COMPONENTES DA CORRENTE CO_PURO					
	H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	MEOH
4 Bar	3,20	1,27	0,72	78,52	15,53	0,69
6 Bar	3,38	1,33	0,76	82,65	11,41	0,48
8 Bar	3,56	1,39	0,79	87,06	6,83	0,36
10 Bar	3,75	1,46	0,82	91,51	2,18	0,28
12 Bar	3,83	1,48	0,83	93,34	0,28	0,24
14 Bar	3,84	1,47	0,83	93,59	0,06	0,21
16 Bar	3,85	1,47	0,82	93,66	0,02	0,19
18 Bar	3,86	1,46	0,81	93,69	0,01	0,17
20 Bar	3,86	1,45	0,80	93,72	0,00	0,16
22 Bar	3,87	1,44	0,80	93,74	0,00	0,15

¹Vide item 3.3 - Unidade de Gaseificação

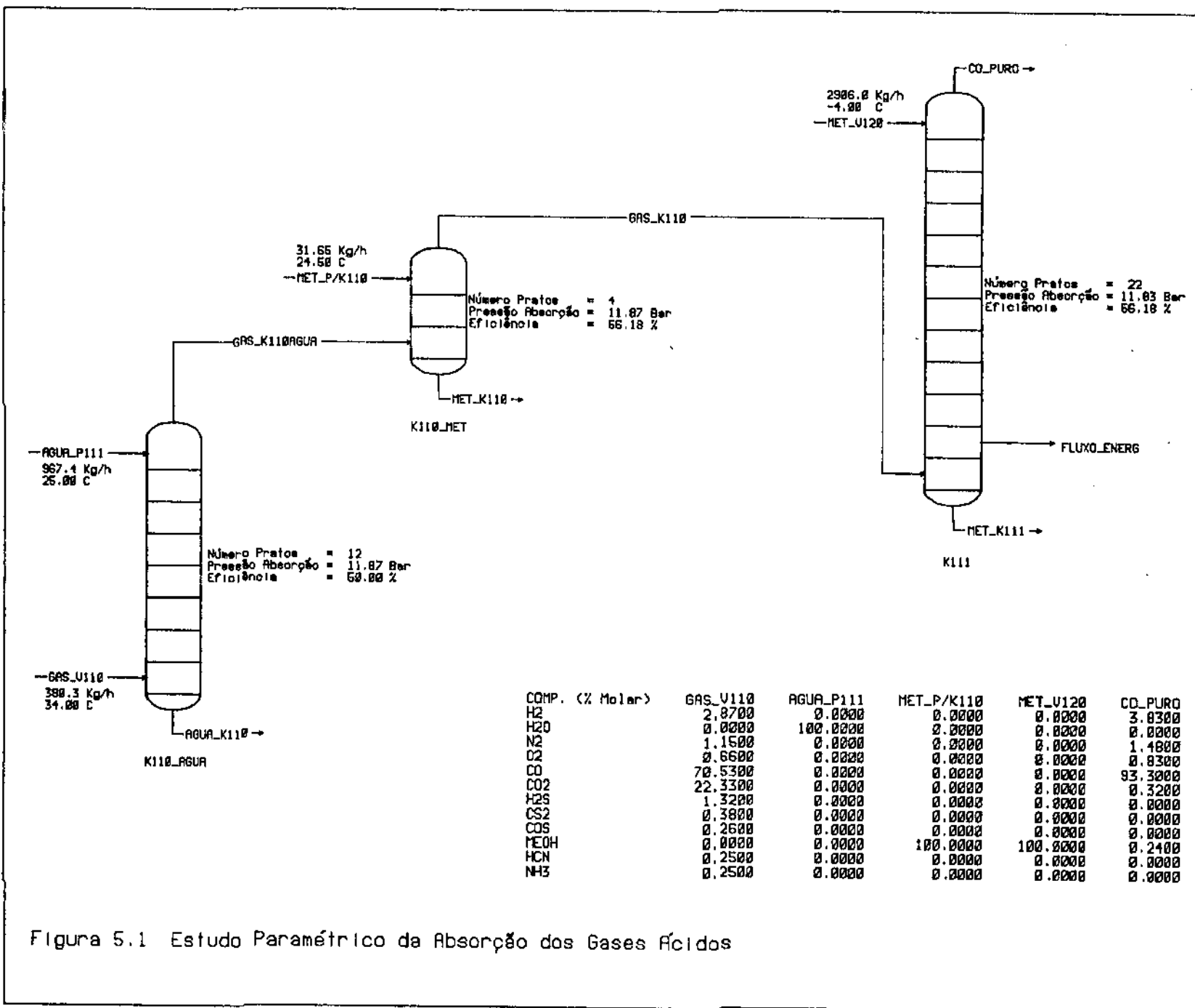


Figura 5.1 Estudo Paramétrico da Absorção dos Gases Ácidos

A Figura 5.2 mostra o efeito da pressão sobre a absorção do CO₂. Podemos observar que para pressões de operação inferiores a 13 Bar, o nível do contaminante CO₂ aumenta sensivelmente, o qual é indesejável no processo de purificação.

A Figura 5.3 mostra o efeito da pressão sobre a composição do metanol na fase gasosa. Podemos observar que para pressões inferiores a 13 Bar, o nível de metanol na fase gasosa também aumenta sensivelmente.

5.1.2 Vazão Mássica de Metanol Para a Coluna K111

A Tabela 5.2 apresenta a composição da corrente do gás purificado (CO_PURO), em função de várias vazões mássicas de metanol (MET_V120). Os componentes H₂O, H₂S, CS₂, COS, HCN e NH₃ estão ausentes da corrente do gás purificado em todas as simulações, e portanto, não são apresentados na tabela.

Tabela 5.2 Influência da Vazão do Metanol Para a K111 no Processo de Absorção

VAZÃO DE MEOH Kg/h	% MOLAR DOS COMPONENTES DA CORRENTE CO_PURO					
	H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	MEOH
1100	3,30	1,30	0,74	80,85	13,50	0,28
1500	3,42	1,35	0,76	83,76	10,43	0,28
1900	3,56	1,39	0,79	86,97	7,03	0,26
2300	3,70	1,44	0,81	90,40	3,40	0,25
2700	3,81	1,48	0,83	92,90	0,75	0,24
3100	3,83	1,48	0,83	93,46	0,16	0,24
3500	3,84	1,47	0,83	93,57	0,05	0,24
3900	3,85	1,47	0,82	93,61	0,02	0,24
4300	3,85	1,46	0,81	93,63	0,01	0,24
4700	3,86	1,45	0,81	93,64	0,00	0,24

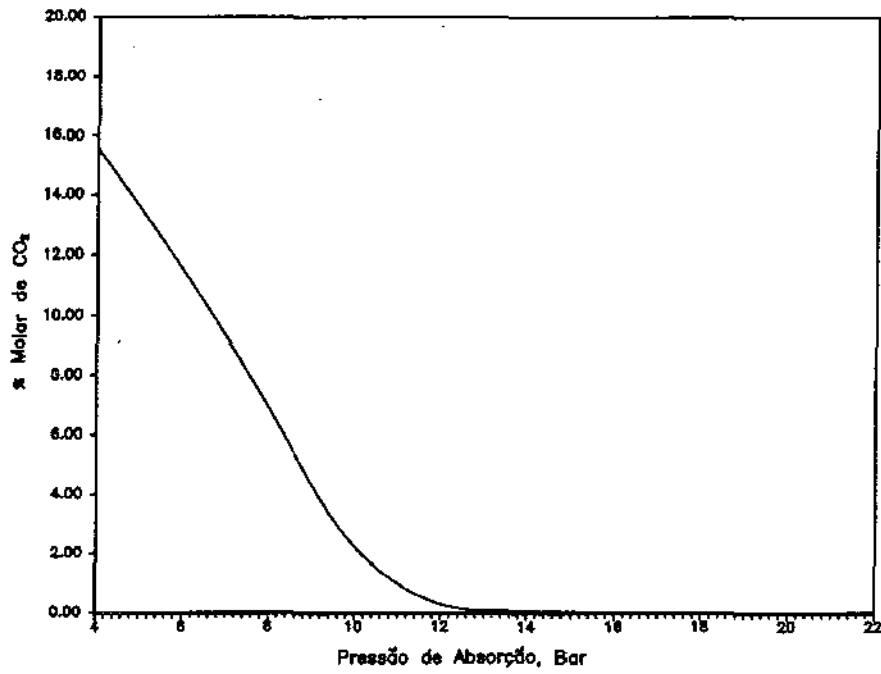


Figura 5.2 Influência da Pressão na Absorção de CO₂

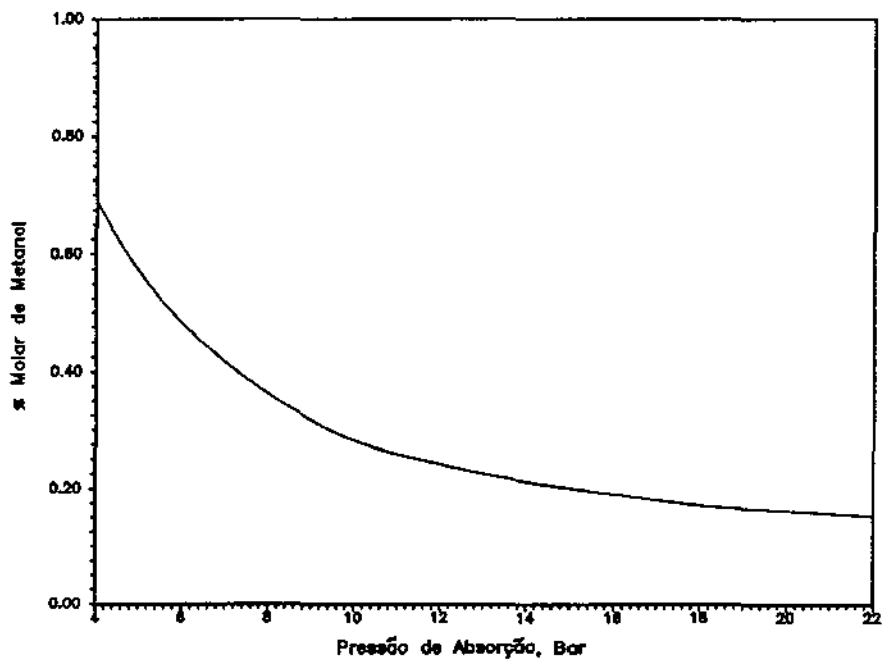


Figura 5.3 Influência da Pressão na % Molar de Metanol na Fase Gasosa

A Figura 5.4 mostra o efeito da vazão mássica de metanol sobre a absorção do CO₂. Podemos observar que para vazões mássicas inferiores a 3300 Kg/h, o nível do contaminante CO₂ aumenta sensivelmente.

Na Figura 5.5 é ilustrado o comportamento da composição do metanol na fase gasosa em função da vazão de metanol. Podemos observar que não há mudanças significativas na composição do metanol na fase gasosa quando a vazão de metanol é modificada.

5.1.3 Temperatura do Metanol Para a Coluna K111

A Tabela 5.3 apresenta a composição da corrente do gás purificado (CO_PURO), em função de várias temperaturas do metanol (MET_V120). Os componentes H₂O, H₂S, CS₂, COS, HCN e NH₃ estão ausentes da corrente do gás purificado em todas as simulações, e portanto, não são apresentados na tabela.

Tabela 5.3 Influência da Temperatura do Metanol Para a K111 no Processo de Absorção

TEMP. DO MEOH	% MOLAR DOS COMPONENTES DA CORRENTE CO_PURO					
	H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	MEOH
4 °C	3,77	1,46	0,82	92,03	1,50	0,41
2 °C	3,79	1,47	0,83	92,49	1,06	0,36
0 °C	3,81	1,47	0,83	92,87	0,71	0,32
-2 °C	3,82	1,48	0,83	93,13	0,47	0,27
-4 °C	3,83	1,48	0,83	93,31	0,32	0,24
-6 °C	3,83	1,48	0,83	93,44	0,21	0,21
-8 °C	3,84	1,48	0,83	93,53	0,14	0,18
-10 °C	3,84	1,48	0,83	93,59	0,10	0,16
-12 °C	3,84	1,48	0,83	93,64	0,07	0,13
-14 °C	3,84	1,48	0,83	93,68	0,05	0,12
-16 °C	3,84	1,48	0,83	93,71	0,03	0,10
-18 °C	3,84	1,48	0,83	93,73	0,02	0,09
-20 °C	3,84	1,48	0,83	93,75	0,02	0,07

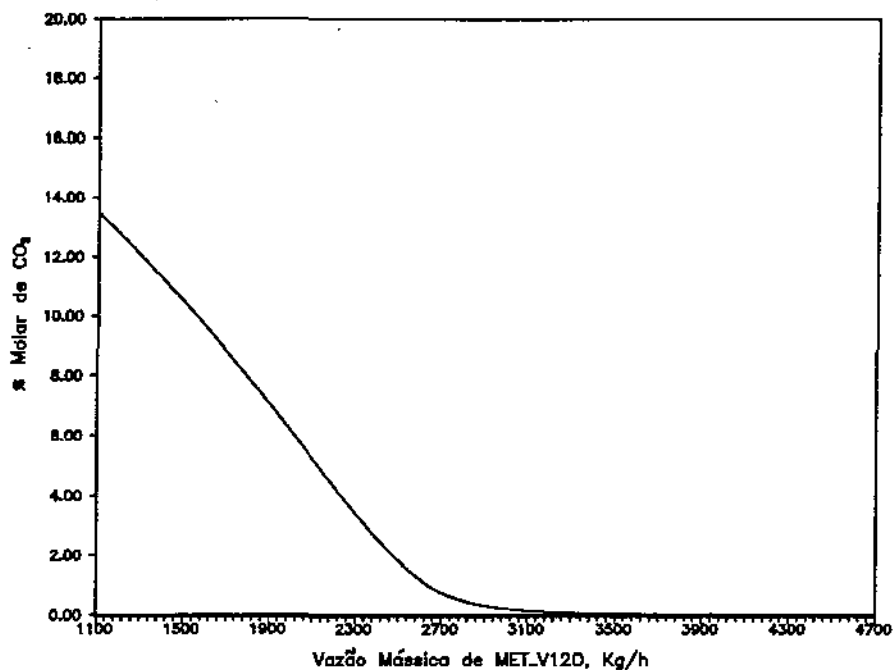


Figura 5.4 influência da Vazão Mássica de Metanol na Absorção de CO₂

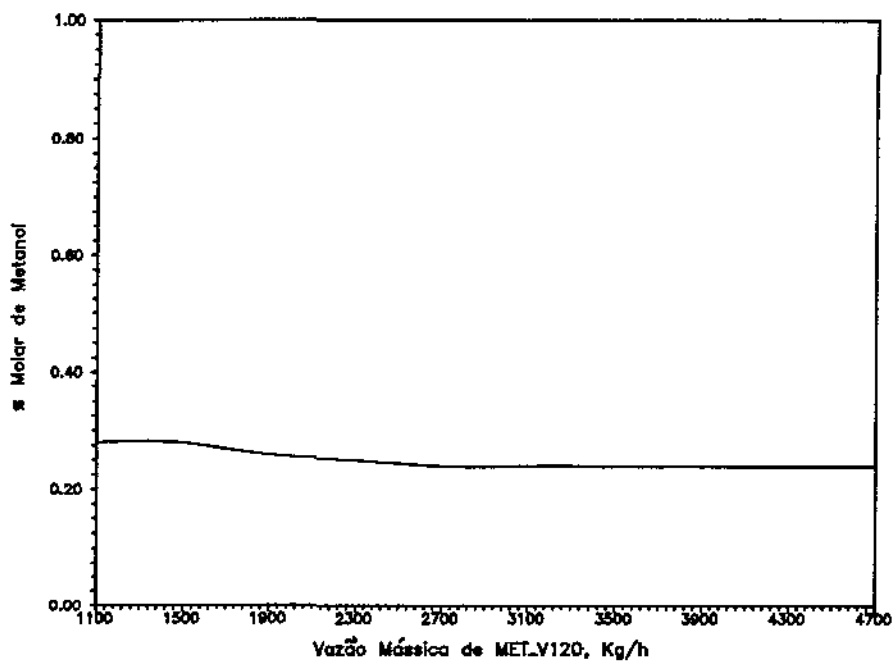


Figura 5.5 Influência da Vazão Mássica de Metanol no % Molar de Metanol na Fase Gasosa

A Figura 5.6 mostra o efeito da temperatura do metanol sobre a absorção do CO₂. Podemos observar que para temperaturas do metanol inferiores a -10 °C, o nível do contaminante CO₂ aumenta sensivelmente.

Na Figura 5.7 é ilustrado o comportamento da composição do metanol na fase gasosa em função da temperatura do metanol. Podemos observar que o nível de metanol na fase gasosa aumenta com o aumento da temperatura.

5.1.4 Temperatura do Gás Para a Coluna K111

A Tabela 5.4 apresenta a composição da corrente do gás purificado (CO_PURO), em função de várias temperaturas do gás (GAS_K110). Os componentes H₂O, H₂S, CS₂, COS, HCN e NH₃ estão ausentes da corrente do gás purificado em todas as simulações, e portanto, não são apresentados na tabela.

Tabela 5.4 Influência da Temperatura do Gás no Processo de Absorção

TEMP. DO GÁS	% MOLAR DOS COMPONENTES DA CORRENTE CO_PURO					
	H ₂	N ₂	O ₂	CO	CO ₂	MEOH
9 °C	3,83	1,48	0,83	93,36	0,27	0,24
12 °C	3,83	1,48	0,83	93,35	0,28	0,24
15 °C	3,83	1,48	0,83	93,33	0,29	0,24
18 °C	3,83	1,48	0,83	93,32	0,30	0,24
20 °C	3,83	1,48	0,83	93,31	0,32	0,24
23 °C	3,83	1,48	0,83	93,29	0,33	0,24

As temperaturas apresentadas na Tabela 5.4 para a corrente de gás, foram obtidas com a variação da temperatura da água que vai para a coluna K110 (AGUA_P111). Os valores utilizados para a temperatura da água foram: 5, 10, 15, 20, 25 e 30 °C.

A Figura 5.8 mostra o efeito da temperatura do gás sobre a absorção do CO₂. Podemos observar que não há mudanças sensíveis na absorção do CO₂. A pequena quantidade de calor

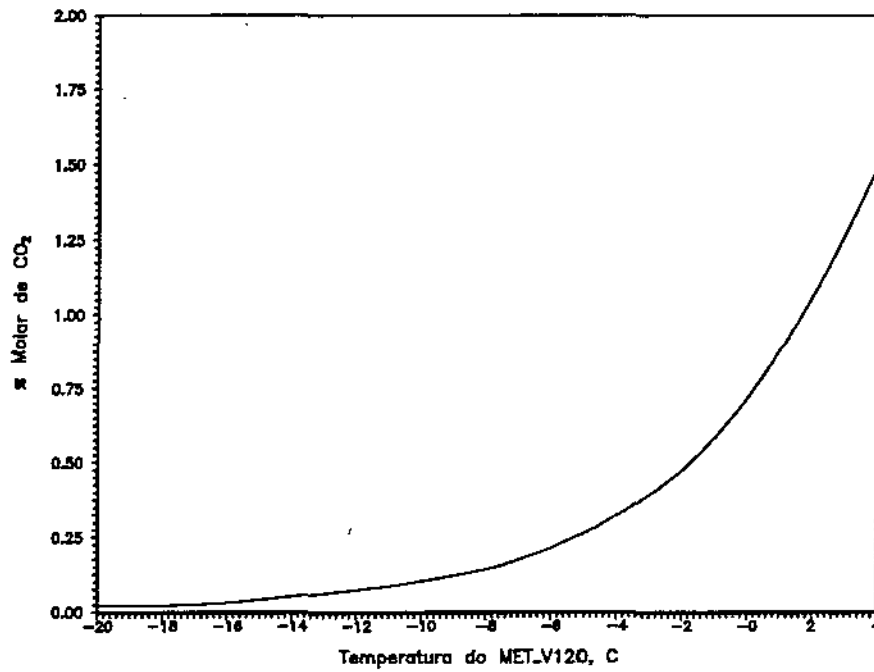


Figura 5.6 Influência da Temperatura do Metanol na Absorção de CO₂

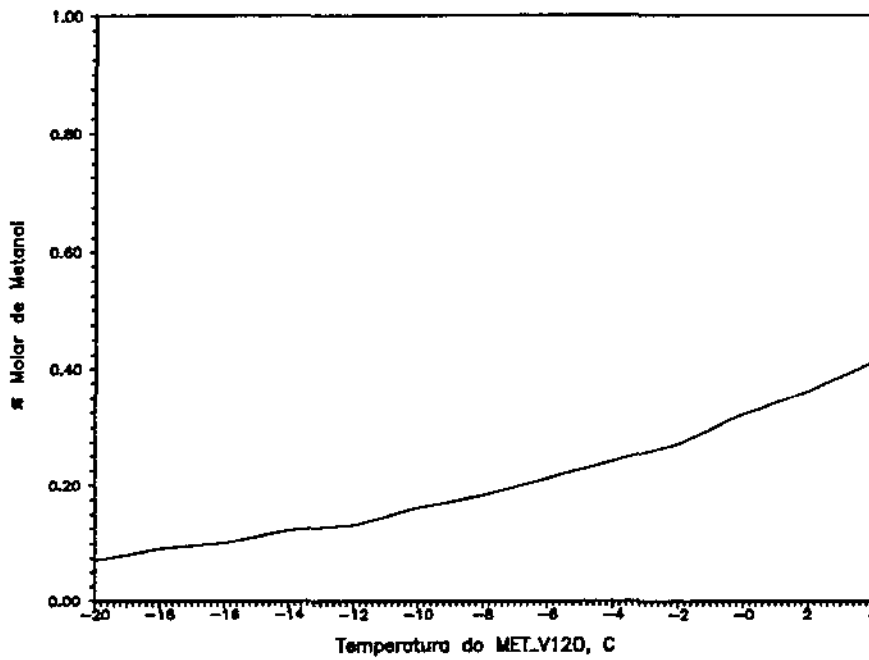


Figura 5.7 Influência da Temperatura do Metanol no % Molar de Metanol na Fase Gasosa

sensível associada a corrente de gás explica a insensibilidade da absorção de CO₂ na mudança deste parâmetro.

A Figura 5.9 mostra o efeito da temperatura do gás sobre a composição do metanol na fase gasosa. Podemos observar que não há mudanças no nível de metanol na fase gasosa.

5.1.5 Coluna K110

A Tabela 5.5 apresenta a composição da H₂O, NH₃ e HCN da corrente GAS_K110AGUA, em função de várias vazões mássicas de água (AGUA_P111). A composição dos outros componentes não é necessário ser apresentada, já que a função desta coluna é somente remover impurezas como NH₃ e HCN².

Tabela 5.5 Influência da Vazão de Água na Remoção de NH₃ e HCN da Corrente de Gás (GAS_V110)

VAZÃO DE ÁGUA	% MOLAR DOS COMPONENTES (GAS_K110AGUA)		
	H ₂ O	HCN	NH ₃
300 Kg/h	0,31	0,02	0,00
500 Kg/h	0,31	0,00	0,00
700 Kg/h	0,31	0,00	0,00
900 Kg/h	0,31	0,00	0,00
1100 Kg/h	0,31	0,00	0,00
1300 Kg/h	0,31	0,00	0,00
1500 Kg/h	0,31	0,00	0,00
1700 Kg/h	0,31	0,00	0,00
1900 Kg/h	0,31	0,00	0,00

Podemos verificar através da tabela acima, que vazões mássicas superiores a 500 Kg/h removem completamente o NH₃ e HCN da corrente de gás. Notamos também que a quantidade de água arrastada pela corrente de gás não se modifica com a mudança na vazão de água.

²Vide item 3.4.1 - Absorção dos Gases Ácidos

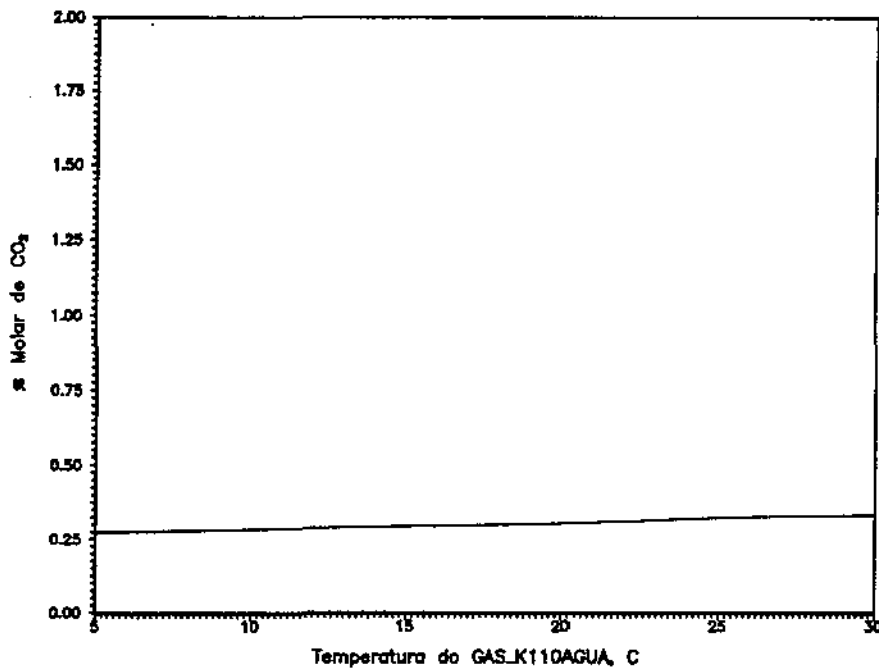


Figura 5.8 Influência da Temperatura do Gás na Absorção de CO₂

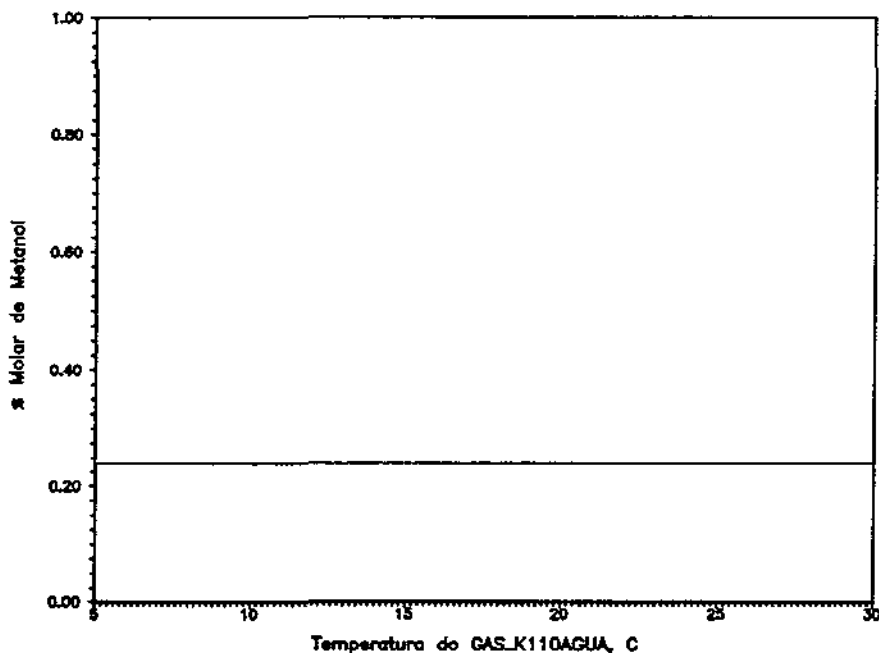


Figura 5.9 Influência da Temperatura do Gás na % Molar de Metanol na Fase Gasosa

86.4971

A Tabela 5.6 apresenta a composição da H₂O e do metanol na corrente GAS_K110, em função de várias vazões mássicas de metanol (MET_P/K110). A composição dos outros componentes não é necessário ser apresentada, já que a função desta coluna é somente remover a água do gás³.

Tabela 5.6 Influência da Vazão do Metanol na Remoção de Água da Corrente de Gás (GAS K110AGUA)

VAZÃO MÁSSICA DO METANOL	% MOLAR DOS COMPONENTES (GAS_K110)	
	H ₂ O	Metanol
10 Kg/h	0,01	0,91
20 Kg/h	0,01	0,97
25 Kg/h	0,01	0,98
30 Kg/h	0,01	0,99
35 Kg/h	0,01	1,01
40 Kg/h	0,01	1,02
45 Kg/h	0,01	1,03
50 Kg/h	0,01	1,04

Podemos verificar através da tabela acima, que vazões mássicas superiores a 10 Kg/h de metanol, removem quase que totalmente a água da corrente de gás.

³Vide item 3.4.1 - Absorção dos Gases Ácidos

5.2 Efeito da Operação de Desabsorção Sobre a Absorção

Em qualquer processo onde a absorção e desabsorção são utilizadas para remover um soluto e regenerar o solvente, uma operação pode afetar a outra significativamente. Isto é especialmente verdadeiro em situações onde a desabsorção não regenera o solvente eficientemente e este é utilizado na alimentação da absorção. A presença de qualquer componente no solvente, o qual deve ser removido na absorção, reduz a força motriz para a transferência de massa e portanto diminui a recuperação daquele componente.

A Tabela 5.7 apresenta a composição do gás ácido na corrente CO_PURO, em função da contaminação do metanol de purificação (MET_V120) pelo próprio gás ácido.

Tabela 5.7 Influência da Presença do Gás Ácido no Metanol Sobre o Processo de Absorção⁴

% MOLAR DO GÁS ÁCIDO NO METANOL	% MOLAR DOS COMPONENTES NA CORRENTE CO_PURO			
	CO ₂	H ₂ S	COS	CS ₂
0,0	0,32	0,00	0,00	0,00
0,1	1,01	0,24	0,11	0,00
0,2	1,71	0,47	0,23	0,00
0,3	2,40	0,70	0,34	0,00
0,4	3,11	0,94	0,45	0,01
0,5	3,80	1,17	0,56	0,01
0,6	4,50	1,40	0,68	0,01

As Figuras 5.10 a 5.12 mostram que a presença de gás ácido no metanol de purificação, prejudica a absorção, dificultando a remoção do gás ácido que está presente na corrente de metanol.

Como descrito anteriormente, a absorção dos gases ácidos está relacionada diretamente com a sua solubilidade no

⁴representa a contaminação do metanol somente por um gás ácido, isto é, para uma contaminação de 0,2 % molar de CO₂ no metanol, a composição do CO₂ na corrente CO_PURO será de 1,71.

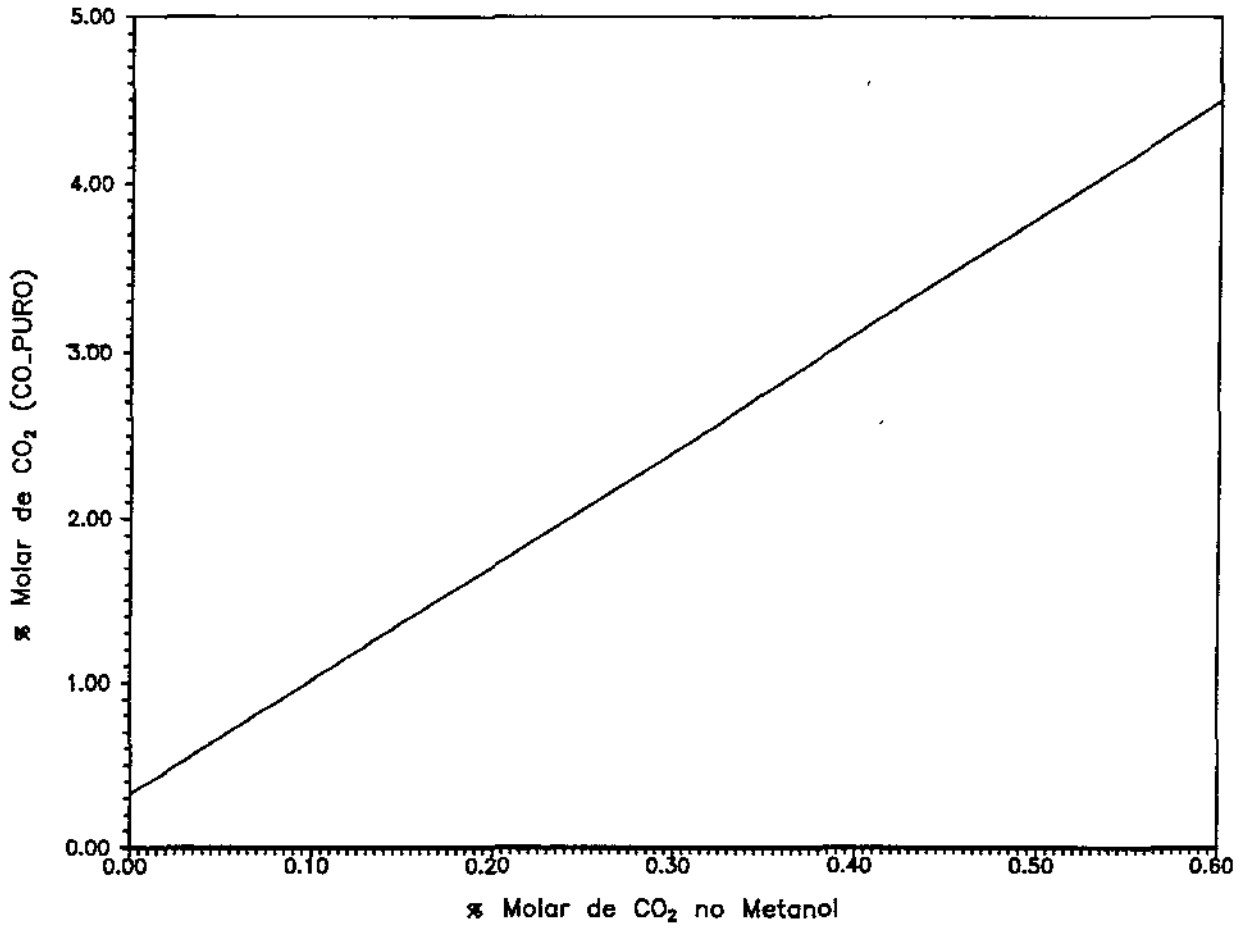


Figura 5.10 Efeito da Presença de CO₂ no Metanol, Sobre a Concentração de CO₂ no Gás de Saída (CO_PURO)

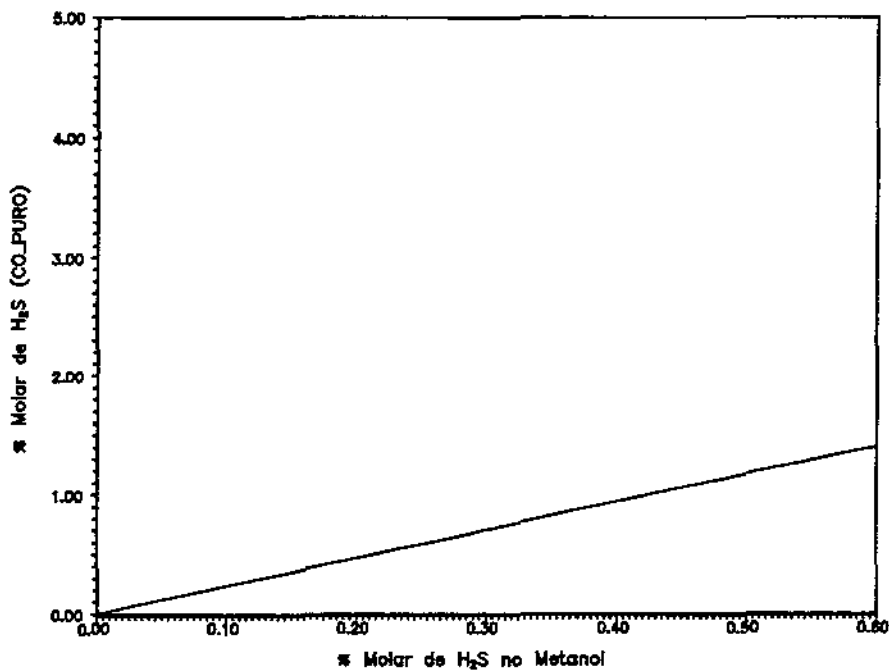


Figura 5.11 Efeito da Presença de H₂S no Metanol, Sobre a Concentração de H₂S no Gás de Saída (CO_PURO)

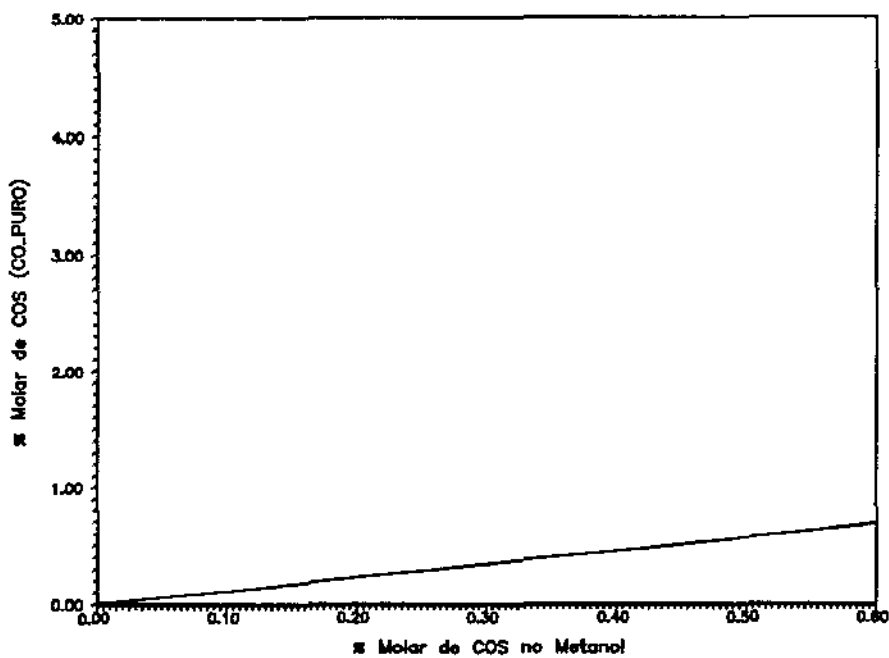


Figura 5.12 Efeito da Presença de COS no Metanol, Sobre a Concentração de COS no Gás de Saída (CO_PURO)

solvente de purificação⁵. Deste modo, podemos observar que o efeito da presença de cada gás ácido no metanol, e sua capacidade de prejudicar a absorção também está, isto é, o gás ácido que apresenta a maior solubilidade no metanol (o CO₂), é justamente o que mais prejudica a sua própria remoção.

Através da Tabela 5.7, podemos observar que a presença de CS₂ na corrente de metanol, não prejudica de forma sensível a absorção.

Testes realizados com a presença de todos os gases ácidos no metanol, mostra que o comportamento da absorção é semelhante aos resultados apresentados anteriormente. Portanto, concluímos que um contaminante não prejudica significativamente a absorção do outro.

A Tabela 5.8 apresenta a composição do CO₂ na corrente CO_PURO, em função da contaminação do metanol de purificação (MET_V120) com água.

Tabela 5.8 Influência da Presença de Água no Metanol Sobre o Processo de Absorção

% MOLAR DE ÁGUA NO METANOL	% MOLAR DO CO ₂ NA CORRENTE DE GÁS (CO_PURO)
0,0	0,32
0,1	0,32
0,3	0,34
0,6	0,35
0,9	0,36
1,2	0,38
1,5	0,40
2,0	0,43
2,5	0,47
3,0	0,51
4,0	0,60
5,0	0,70

⁵Vide item 2.2 - Processos de Purificação

A Figura 5.13 mostra a influência da presença de água no metanol sobre a absorção do CO_2 . Podemos observar que a contaminação do metanol com água, prejudica de forma gradativa, a absorção do CO_2 . Os gases ácidos restantes e a água encontram-se ausentes na corrente de gás em todas as simulações.

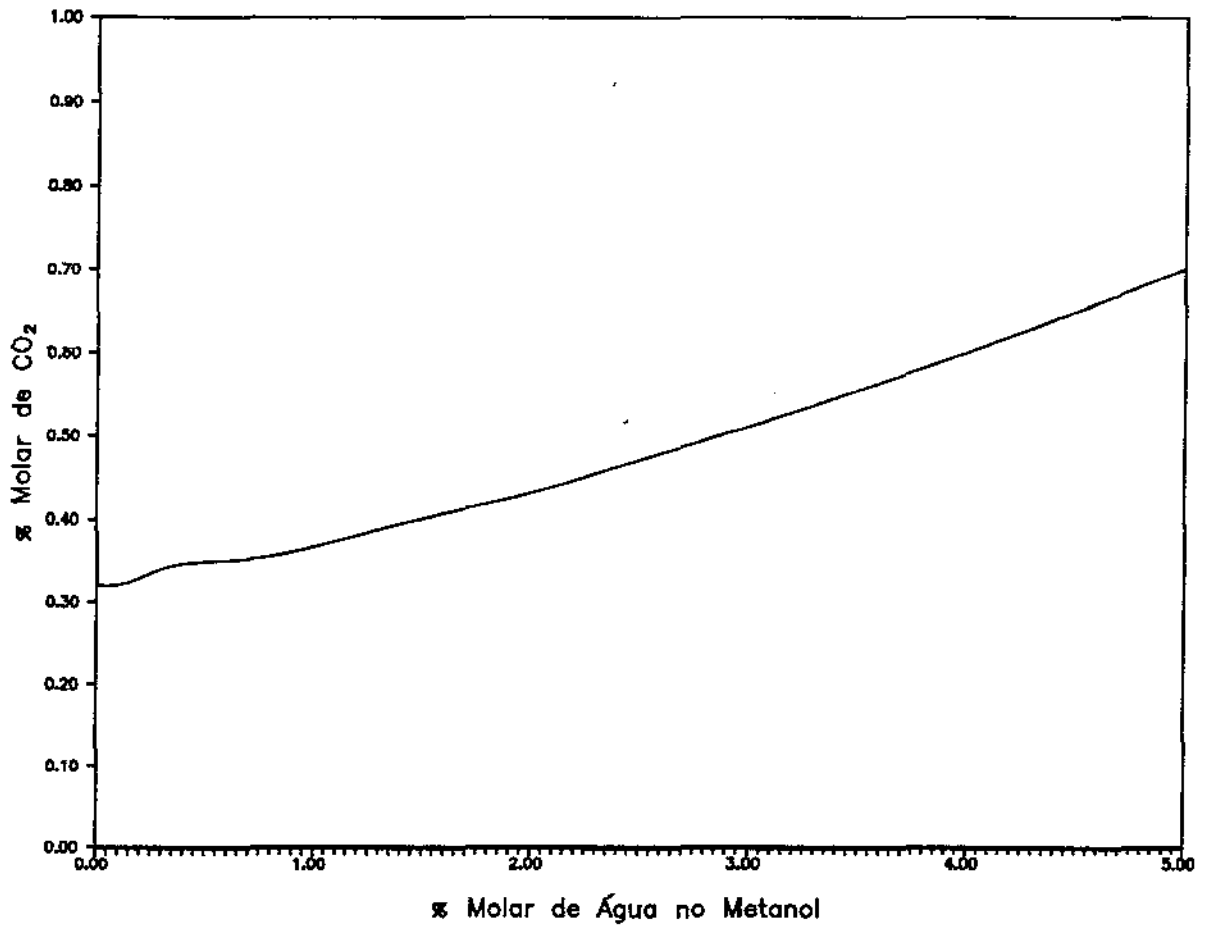


Figura 5.13 Efeito da Presença de H₂O no Metanol, Sobre a Concentração de CO₂ no Gás de Saída (CO_PURO)

5.3 Desabsorção dos Gases Ácidos

O estudo paramétrico desta etapa do processo de Purificação de CO consiste em avaliar como a temperatura do trocador W113 influencia a composição dos gases na saída do trocador, bem como avaliar o desempenho da coluna de desabsorção K112.

O resultado da simulação padrão do processo de absorção é utilizado na simulação do processo de desabsorção. A Figura 5.14 apresenta o modelo padrão da simulação do processo de desabsorção. A definição da nomenclatura utilizada nas correntes da Figura 5.14 encontra-se no Apêndice A. Através deste modelo foi realizado o estudo paramétrico da desabsorção de gases ácidos, a qual é descrita nos próximos itens.

5.3.1 Temperatura do Trocador W113

As Tabelas 5.9 e 5.10, apresentam a composição da corrente de gás GC_W113 e GNC_W113, em função de várias temperaturas de condensação obtidas no trocador W113. As Tabelas apresentam somente a composição dos componentes de interesse.

A Figura 5.15 mostra o efeito da temperatura sobre a composição dos gases ácidos CO₂ e H₂S da corrente GC_W113. Podemos observar que a composição destes dois gases ácidos e do COS diminuem com o aumento da temperatura. A composição do CS₂, como pode ser observado na Tabela 5.9, não é afetada sensivelmente pela mudança da temperatura.

A Figura 5.16 mostra o efeito da temperatura sobre a composição do metanol e CO da corrente GNC_W113. Podemos observar que a composição do metanol, ao contrário da composição do CO, aumenta com o aumento da temperatura.

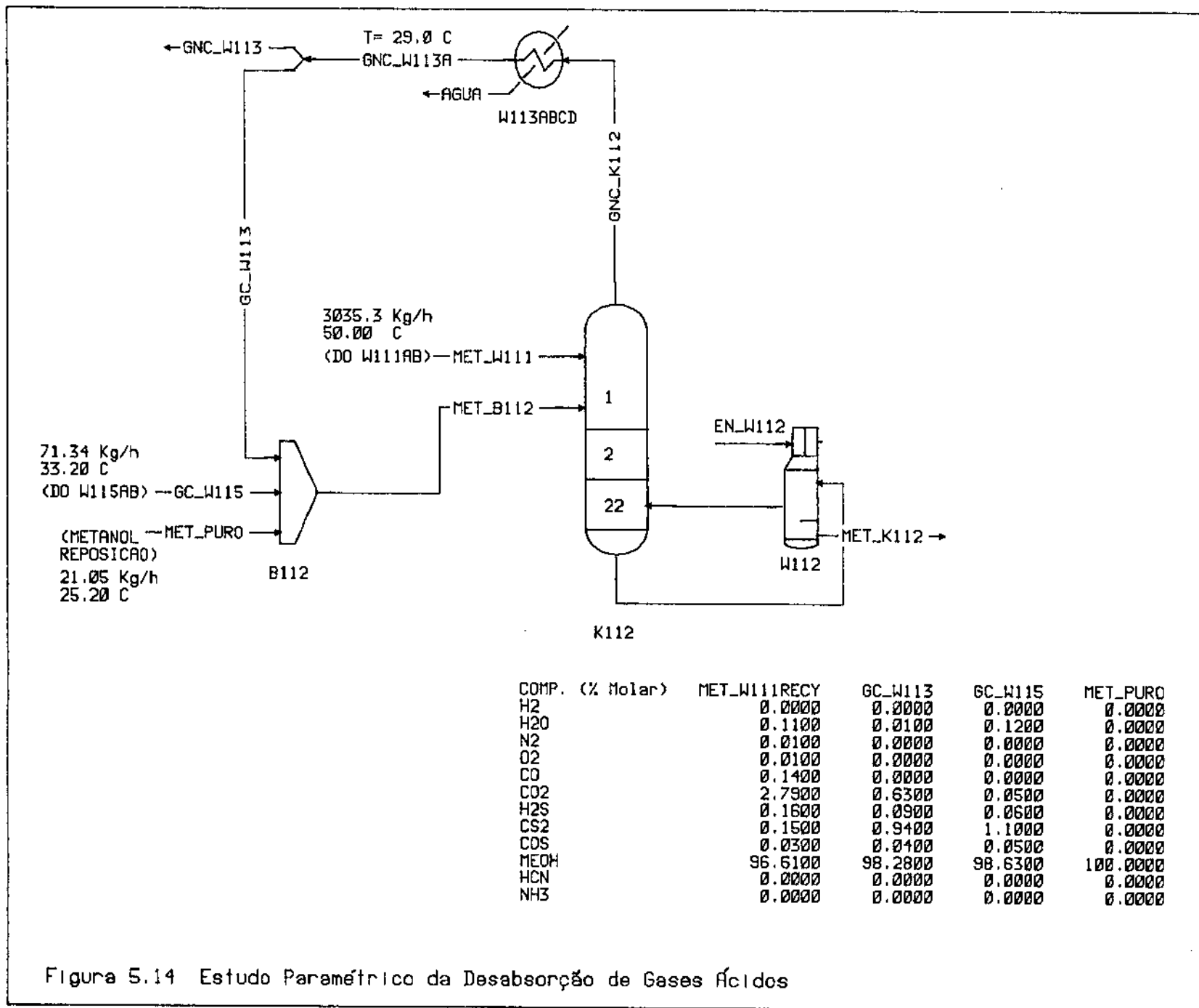


Figura 5.14 Estudo Paramétrico da Desabsorção de Gases Ácidos

Tabela 5.9 Influência da Temperatura Sobre a Composição da Corrente GC_W113

TEMP. DA CORRENTE GC_W113	% MOLAR DOS GASES ÁCIDOS NA CORRENTE GC_W113			
	CO ₂	H ₂ S	COS	CS ₂
-15 °C	1,65	0,20	0,07	0,94
-10 °C	1,47	0,18	0,07	0,95
-5 °C	1,32	0,17	0,06	0,95
0 °C	1,19	0,16	0,06	0,95
5 °C	1,07	0,15	0,06	0,95
10 °C	0,96	0,13	0,05	0,95
15 °C	0,87	0,12	0,05	0,94
20 °C	0,78	0,11	0,05	0,94
25 °C	0,70	0,10	0,04	0,94
30 °C	0,62	0,09	0,04	0,94
35 °C	0,54	0,08	0,04	0,93
40 °C	0,46	0,07	0,03	0,92
45 °C	0,38	0,06	0,03	0,92

Tabela 5.10 Influência da Temperatura Sobre a Composição da Corrente GNC_W113

TEMP. DA CORRENTE GNC_W113	% MOLAR DO METANOL E CO (GNC_W113)	
	METANOL	CO
-15 °C	0,98	5,97
-10 °C	1,44	5,63
-5 °C	2,08	5,35
0 °C	2,95	5,11
5 °C	4,11	4,88
10 °C	5,66	4,66
15 °C	7,69	4,45
20 °C	10,30	4,22
25 °C	13,65	3,97
30 °C	17,87	3,70
35 °C	23,15	3,39
40 °C	29,68	3,03
45 °C	37,68	2,63

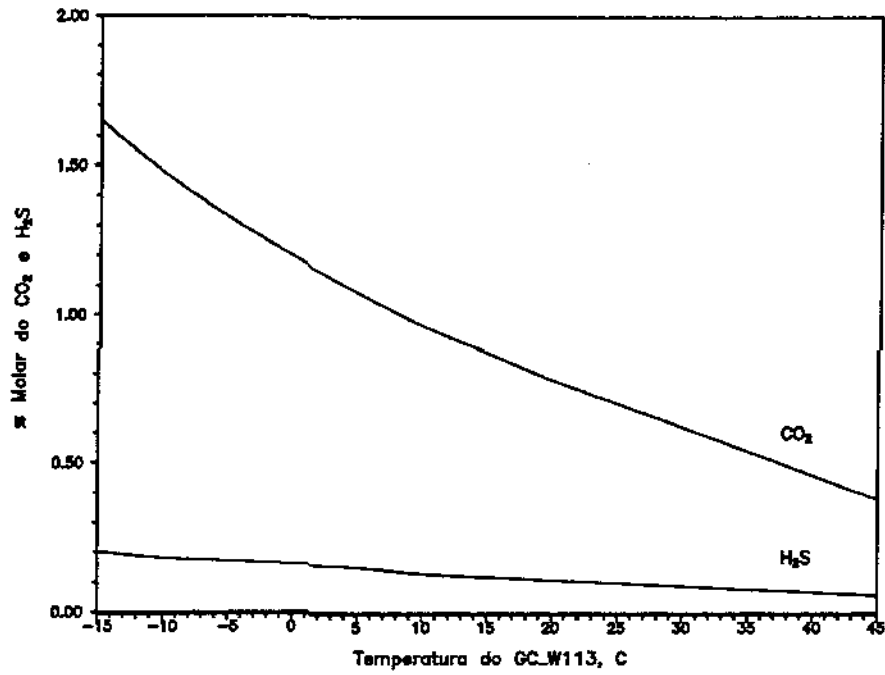


Figura 5.15 Influência da Temperatura Sobre a Composição do Gás Condensável (GC.W113)

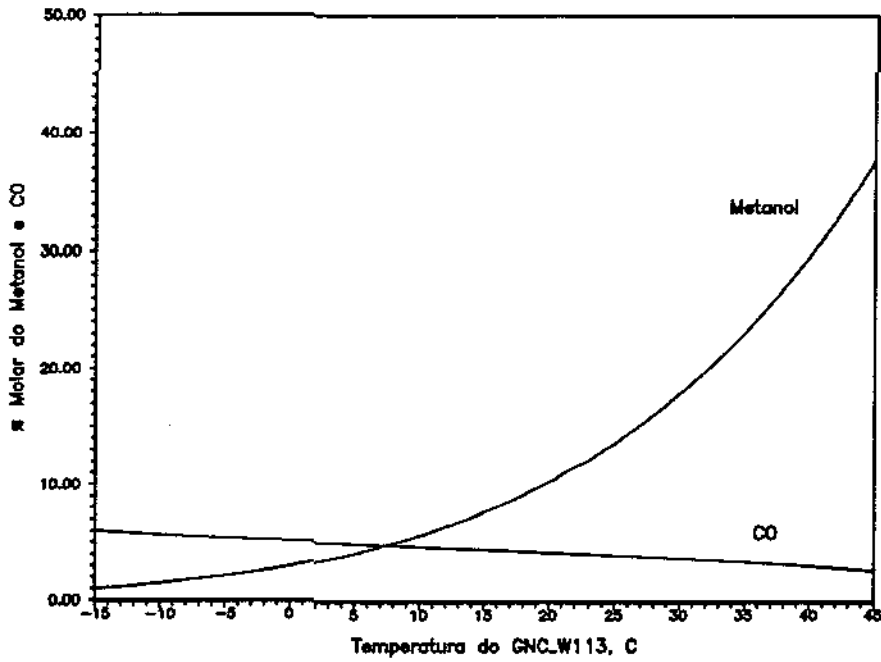


Figura 5.16 Influência da Temperatura Sobre a Composição do Gás Não Condensável (GNC.W113)

5.3.2 Coluna de Desabsorção K112

A Tabela 5.11 apresenta a composição das correntes de topo (GNC_K112) e da base (MET_K112) da coluna de desabsorção K112, em função do estágio de alimentação da corrente de metanol a ser regenerada (MET_W111). Também é apresentado o consumo de energia necessário para o vaporizador W112 em cada situação, bem como o fluxo de vapor do topo da coluna.

Tabela 5.11 Influência do Estágio de Alimentação no Desempenho da Coluna de Desabsorção K112

	ESTÁGIO DE ALIMENTAÇÃO DO METANOL PARA A K112				
	01	04	09	13	21
GNC_K112					
% MOLAR H ₂	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01
% MOLAR H ₂ O	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00
% MOLAR N ₂	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
% MOLAR O ₂	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02
% MOLAR CO	0,21	0,45	0,42	0,41	0,41
% MOLAR CO ₂	4,64	9,38	8,72	8,51	8,52
% MOLAR H ₂ S	0,32	0,58	0,54	0,53	0,53
% MOLAR CS ₂	0,92	1,17	2,61	3,07	3,01
% MOLAR COS	0,09	0,14	0,13	0,13	0,13
% MOLAR MEOH	93,80	88,22	87,53	87,30	87,35
FLUXO DE VAPOR (Kg/h)	2129,0	996,4	1095,7	1130,6	1128,9
MET_K112					
% MOLAR H ₂ O	0,11	0,11	0,11	0,11	0,11
% MOLAR CS ₂	0,16	0,15	0,12	0,11	0,11
% MOLAR MEOH	99,73	99,74	99,77	99,78	99,78
W112					
ENERGIA Kcal/h	664370	319052	341470	349341	349091

A Figura 5.17 apresenta a influência do estágio de alimentação sobre o consumo de energia. Podemos verificar que há uma queda brusca no consumo de energia quando o estágio de alimentação do metanol contaminado não é no topo da coluna.

Através da Tabela 5.11 podemos verificar que a quantidade de gás ácido CS₂ presente no metanol que sai do fundo da coluna (MET_K112), diminui para o 4º, 9º, 13º e 21º estágio de alimentação. Também para estes estágios de alimentação, a quantidade de metanol que sai no topo da coluna (GNC_K112), diminui sensivelmente.

Outras formas de operação da coluna de desbasorção como o aumento da temperatura do topo e/ou base da coluna, foram testados, mas não resultaram em melhor performance da coluna, e portanto optamos em não apresentar os resultados.

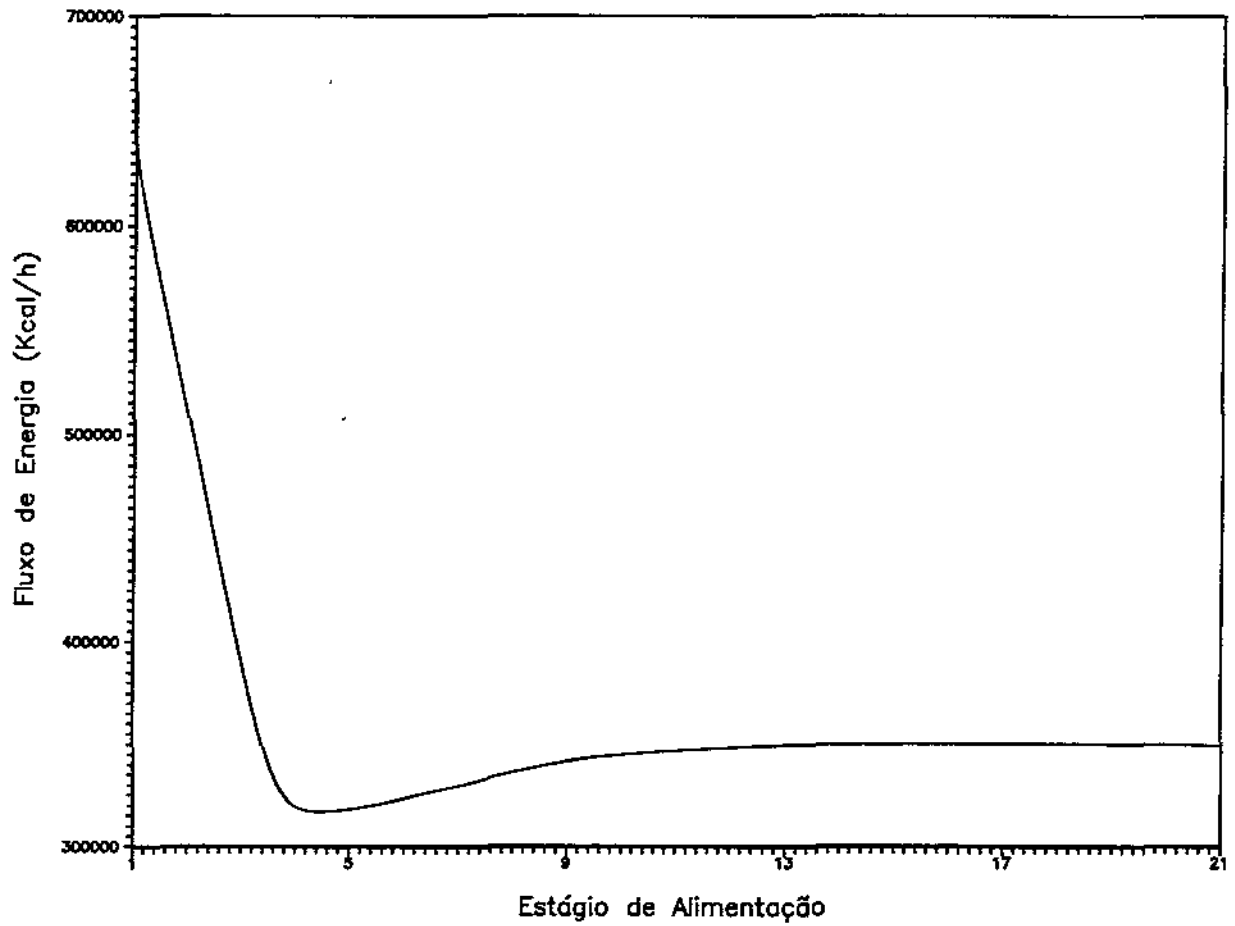


Figura 5.17 Influência do Estágio de Alimentação Sobre o Consumo de Energia

5.4 Destilação do Metanol

O estudo paramétrico desta etapa do processo de Purificação de CO consiste em avaliar o desempenho da coluna de destilação K113.

Os resultados da simulação padrão do processo de absorção e desabsorção são utilizados na simulação do processo de destilação de metanol. A Figura 5.18 apresenta o modelo padrão da simulação do processo de destilação de metanol. A definição da nomenclatura utilizada nas correntes da Figura 5.18 encontra-se no Apêndice A. Através deste modelo foi realizado o estudo paramétrico, o qual é descrito nos próximos itens.

5.4.1 Coluna de Destilação K113

A análise desta coluna envolveu o estudo de vários parâmetros relacionados à coluna. Estudamos a influência da vazão mássica, temperatura e estágio de alimentação da corrente MET_K110, a influência da temperatura do fundo da coluna, e a influência da vazão mássica da corrente MET_P/K113.

5.4.1.1 Estágio de Alimentação

A Tabela 5.12 apresenta a composição da corrente de topo e o consumo de vapor da coluna K113, em função do estágio de alimentação do metanol da corrente MET_K110. Os componentes H₂, N₂, O₂, HCN e NH₃ estão ausentes da corrente de topo. A corrente do fundo da coluna (AGUA_K113), não é influenciada pela mudança do estágio de alimentação do metanol.

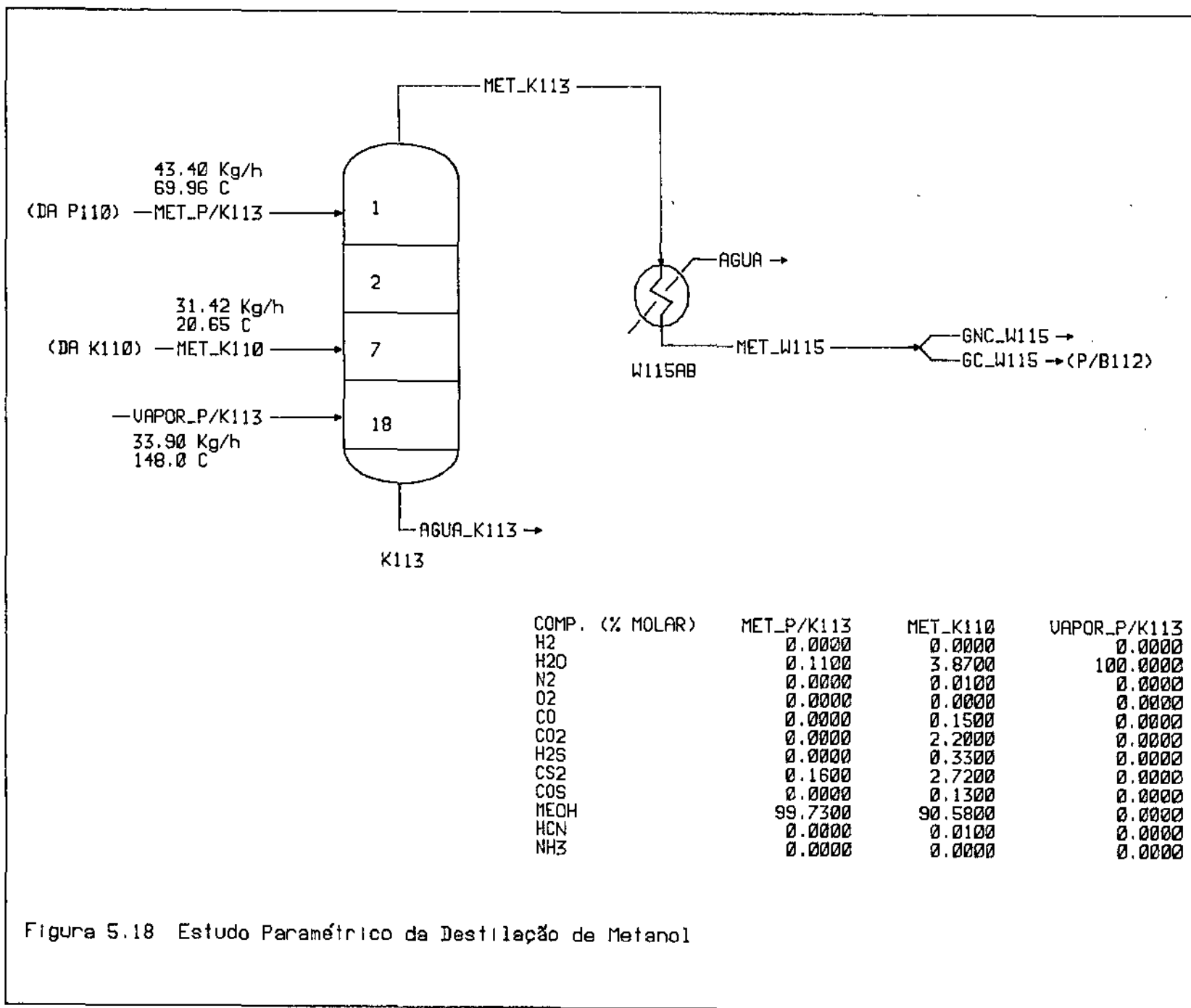


Figura 5.18 Estudo Paramétrico da Destilação de Metanol

Tabela 5.12 Influência do Estágio de Alimentação no Desempenho da Coluna de Destilação K113

MET_K113	ESTÁGIO DE ALIMENTAÇÃO DO MET_K110		
	04	07	10
% Molar MEOH	97,31	97,42	97,45
% Molar H ₂ O	0,22	0,11	0,08
% Molar CO	0,06	0,06	0,06
% Molar CO ₂	0,94	0,94	0,94
% Molar H ₂ S	0,14	0,14	0,14
% Molar CS ₂	1,26	1,26	1,26
% Molar COS	0,06	0,06	0,06
CONSUMO DE VAPOR (Kg/h)	33,95	33,91	33,89

A Figura 5.19 mostra a influência do estágio de alimentação sobre a % molar de H₂O no metanol. Podemos observar que a quantidade de H₂O vai diminuindo gradativamente quando a corrente de metanol é alimentada nos estágios 7 ou 10.

5.4.1.2 Metanol da Corrente MET_K110

Alguns testes mudando a temperatura e vazão mássica da corrente MET_K110 foram realizados, e os resultados são descritos abaixo.

A mudança da temperatura do metanol provocou somente alterações no consumo de vapor, não influenciando na composição das correntes. A Figura 5.20 mostra a influência da temperatura do metanol no consumo de vapor para a coluna. Podemos observar que o consumo de vapor diminui com o aumento da temperatura da corrente de metanol. É bom salientarmos, que se o aquecimento deste metanol for realizado aproveitando-se o calor do fundo da própria coluna K113, o consumo de vapor deverá ser diferente.

A mudança da vazão mássica da corrente MET_K110, exerce influência sobre a composição da corrente MET_K113 e do consumo de vapor para a coluna. Na Tabela 5.13 apresentamos a composição da corrente MET_K113 e o consumo de vapor para a

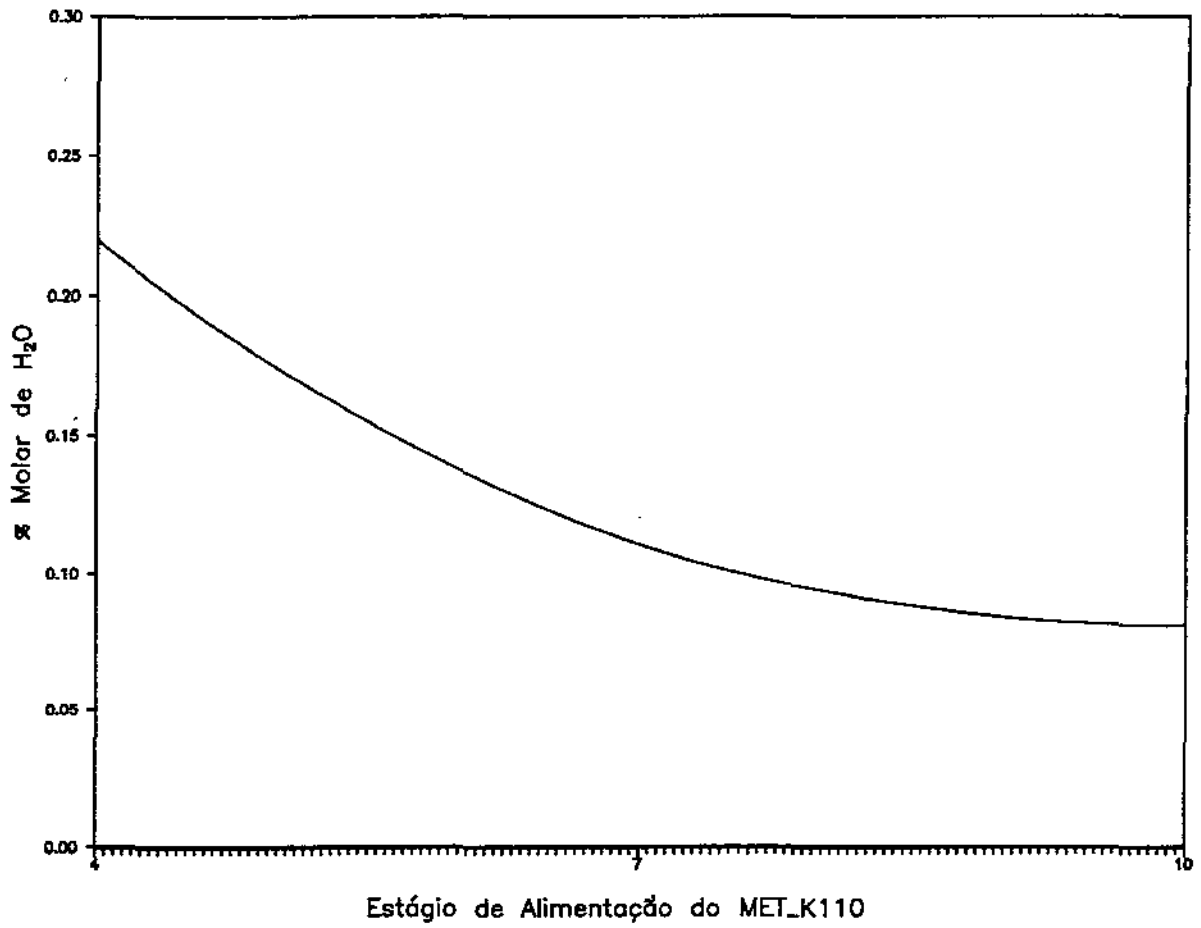


Figura 5.19 Influência do Estágio de Alimentação Sobre a % Molar de H₂O no Metanol (MET_K113)

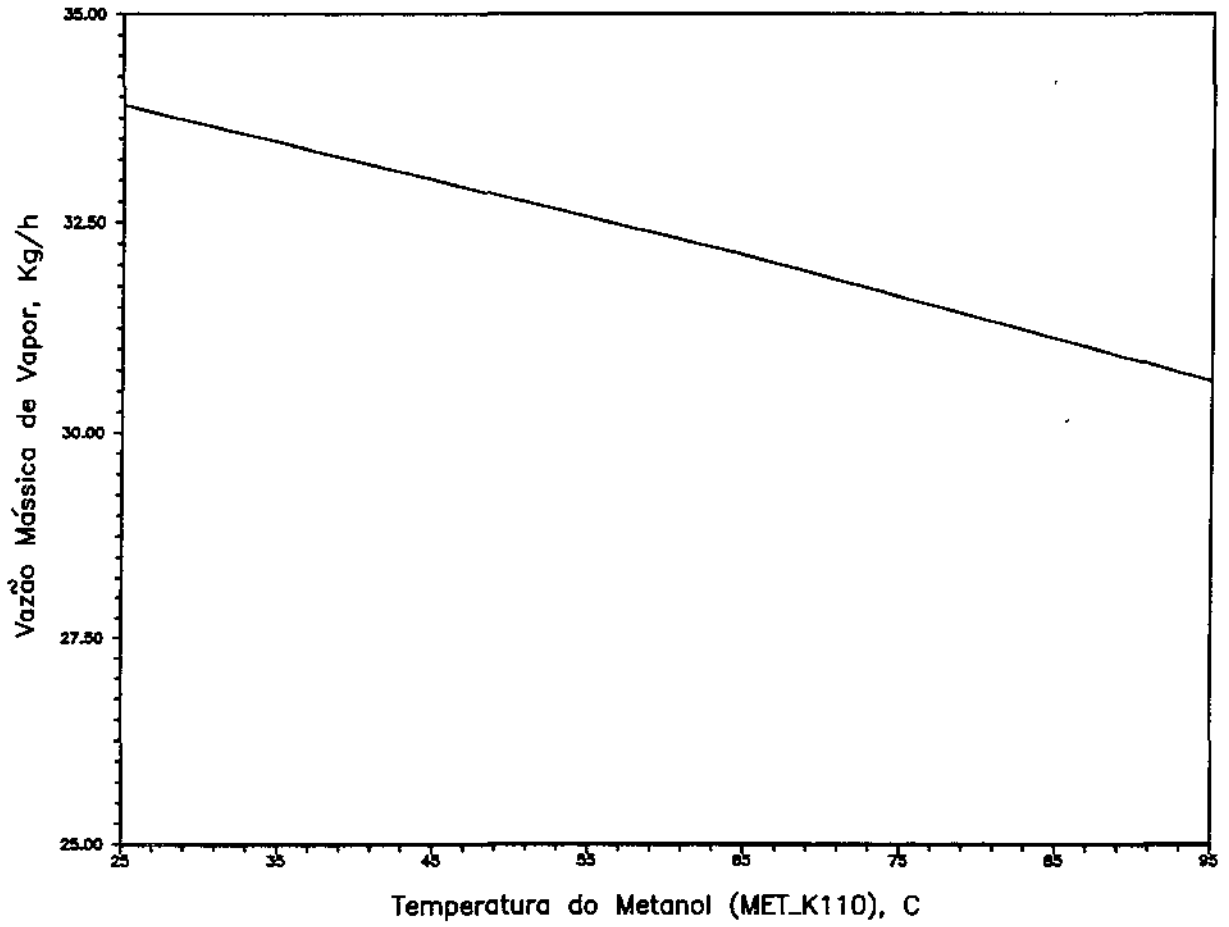


Figura 5.20 Influência da Temperatura do Metanol (MET_K110), Sobre o Consumo de Vapor

coluna K113. A Tabela apresenta somente a composição dos componentes de interesse (H₂O e MEOH).

Tabela 5.13 Influência da Vazão Mássica de MET_K110 no Desempenho da Coluna de Destilação K113

VAZÃO MÁSSICA DE MET K110	% MOLAR (MET_K113)		CONSUMO DE VAPOR Kg/h
	MEOH	H ₂ O	
20 Kg/h	98,04	0,08	28,5761
30 Kg/h	97,49	0,11	33,2306
40 Kg/h	97,05	0,15	37,8839
50 Kg/h	96,68	0,20	42,5646
60 Kg/h	96,36	0,26	47,2554
70 Kg/h	96,08	0,33	51,9541

A Figura 5.21 mostra a influência da vazão mássica de metanol sobre a quantidade de H₂O presente na corrente do topo da coluna. Podemos observar que quanto menor a vazão de metanol a ser recuperado, menor é a quantidade do contaminante H₂O presente na corrente de metanol. Na Figura 5.22 podemos observar que o aumento da vazão mássica de metanol a ser recuperado aumenta o consumo de vapor necessário a coluna.

5.4.1.3 Temperatura do Fundo da Coluna

A Tabela 5.14 apresenta a composição da corrente AGUA_K113 e o consumo de vapor para a coluna K113, em função da mudança na temperatura do fundo da coluna. A composição da corrente do topo da coluna (MET_K113), não é influenciada pela mudança na temperatura do fundo da coluna. Somente a temperatura do topo da coluna muda, e é apresentada na tabela.

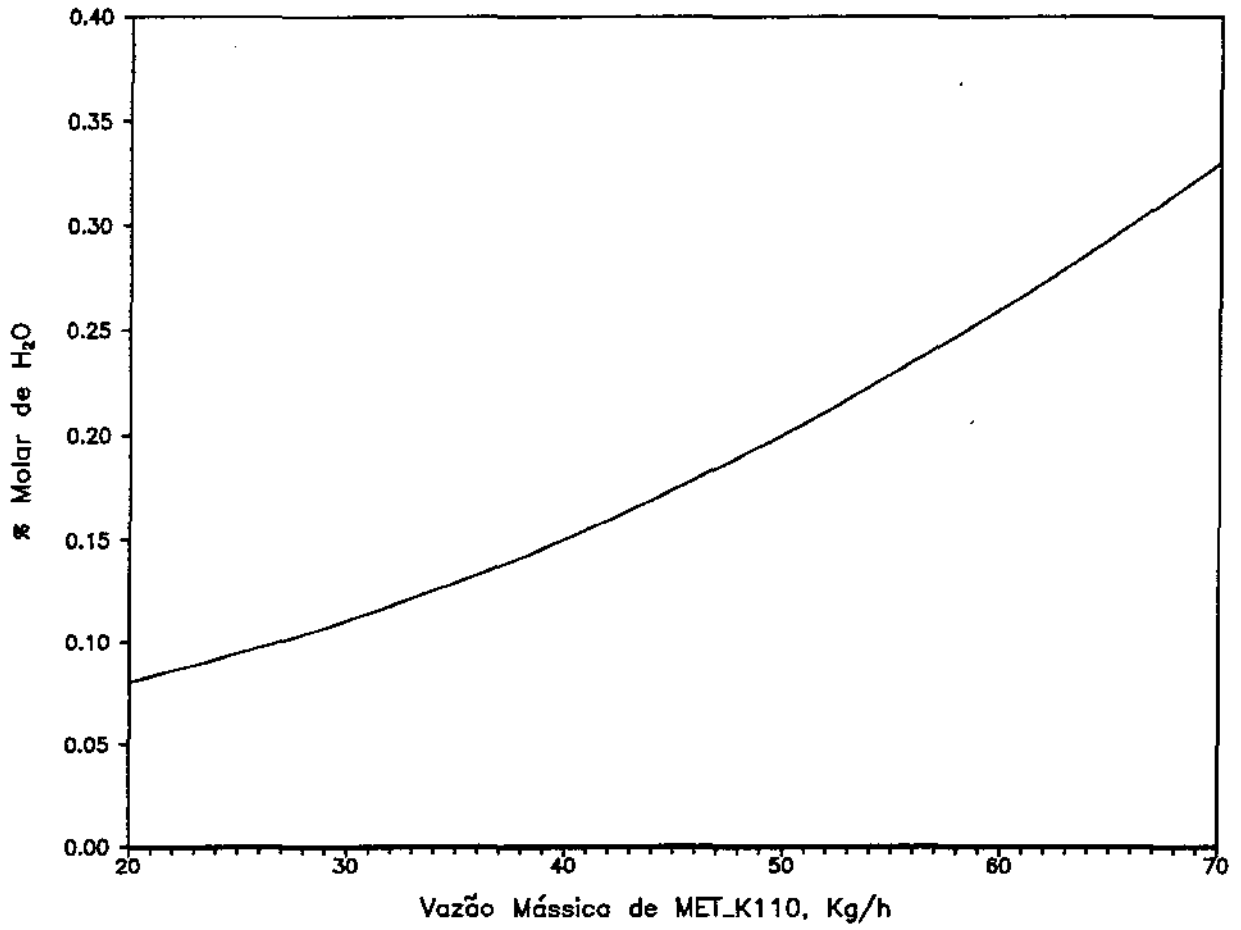


Figura 5.21 Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_K110), Sobre a % Molar de H₂O no MET_K113

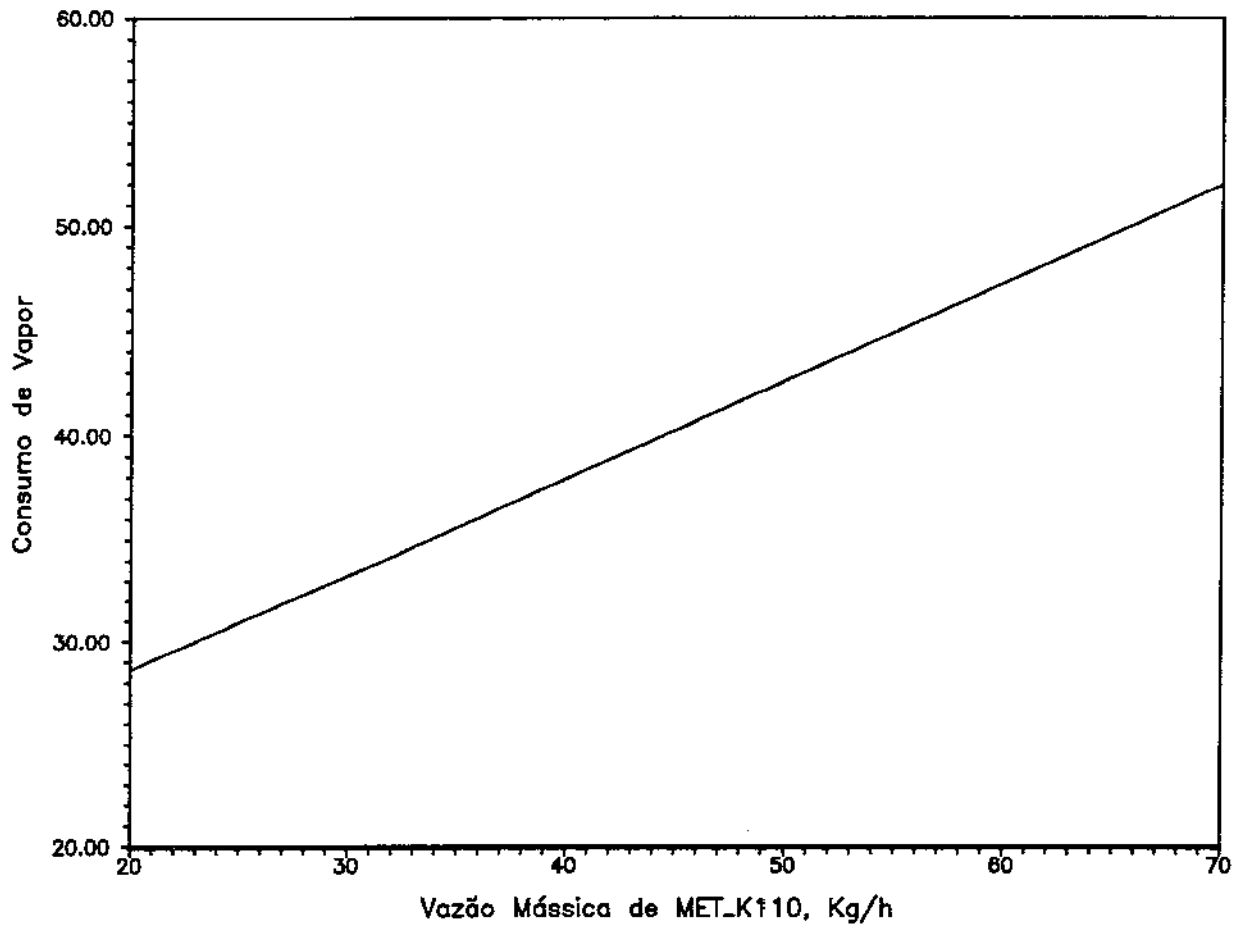


Figura 5.22 Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_K110), Sobre o Consumo de Vapor

Tabela 5.14 Influência da Temperatura do Fundo da Coluna no Desempenho da Coluna de Destilação K113

TEMP. AGUA_K113 °C	% MOLAR (AGUA_K113)		CONSUMO DE VAPOR Kg/h	TEMP. MET_K113 °C
	H ₂ O	MEOH		
96	97,47	2,53	33,5977	63,92
98	98,79	1,21	34,0573	63,93
100	99,66	0,34	34,4243	64,42
102	99,66	0,34	34,6298	66,20
104	99,67	0,33	34,8327	68,00
106	99,67	0,33	35,0417	69,80

A Figura 5.23 mostra a influência da temperatura sobre a composição do metanol do fundo da coluna. Podemos observar que temperaturas abaixo de 100 °C, provocam aumento na quantidade de metanol na corrente de água que sai do fundo da coluna.

5.4.1.4 Metanol da Corrente MET_P/K113

A mudança na vazão mássica da corrente MET_P/K113, exerce influência sobre a composição da corrente MET_K113 e no consumo de vapor para a coluna. Na Tabela 5.15 apresentamos a composição da corrente MET_K113 e o consumo de vapor para a coluna K113. A Tabela apresenta somente a composição dos componentes de interesse (H₂O e MEOH).

Tabela 5.15 Influência da Vazão Mássica de MET_P/K113 no Desempenho da Coluna de Destilação K113

VAZÃO MÁSSICA DE MET_P/K113	% MOLAR (MET_K113)		CONSUMO DE VAPOR Kg/h
	MEOH	H ₂ O	
20 Kg/h	96,13	0,32	23,5787
30 Kg/h	96,84	0,18	27,9724
40 Kg/h	97,30	0,12	32,3922
50 Kg/h	97,63	0,10	36,8049
60 Kg/h	97,88	0,09	41,2208
70 Kg/h	98,07	0,08	45,7000

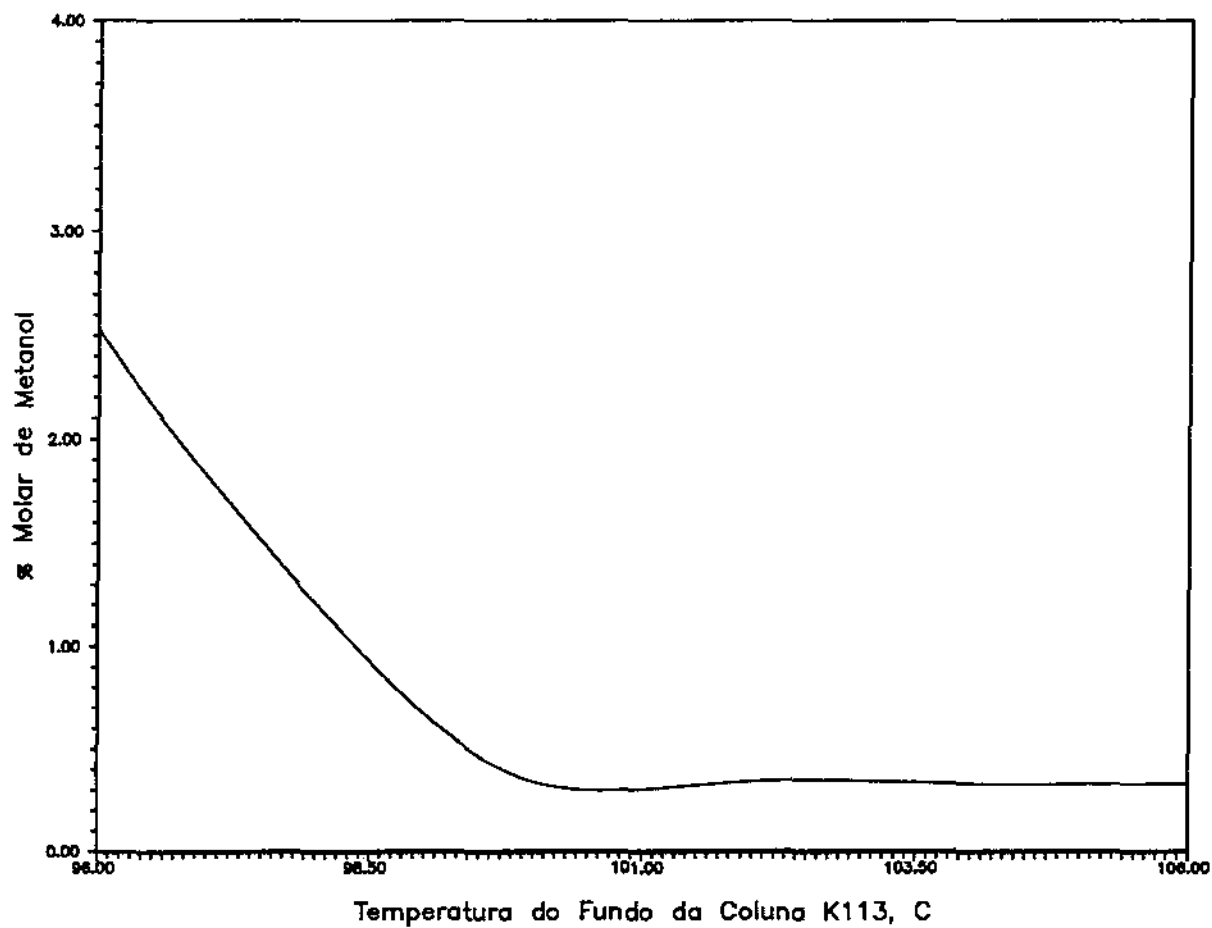


Figura 5.23 Influência da Temperatura Sobre a Composição do Metanol no Fundo da Coluna K113 (AGUA_K113)

A Figura 5.24 mostra a influência da vazão mássica de metanol sobre a quantidade de H_2O presente na corrente do topo da coluna. Podemos observar, que quanto maior a vazão de metanol, menor é a quantidade do contaminante H_2O presente na corrente de metanol. Na Figura 5.25 podemos observar que o aumento da vazão mássica de metanol aumenta o consumo de vapor necessário a coluna.

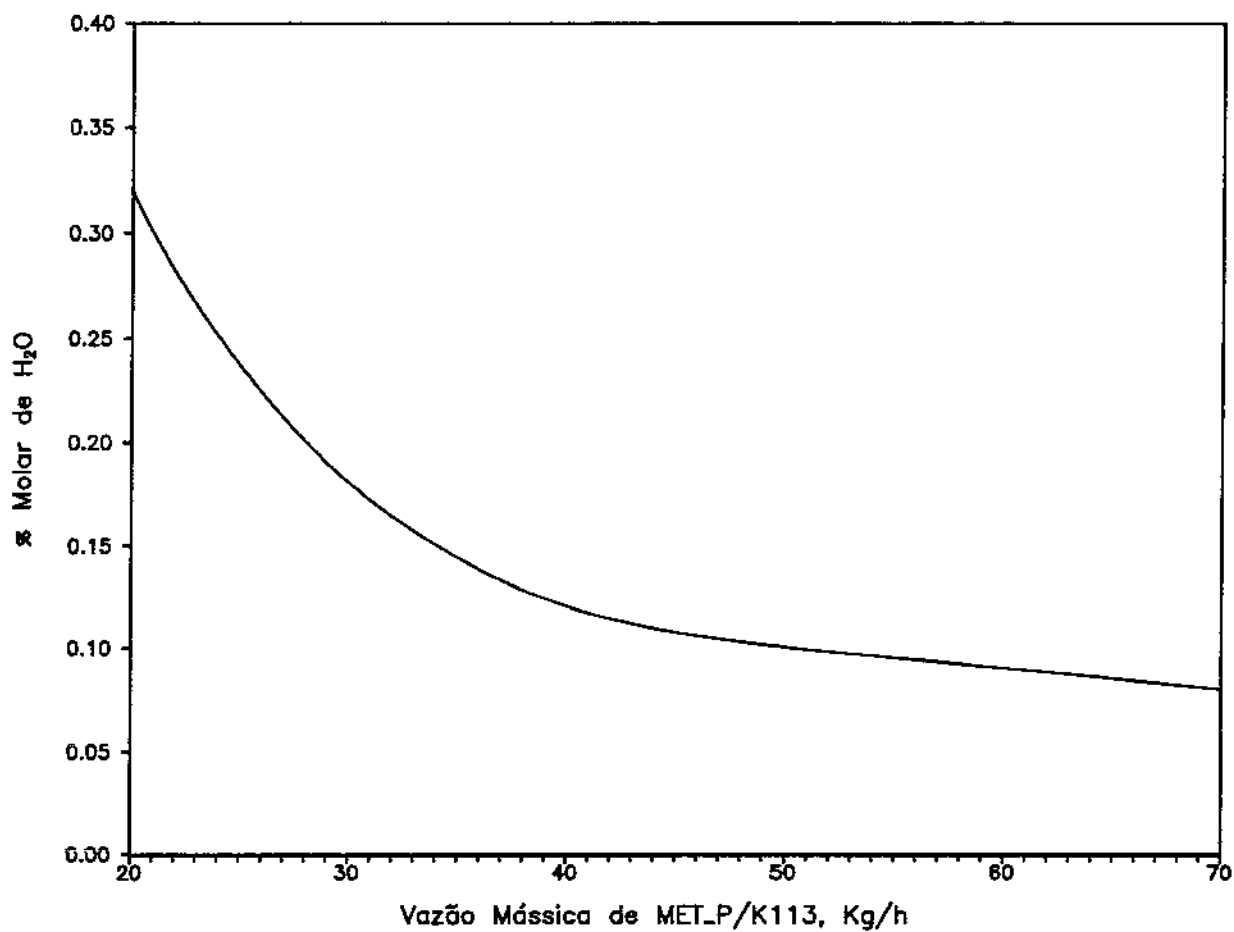


Figura 5.24 Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_P/K113), Sobre a % Molar de H₂O no MET_K113

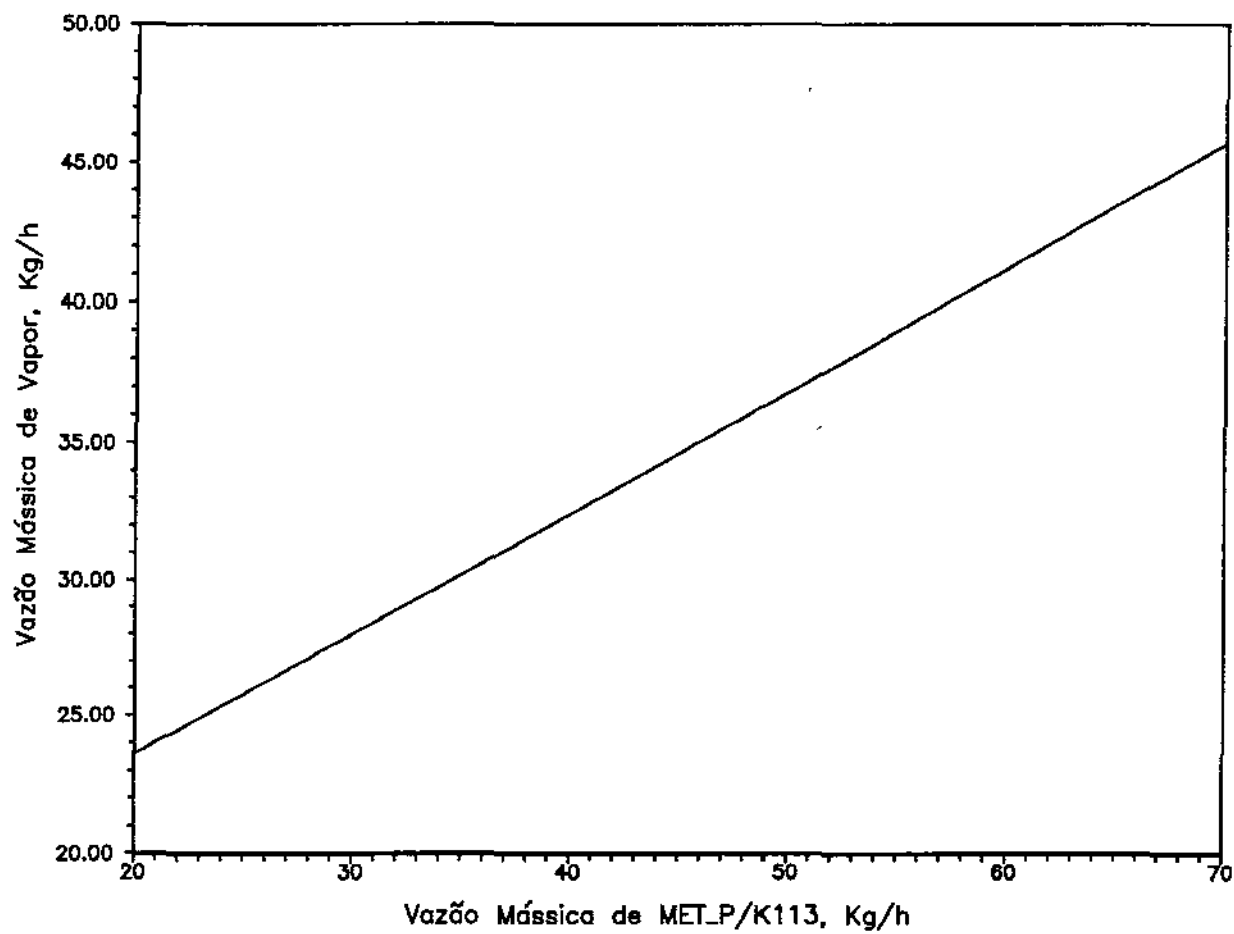


Figura 5.25 Influência da Vazão Mássica do Metanol (MET_P/K113), Sobre o Consumo de Vapor

Capítulo 6

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo apresentamos e discutimos, com base no estudo paramétrico do capítulo anterior, algumas diferentes formas de configuração para o processo de purificação de monóxido de carbono, as quais reduzem o custo operacional da Planta de CO sem prejudicar a qualidade do produto final.

6.1 Estágio de Alimentação das Colunas K112 e K113

Conforme apresentado no capítulo anterior, a mudança do estágio de alimentação para a coluna K112 influencia principalmente o consumo de energia no vaporizador de fundo W112. Desta forma definimos com base nos resultados da Tabela 5.11, que o melhor estágio de alimentação da corrente MET_W111 é o 90. Este estágio de alimentação resulta em baixo consumo de energia e uma boa desabsorção dos contaminantes.

Para a coluna K113, a mudança no estágio de alimentação da corrente MET_K110 influencia principalmente a quantidade de H₂O na corrente de metanol do topo da coluna. Conforme os resultados apresentados na Tabela 5.12, podemos observar que o estágio de alimentação que melhores resultados apresenta é o 100.

Com os novos estágios de alimentação para as colunas K112 e K113 já definidos, podemos simular o processo de purificação para analisar os novos resultados. A simulação padrão utilizada, é a apresentada nas Figuras 4.18 a 4.22, sendo que os estágios de alimentação das colunas K112 e K113 são os definidos nos parágrafos anteriores.

A Tabela 6.1 mostra os principais resultados obtidos com a mudança nos estágios de alimentação (SPNEA)¹, bem como os resultados do processo atual (SPA)². Somente os resultados apresentados na tabela, sofreram influencia significativa com a mudança dos estágios de alimentação.

Tabela 6.1 Resultados da Simulação SPA e SPNEA

	SIMULAÇÃO DA PURIFICAÇÃO	
	SPA	SPNEA
CONSUMO DE ENERGIA NO VAPORIZADOR W112 (Kcal/h)	376.948,6415	91.094,4033
CONSUMO DE VAPOR NA COLUNA K113 (Kg/h)	33,5626	33,5367
PERDA DE METANOL NO:		
CO_PURO (Kg/h)	1,0100	1,0095
GNC_W113 (Kg/h)	1,7432	1,7205
AGUA_K113 (Kg/h)	1,2816	1,2831
GNC_W115 (Kg/h)	0,0169	0,0169
TOTAL (Kg/h)	4,0517	4,0300
QUANTIDADE DE H ₂ O NA CORRENTE MET_K113 (Kg/h)	0,0434	0,0287

Como podemos verificar na Tabela acima, a maior influência da mudança do estágio de alimentação da coluna K112,

¹SPNEA = simulação da purificação com novo estágio de alimentação.

²SPA = simulação do processo atual

está no consumo de energia do vaporizador W112, a qual é significativamente reduzida. A mudança do estágio de alimentação para a coluna K113 acarreta em um decréscimo na quantidade de H₂O carregada pelo metanol. A perda de metanol não é alterada significativamente pela mudança nos estágios de alimentação.

Desta forma, podemos concluir que estas mudanças na configuração das colunas K112 e K113 trazem bons resultados para o processo de purificação, principalmente na economia de energia para o vaporizador de fundo W112.

6.2 Mudanças nas Variáveis de Operação

Com o conhecimento obtido no capítulo anterior, podemos propor novos valores para diversas variáveis, a fim de encontrar uma configuração de operação que minimize o consumo de metanol e atenda as especificações do produto final.

Utilizando as condições do item anterior, onde os novos estágios de alimentação das colunas K112 e K113 provaram melhorar o processo, e especificando os seguintes valores para as variáveis de operação:

- * Pressão de Absorção = 16 Bar ;
- * Temperatura do MET_V120 = -9 °C ;
- * Vazão de MET_V120 = 3,5 m³/h ;
- * Vazão de MET_P/K110 = 25,0 l/h ;
- * Vazão de MET_P/K113 = 78,0 l/h ;
- * Temperatura do Fundo K113 = 100 °C ,

podemos simular novamente o processo de purificação de monóxido de carbono. Os novos valores das variáveis são sugeridos com base no estudo paramétrico e valores encontrados no manual de operação da Planta (BASF, 1982).

A Tabela 6.2 mostra os principais resultados obtidos com a mudança nos estágios de alimentação e variáveis de

operação (SPNEAVO)³, bem como os resultados do processo atual (SPA).

Tabela 6.2 Resultados da Simulação SPA e SPNEAVO

	SIMULAÇÃO DA PURIFICAÇÃO	
	SPA	SPNEAVO
CONSUMO DE ENERGIA NO VAPORIZADOR W112 (Kcal/h)	376.948,6415	96.021,3775
CONSUMO DE VAPOR NA COLUNA K113 (Kg/h)	33,5626	35,1676
PERDA DE METANOL NO:		
CO_PURO (Kg/h)	1,0100	0,5595
GNC_W113 (Kg/h)	1,7432	2,0729
AGUA_K113 (Kg/h)	1,2816	0,4923
GNC_W115 (Kg/h)	0,0169	0,0118
TOTAL (Kg/h)	4,0517	3,1365
QUANTIDADE DE H ₂ O NA CORRENTE MET_K113 (Kg/h)	0,0434	0,0190
COMPOSIÇÃO DO CO_PURO:		
H ₂ % Molar	0,7000	0,7000
H ₂ O % Molar	0,0000	0,0000
N ₂ % Molar	0,9900	0,9800
O ₂ % Molar	0,2000	0,1900
CO % Molar	97,8400	98,0000
CO ₂ % Molar	0,0300	0,0000
H ₂ S % Molar	0,0000	0,0000
CS ₂ % Molar	0,0000	0,0000
COS % Molar	0,0000	0,0000
MEOH % Molar	0,2400	0,1300
HCN % Molar	0,0000	0,0000
NH ₃ % Molar	0,0000	0,0000

Como podemos observar na Tabela acima, a mudança nos valores das variáveis de operação resultaram em melhoria no processo de purificação. A qualidade do produto final melho-

³SPNEAVO = simulação da purificação com novo estágio de alimentação e variáveis de operação.

rou, e encontra-se dentro das especificações exigidas⁴. A quantidade de H₂O na corrente de MET_K113 diminuiu ainda mais com as alterações nas variáveis de operação. A perda de metanol diminuiu significativamente para as correntes CO_PURO, AGUA_K113 e GNC_W115. Somente a corrente GNC_W113 apresenta significativa perda de metanol.

Desta forma, podemos concluir que as mudanças nos valores das variáveis de operação, bem como o estágio de alimentação das colunas K112 e K113, trazem bons resultados para o processo de purificação, principalmente na economia de metanol e energia para o vaporizador de fundo W112.

6.3 Temperatura de Condensação do Trocador W113

Como observado no item anterior, a perda de metanol no trocador W113 (corrente GNC_W113) é ainda significativa. A maneira de diminuir esta perda de metanol, é mudando a temperatura de condensação do trocador W113.

Utilizando a simulação do item anterior (SPNEAVO), e modificando a temperatura de condensação dos gases no trocador W113 para 0 °C, 10 °C e 20 °C, podemos simular novamente o processo de purificação e verificar qual é a melhor temperatura de condensação para o trocador W113.

A Tabela 6.3 apresenta alguns resultados obtidos com a mudança nas temperaturas de condensação do trocador W113, bem como os resultados do processo atual (SPA). A Tabela apresenta somente os resultados que mudaram significativamente com a mudança na temperatura de condensação do W113.

⁴Vide item 3.2 - Especificação das matérias-primas e do CO produzido

Tabela 6.3 Influência da Temperatura de Condensação do Trocador W113 Sobre o Processo de Purificação

SIMUL. ATUAL SPA	TEMPERATURA NO CONDENSADOR W113				
	0 °C	10 °C	20 °C	29 °C	
QUANTIDADE DE GASES ÁCIDOS E ÁGUA NO MET_K112 (Kg/h)					
CO ₂	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H ₂ S	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
CS ₂	12,9719	6,0012	13,2803	17,0618	16,1131
COS	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
H ₂ O	1,4377	1,5088	1,4506	1,4388	1,4131
QUANTIDADE DE GASES ÁCIDOS E ÁGUA NO MET_P113 (Kg/h)					
CO ₂	1,9459	3,2931	1,0773	0,5024	0,2474
H ₂ S	3,1786	5,0960	1,7059	0,7867	0,3806
CS ₂	15,6297	105,7897	53,0415	31,0581	10,0605
COS	2,2942	3,6772	1,2923	0,5828	0,2793
H ₂ O	0,1114	0,0240	0,0228	0,0223	0,0216
QUANTIDADE DE GASES ÁCIDOS E ÁGUA NO GC_W113 (Kg/h)					
CO ₂	1,9389	3,2862	1,0705	0,4956	0,2406
H ₂ S	3,1570	5,0785	1,6885	0,7694	0,3632
CS ₂	14,8550	105,2382	52,3287	30,2616	9,2862
COS	2,2786	3,6651	1,2803	0,5707	0,2673
H ₂ O	0,0681	0,0039	0,0034	0,0030	0,0025
QUANTIDADE DE METANOL NO GNC_W113 (Kg/h)					
MEOH	1,7432	0,2974	0,5922	1,1425	2,0729
CONSUMO DE ENERGIA NO VAPORIZADOR W112 (Kcal/h)					
ENERGIA	376.948	400.847	185.981	126.531	96.021

Como podemos observar na tabela anterior, a temperatura de condensação de 0 °C resulta em baixa perda de metanol, mas o consumo de energia necessário para o vaporizador aumenta significativamente, assim como a quantidade de gases ácidos que é condensada. Devido a isso, sugerimos a temperatura de 10 °C para ser utilizada na condensação dos gases no trocador W113. Nesta temperatura a perda de metanol é um pouco maior que a de 0°C, mas o consumo de energia para o vaporizador diminui, assim como a quantidade de gases ácidos que é condensada (GC_W113).

6.4 Configuração de Operação

Através do exposto nos itens anteriores podemos estabelecer uma configuração de operação para a Purificação de CO, que reduz o custo operacional do processo sem prejudicar a qualidade do produto final.

As seguintes condições reduzem o custo operacional do processo de Purificação de CO:

- * Alimentação da Coluna K112 = 99 estágio;
- * Alimentação da Coluna K113 = 109 estágio;
- * Pressão de Absorção = 16 Bar ;
- * Temperatura do MET_V120 = -9 °C ;
- * Vazão de MET_V120 = 3,5 m³/h ;
- * Vazão de MET_P/K110 = 25 l/h ;
- * Vazão de MET_P/K113 = 78 l/h ;
- * Temperatura do Fundo K113 = 100 °C ;
- * Temperatura do Trocador W113 = 10 °C .

Os resultados da simulação com as condições acima descritas (SPCMCO⁵) e a simulação atual (SPA) são apresentados na Tabela 6.4.

⁵SPCMCO = simulação da purificação com as condições que minimizam o custo operacional.

Tabela 6.4 Resultados da Simulação SPA e SPCMCO

	SIMULAÇÃO DA PURIFICAÇÃO	
	SPA	SPCMCO
CONSUMO DE ENERGIA NO VAPORIZADOR W112 (Kcal/h)	376.948,6415	185.981,1446
CONSUMO DE VAPOR NA COLUNA K113 (Kg/h)	33,5626	35,1676
PERDA DE METANOL NO:		
CO_PURO (Kg/h)	1,0100	0,5596
GNC_W113 (Kg/h)	1,7432	0,5922
AGUA_K113 (Kg/h)	1,2816	0,4972
GNC_W115 (Kg/h)	0,0169	0,0117
TOTAL (Kg/h)	4,0517	1,6607
QUANTIDADE DE H ₂ O NA CORRENTE MET_K113 (Kg/h)	0,0434	0,0195
COMPOSIÇÃO DO CO_PURO:		
H ₂ % Molar	0,7000	0,7000
H ₂ O % Molar	0,0000	0,0000
N ₂ % Molar	0,9900	0,9800
O ₂ % Molar	0,2000	0,1900
CO % Molar	97,8400	98,0000
CO ₂ % Molar	0,0300	0,0000
H ₂ S % Molar	0,0000	0,0000
CS ₂ % Molar	0,0000	0,0000
COS % Molar	0,0000	0,0000
MEOH % Molar	0,2400	0,1300
HCN % Molar	0,0000	0,0000
NH ₃ % Molar	0,0000	0,0000

Esta nova configuração de operação, como mostrada na tabela anterior, diminui em aproximadamente 50% o consumo de energia para o vaporizador W112 e em aproximadamente 40% o consumo de metanol. Além disso, a composição do produto final está dentro das especificações exigidas⁶.

⁶Vide item 3.2 - Especificação das Matérias-Primas e do CO produzido

Outra variável que poderá ser utilizada para diminuir o custo operacional é o aquecimento da corrente de metanol de alimentação da coluna K113 (MET_K110). Como mencionado no capítulo anterior, a temperatura desta corrente influencia o consumo de vapor para a coluna K113. Sugerimos que esta corrente seja aquecida, aproveitando o calor da corrente de água que sai no fundo da coluna K113, e deste modo reduzir o consumo de vapor para a coluna K113.

A configuração de operação do processo de purificação apresentada acima, considera que os dois gaseificadores estão operando paralelamente⁷. No caso de somente um gaseificador estar em operação⁸, a quantidade de metanol utilizada pode ser reduzida a metade. Esta afirmação é baseada no que foi descrito no item 2.2.1: "o fluxo de solvente físico necessário para a absorção é proporcional ao fluxo total do gás e inversamente proporcional à pressão total e ao coeficiente de solubilidade dos gases ácidos a serem removidos". Deste modo, continuando a pressão de absorção a mesma, a quantidade de metanol pode ser reduzida pela metade. Como resultados a perda de metanol nas correntes CO_PURO e GNC_W113, bem como o consumo de energia para o vaporizador W112 diminuirão significativamente (aproximadamente pela metade), sem prejudicar a qualidade do produto final.

⁷a produção de gás é ≈ 380 Kg/h

⁸a produção de gás é ≈ 190 Kg/h

Capítulo 7

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Conclusões

Quanto a validade da simulação da Planta de Monóxido de Carbono, podemos concluir que os resultados obtidos através do uso do simulador para o processo de purificação, mostra uma boa aproximação com o sistema real.

Através do estudo paramétrico do processo de purificação do Monóxido de Carbono, identificamos o peso que cada variável de operação tem sobre o mesmo, permitindo desta forma um conhecimento maior sobre o processo.

Com o objetivo de reduzir custos de produção e melhorar a qualidade dos produtos, o uso de simuladores de processos, mostra que é potencialmente necessário na simulação de plantas químicas. Além disso, o uso de simuladores pode auxiliar no treinamento de operadores e engenheiros de processos.

Sugestões

O processo de Gaseificação do coque de petróleo tem grande influência no custo de produção do Monóxido de Carbono. O estudo alternativo de outras matérias-primas e a simulação detalhada do gaseificador, podem trazer resultados positivos na redução dos custos de produção do CO.

O método utilizado para o cálculo da absorção no simulador é análogo ao utilizado em colunas de estágios. O desenvolvimento de um programa que utiliza o coeficiente global de transferência de massa para descrever o transporte que ocorre na coluna, poderá trazer resultados mais precisos sobre o comportamento da absorção dos gases ácidos.

O desenvolvimento de um programa de otimização para a Planta de Monóxido de Carbono, aplicado ao simulador, é útil na busca das condições de operação que minimize o custo de produção do produto.

APÊNDICE A

DEFINIÇÃO DA NOMENCLATURA UTILIZADA NAS FIGURAS

<u>CORRENTE</u>	<u>DEFINIÇÃO</u>
AGUA	Água da torre de resfriamento
AGUA_K110	Água contaminada que sai da coluna K110
AGUA_K113	Água contaminada que sai no fundo da K113
AGUA_P111	Água que sai da bomba P111
AGUA_P/W113	Água da torre de resfriamento para o W113
AGUA_P/W115	Água da torre de resfriamento para o W115
AGUA_W113	Água aquecida que sai do trocador W113
AGUA_W115	Água aquecida que sai do trocador W115
COQUE	Coque de Petróleo
CO_PURO	CO purificado que sai da coluna K111
EN_W112	Energia consumida pelo vaporizador W112
FLUXO_ENERG	Fluxo energético adicionado a coluna K111
GAS_C101	Gás que sai do gaseificador C101
GAS_F101	Gás que sai do filtro F101
GAS_K110	Gás que sai da coluna K110 (seção de secagem)
GAS_K110AGUA	Gás que sai da coluna K110 (seção de lavagem)
GAS_V110	Gás que sai do compressor V110
GAS_W101	Gás que sai do trocador W101
GC_W113	Gás condensado no trocador W113
GC_W115	Gás condensado no trocador W115
GNC_K112	Gás que sai no topo da coluna K112
GNC_W113	Gás não condensado no trocador W113
GNC_W113A	Gás que sai do trocador W113
GNC_W115	Gás não condensado no trocador W115
MET_B112	Metanol que sai do tanque B112
MET_K110	Metanol contaminado que sai da coluna K110
MET_K111	Metanol contaminado que sai da coluna K111
MET_K112	Metanol purificado que sai do fundo da K112
MET_K113	Metanol purificado que sai no topo da K113
MET_P110A	Metanol purificado que sai da bomba P110
MET_P110W	Metanol purificado que sai do trocador W111
MET_P113RECY	Corrente idêntica a MET_B112

MET_P/K110	Metanol purificado que sai do trocador W111
MET_P/K113	Metanol purificado que sai da bomba P110
MET_PURO	Metanol puro da tancagem
MET_V120	Metanol purificado que sai do resfriador V120
MET_W111	Metanol contaminado que sai do trocador W111
MET_W111RECY	Corrente idêntica a MET_W111
MET_W115	Gás que sai do trocador W115
MET_P/W111	Metanol purificado que sai da bomba P110
OXIGÊNIO	Oxigênio
SOLIDOS	Partículas retidas pelo filtro F101
VAPOR_P/K113	Vapor saturado oriundo do coletor da planta

APÊNDICE B

SIMULAÇÃO DA PLANTA DE CO

SIMULAÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO - OPERAÇÕES UNITÁRIAS

Mix MISTURADOR:-MAT_PRIMA NITROGENIO OXIGENIO COQUE

Gibb C101_GIBS: MAT_PRIMA -GAS_C101GIBS DUTY_GIBS
DP: 0.0000 Bar

Stoc C101_ESTEQ: GAS_C101GIBS -GAS_C101 DUTY_ESTEQ
DP: 0.0000 Bar
Reaction 1 BaseComp: H2O Conversion: 100.00%
Reactants: -1.000 H2O + -1.000 S
Products: 0.500 Oxygen + 1.000 H2S
Reaction 2 BaseComp: S Conversion: 4.00%
Reactants: -1.000 S + -1.000 CO
Products: 1.000 COS
Reaction 3 BaseComp: S Conversion: 12.00%
Reactants: -1.000 Carbon + -2.000 S
Products: 1.000 CS2

Mole BAL: GAS_C101 -GAS_V110

Pump P111: AGUA_POCO -AGUA_P111 EN_P111
Efficiency: 75.00%

Colu K110_AGUA: GAS_V110 AGUA_P111 -GAS_K110AGUA -AGUA_K110

Colu K110_MET: MET_P/K110 GAS_K110AGUA -GAS_K110 -MET_K110

Colu K111: MET_V120 GAS_K110 FLUXO_ENERG -CO_PURO
-MET_K111

Cool V120: MET_P/V120 -MET_V120 -EN_V120
DP: 0.5116 Bar

Recy RECY_W111: MET_P110W -MET_P110RECY
Max Numb Iter: 5 Type: Simultaneous
Wegstein Cnt: 3
VapFr Sens: 10.0000 Temp Sens: 1.0000
Press Sens: 1.0000 Enth Sens: 10.0000
Rel Flow Sens: 0.1000 Rel Comp Sens: 1.0000

Tee TEE_RECYW111: MET_P110RECY -MET_TESTE -MET_P/V120 -MET_P/K110

Recy RECY_METW111: MET_W111 -MET_W111RECY
Max Numb Iter: 5 Type: Simultaneous
Wegstein Cnt: 3
VapFr Sens: 10.0000 Temp Sens: 1.0000
Press Sens: 1.0000 Enth Sens: 10.0000
Rel Flow Sens: 0.1000 Rel Comp Sens: 1.0000

Colu	K112: MET_W111RECY	MET_P113RECY	-GNC_K112	-MET_K112
	EN_W112			
Pump	P110: MET_K112	-MET_P110	EN_P110	
	Efficiency: 45.00%			
Tee	TEE_METP110: MET_P110	-MET_P/K113	-MET_P110A	
Heat	W113ABCD: AGUA_P/W113	-AGUA_W113	GNC_K112	-GNC_W113A
	DP1: 0.0076 Bar		DP2: 0.0260 Bar	
	UA Clc: 14586.98 KJ/C-h		Shell Passes: 0	
	UA Spc: --- KJ/C-h		Type: Simple	
Sepa	SEP_W113: GNC_W113A	-GC_W113	-GNC_W113	
Mix	B112: -MET_P/P113	MET_PURO	GC_W115	GC_W113
Pump	P113: MET_P/P113	-MET_P113	EN_P113	
	Efficiency: 75.00%			
Recy	RECY_P113: MET_P113	-MET_P113RECY		
	Max Numb Iter: 5		Type: Simultaneous	
	Wegstein Cnt: 3			
	VapFr Sens: 10.0000		Temp Sens: 1.0000	
	Press Sens: 1.0000		Enth Sens: 10.0000	
	Rel Flow Sens: 0.1000		Rel Comp Sens: 1.0000	
Adju	SET_METREP: Adj Var: Mass_Flow	of stream MET_PURO		
	Dep Var: Mass_Flow	of stream MET_TESTE		
	Target: 0.10 Kg/h			
	Tol: 0.0100 Kg/h	Step: 1.0000 Kg/h		
	Type: Secant			
Recy	RECY_GC_W115: GC_W115RECY	-GC_W115		
	Max Numb Iter: 5		Type: Simultaneous	
	Wegstein Cnt: 3			
	VapFr Sens: 10.0000		Temp Sens: 1.0000	
	Press Sens: 1.0000		Enth Sens: 10.0000	
	Rel Flow Sens: 0.1000		Rel Comp Sens: 1.0000	
Heat	W111AB: MET_P110A	-MET_P110W	MET_K111	-MET_W111
	DP1: 1.0232 Bar		DP2: 0.1148 Bar	
	UA Clc: 34273.05 KJ/C-h		Shell Passes: 2	
	UA Spc: --- KJ/C-h		Type: Simple	
Calc	DUTYK111: GAS_K110	MET_V120	-FLUXO_ENERG	
	DUTYK111			
Calc	ABS_INT_DEST: MET_P/K110	MET_P/K113	-FLOWSHT_X	
	FLOWSHT			

```

Cool  AQ_METK110: MET_K110      -MET_AQUEC      EN_AQUECIM |
          DP: 0.1000 Bar

Heat   W115AB: AGUA_P/W115  -AGUA_W115      MET_K113      -MET_W115
          DP1: 0.0264 Bar      DP2: 0.0002 Bar
          UA Clc: 4429.42 KJ/C-h  Shell Passes: 0
          UA Spc: ---          KJ/C-h      Type: Simple

Sepa   SEP_W115: MET_W115      -GC_W115        -GNC_W115

Colu   K113: MET_P/K113      MET_AQUEC      VAPOR_P/K113 -MET_K113
          -AGUA_K113

Adju  AJ_VAPORK113: Adj Var: Mass_Flow    of stream VAPOR_P/K113
          Dep Var: Temperature  of stream AGUA_K113
          Target: 98.00 C
          Tol: 0.1000 C          Step: 0.5000 Kg/h
          Type: Secant

Cmd   DEST_INT_ABS: GC_W115
          D:\HYSIM\CO_SIMUL.PRJ\DES05STR.CMD

```

SIMULAÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO - DESCRIÇÃO DAS CORRENTES

OBS.: Um número seguido por * , significa que o valor da variável foi especificado.

Stream		COQUE	OXIGENIO	NITROGENIO	MAT_PRIMA
Description					
Vapour frac.		0.0009	1.0000	1.0000	0.3376
Temperature	C	25.0000*	25.0000*	25.0000*	9.4145
Pressure	Bar	1.0132*	1.1632*	1.0132*	1.0132
Mass Flow	Kg/h	167.6672	209.7800*	2.8600*	380.3072*
Carbon	mole frac.	0.9700*	0.0000*	0.0000*	0.6495
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.9950*	0.0000*	0.3238
H2O	mole frac.	0.0100*	0.0000*	0.0000*	0.0067
S	mole frac.	0.0150*	0.0000*	0.0000*	0.0100
HCN	mole frac.	0.0025*	0.0000*	0.0000*	0.0017
Ammonia	mole frac.	0.0025*	0.0000*	0.0000*	0.0017
Nitrogen	mole frac.	0.0000*	0.0050*	1.0000*	0.0067
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
CO	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
CO2	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
H2S	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
COS	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
CS2	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000

Stream		GAS_C101GIBS	DUTY_GIBS	GAS_C101	DUTY_ESTEQ
Description					
Vapour frac.		0.9843	2.0000*	---	2.0000*
Temperature	C	1100.0000*	0.0000*	---	0.0000*
Pressure	Bar	1.0132	0.0000*	1.0132	0.0000*
Mass Flow	Kg/h	380.3086	0.0000*	380.3081	0.0000*
Enthalpy	KJ/h	592336.4031	-957070.0000	---	---
Carbon	mole frac.	0.0009	0.0000*	0.0000	0.0000*
Oxygen	mole frac.	0.0004	0.0000*	0.0020	0.0000*
H2O	mole frac.	0.0031	0.0000*	0.0000	0.0000*
S	mole frac.	0.0148	0.0000*	0.0094	0.0000*
HCN	mole frac.	0.0025	0.0000*	0.0025	0.0000*
Ammonia	mole frac.	0.0025	0.0000*	0.0025	0.0000*
Nitrogen	mole frac.	0.0099	0.0000*	0.0099	0.0000*
Hydrogen	mole frac.	0.0068	0.0000*	0.0068	0.0000*
CO	mole frac.	0.9551	0.0000*	0.9583	0.0000*
CO2	mole frac.	0.0040	0.0000*	0.0040	0.0000*
H2S	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0031	0.0000*
COS	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0006	0.0000*
CS2	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0009	0.0000*

Stream		GAS_V110	AGUA_POCO	AGUA_P111	GAS_K110	AGUA
Description						
Vapour frac.		1.0000	0.0000	0.0000		1.0000
Temperature C		34.0000*	24.9190	25.0000*		25.0298
Pressure Bar		11.8733*	4.0133*	13.3133*		11.8733
Mass Flow Kg/h		380.3072*	967.4247	967.4246*		379.0632
Enthalpy KJ/h		120278.3852	-1.85315E+06	-1.85196E+06		116312.0706
Hydrogen	mole frac.	0.0069*	0.0000*	0.0000		0.0069
H2O	mole frac.	0.0000*	1.0000*	1.0000		0.0030
Nitrogen	mole frac.	0.0100*	0.0000*	0.0000		0.0100
Oxygen	mole frac.	0.0020*	0.0000*	0.0000		0.0020
CO	mole frac.	0.9674*	0.0000*	0.0000		0.9699
CO2	mole frac.	0.0040*	0.0000*	0.0000		0.0040
H2S	mole frac.	0.0031*	0.0000*	0.0000		0.0029
CS2	mole frac.	0.0009*	0.0000*	0.0000		0.0006
COS	mole frac.	0.0006*	0.0000*	0.0000		0.0006
Methanol	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000		0.0000
HCN	mole frac.	0.0025*	0.0000*	0.0000		0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0025*	0.0000*	0.0000		0.0000

Stream		AGUA_K110	MET_P/K110	GAS_K110	MET_K110
Description					
Vapour frac.		0.0000	0.0000	0.9997	0.0000
Temperature C		25.9520	22.3994	18.5511	19.9559
Pressure Bar		11.8733	16.1901	11.8733	11.8733
Mass Flow Kg/h		968.6686	31.6500*	381.7689	28.9443
Enthalpy KJ/h		-1.84791E+06	-30728.8598	114109.4775	-28714.7386
Hydrogen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0068	0.0000
H2O	mole frac.	0.9986	0.0009	0.0001	0.0442
Nitrogen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0100	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0020	0.0000
CO	mole frac.	0.0000	0.0000	0.9644	0.0019
CO2	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0039	0.0004
H2S	mole frac.	0.0001	0.0000	0.0029	0.0006
CS2	mole frac.	0.0001	0.0018	0.0002	0.0086
COS	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0006	0.0003
Methanol	mole frac.	0.0000	0.9973	0.0091	0.9438
HCN	mole frac.	0.0006	0.0000	0.0000	0.0001
Ammonia	mole frac.	0.0006	0.0000	0.0000	0.0000

Stream		MET_V120	CO_PURO	MET_K111	MET_P/V120
Description					
Vapour frac.		0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
Temperature C		-4.0000*	-3.9446	0.9242	22.3994
Pressure Bar		15.6785	11.8236	11.8332	16.1901
Mass Flow Kg/h		2906.0000*	369.9882	2917.7808	2906.0000
Enthalpy KJ/h		-3.08518E+06	102289.7833	-3.03908E+06	-2.82142E+06
Hydrogen	mole frac.	0.0000	0.0070	0.0000	0.0000
H2O	mole frac.	0.0009	0.0000	0.0009	0.0009
Nitrogen	mole frac.	0.0000	0.0099	0.0001	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000	0.0020	0.0000	0.0000
CO	mole frac.	0.0000	0.9785	0.0018	0.0000
CO2	mole frac.	0.0000	0.0003	0.0005	0.0000
H2S	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0004	0.0000
CS2	mole frac.	0.0018	0.0000	0.0018	0.0018
COS	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0001	0.0000
Methanol	mole frac.	0.9973	0.0024	0.9944	0.9973
HCN	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Stream		EN_V120	EN_P111	FLUXO_ENERG	MET_W111
Description					
Vapour frac.		2.0000*	2.0000*	2.0000*	0.0000
Temperature C		0.0000*	0.0000*	0.0000*	50.0000*
Pressure Bar		0.0000*	0.0000*	0.0000*	11.7184
Mass Flow Kg/h		0.0000*	0.0000*	0.0000*	2917.7808
Enthalpy KJ/h		263762.1250	1190.4369	34274.5703	-2.53972E+06
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
H2O	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0009
Nitrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0001
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
CO	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0018
CO2	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0005
H2S	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0004
CS2	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0018
COS	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0001
Methanol	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.9944
HCN	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000

Stream		MET_P110A	MET_P110W	MET_P110RECY	MET_TESTE
Description					
Vapour frac.		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature C		69.9539	22.3967	22.3994*	22.3994
Pressure Bar		17.2133	16.1901	16.1901*	16.1901
Mass Flow Kg/h		2937.6199	2937.6199	2937.6245	-0.0255
Enthalpy KJ/h		-2.35267E+06	-2.85204E+06	-2.85212E+06	24.7461
Hydrogen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
H2O	mole frac.	0.0009	0.0009	0.0009*	0.0009
Nitrogen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
CO	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
CO2	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
H2S	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
CS2	mole frac.	0.0018	0.0018	0.0018*	0.0018
COS	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
Methanol	mole frac.	0.9973	0.9973	0.9973*	0.9973
HCN	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000

Stream		MET_W111RECY	MET_P113RECY	GNC_K112	MET_K112
Description					
Vapour frac.		0.0000	0.0000	0.0638	0.0000
Temperature C		50.0000*	29.3083*	63.5942	69.0331
Pressure Bar		11.7184*	4.2130*	1.1055	1.1055
Mass Flow Kg/h		2917.8069	1140.9150	1077.7024	2981.0198
Enthalpy KJ/h		-2.53992E+06	-1.06609E+06	-800020.7663	-2.40165E+06
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000	0.0000
H2O	mole frac.	0.0009*	0.0002*	0.0001	0.0009
Nitrogen	mole frac.	0.0001*	0.0000*	0.0001	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000	0.0000
CO	mole frac.	0.0018*	0.0001*	0.0049	0.0000
CO2	mole frac.	0.0005*	0.0013*	0.0029	0.0000
H2S	mole frac.	0.0004*	0.0027*	0.0040	0.0000
CS2	mole frac.	0.0018*	0.0058*	0.0059	0.0018
COS	mole frac.	0.0001*	0.0011*	0.0014	0.0000
Methanol	mole frac.	0.9945*	0.9885*	0.9803	0.9973
HCN	mole frac.	0.0000*	0.0002*	0.0002	0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000	0.0000

Stream		EN_W112	MET_P110	EN_P110	MET_P/K113
Description					
Vapour frac.		2.0000*	0.0000	2.0000*	0.0000
Temperature C		0.0000*	69.9539	0.0000*	69.9539
Pressure	Bar	0.0000*	17.2133*	0.0000*	17.2133
Mass Flow	Kg/h	0.0000*	2981.0198	0.0000*	43.4000*
Enthalpy	KJ/h	1.57718E+06	-2.38743E+06	14220.3174	-34758.1111
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
H2O	mole frac.	0.0000*	0.0009	0.0000*	0.0009
Nitrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
CO	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
CO2	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
H2S	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
CS2	mole frac.	0.0000*	0.0018	0.0000*	0.0018
COS	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
Methanol	mole frac.	0.0000*	0.9973	0.0000*	0.9973
HCN	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000

Stream		AGUA_P/W113	AGUA_W113	GNC_W113A	GC_W113
Description					
Vapour frac.		0.0000	0.0000	0.0095	0.0000
Temperature C		25.2000*	31.0660	29.0000*	29.0000
Pressure	Bar	4.6133*	4.6057	1.0795	1.0795
Mass Flow	Kg/h	7714.4321	7714.4321	1077.7024	1067.2855
Enthalpy	KJ/h	-1.47676E+07	-1.45724E+07	-995193.8868	-998114.9007
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000
H2O	mole frac.	1.0000*	1.0000	0.0001	0.0001
Nitrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0001	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000
CO	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0049	0.0001
CO2	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0029	0.0014
H2S	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0040	0.0029
CS2	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0059	0.0060
COS	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0014	0.0012
Methanol	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.9803	0.9881
HCN	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0002	0.0002
Ammonia	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000

Stream		GNC_W113	MET_P/P113	MET_PURO	GC_W115
Description					
Vapour frac.		1.0000	0.0000	0.0000	0.0001
Temperature C		29.0000	29.2493	25.2000*	33.2000*
Pressure Bar		1.0795	1.0132	1.0132*	1.0626*
Mass Flow Kg/h		10.4169	1140.9805	3.4064*	70.2886
Enthalpy KJ/h		2920.9900	-1.06671E+06	-3288.8880	-65313.0573
Hydrogen	mole frac.	0.0019	0.0000	0.0000*	0.0000*
H2O	mole frac.	0.0000	0.0002	0.0000*	0.0011*
Nitrogen	mole frac.	0.0149	0.0000	0.0000*	0.0000*
Oxygen	mole frac.	0.0043	0.0000	0.0000*	0.0000*
CO	mole frac.	0.5053	0.0001	0.0000*	0.0002*
CO2	mole frac.	0.1571	0.0013	0.0000*	0.0001*
H2S	mole frac.	0.1235	0.0027	0.0000*	0.0003*
CS2	mole frac.	0.0033	0.0059	0.0000*	0.0047*
COS	mole frac.	0.0251	0.0011	0.0000*	0.0001*
Methanol	mole frac.	0.1642	0.9885	1.0000*	0.9935*
HCN	mole frac.	0.0004	0.0002	0.0000*	0.0000*
Ammonia	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000*	0.0000*

Stream		MET_P113	EN_P113	GC_W115RECY
Description				
Vapour frac.		0.0000	2.0000*	0.0001
Temperature C		29.3083	0.0000*	33.2000*
Pressure Bar		4.2130*	0.0000*	1.0626*
Mass Flow Kg/h		1140.9805	0.0000*	70.2893
Enthalpy KJ/h		-1.06609E+06	617.3256	-65312.1141
Hydrogen	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0000*
H2O	mole frac.	0.0002	0.0000*	0.0011*
Nitrogen	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0000*
Oxygen	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0000*
CO	mole frac.	0.0001	0.0000*	0.0002*
CO2	mole frac.	0.0013	0.0000*	0.0001*
H2S	mole frac.	0.0027	0.0000*	0.0003*
CS2	mole frac.	0.0059	0.0000*	0.0047*
COS	mole frac.	0.0011	0.0000*	0.0001*
Methanol	mole frac.	0.9885	0.0000*	0.9935*
HCN	mole frac.	0.0002	0.0000*	0.0000*
Ammonia	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0000*

Stream		MET_K110	MET_P/K113	VAPOR_P/K113	MET_AQUEC
Description					
Vapour frac.		0.0001	0.0000	1.0000*	0.0001
Temperature C		19.9559*	69.9539*	148.0387	25.0000*
Pressure Bar		11.8733*	17.2133*	4.5133*	11.7733
Mass Flow Kg/h		28.9443	43.4000	33.5626*	28.9443
Enthalpy KJ/h		-26531.9609	-31348.8273	26237.2149	-26012.8867
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
H2O	mole frac.	0.0442*	0.0009*	1.0000*	0.0442
Nitrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000
CO	mole frac.	0.0019*	0.0000*	0.0000*	0.0019
CO2	mole frac.	0.0004*	0.0000*	0.0000*	0.0004
H2S	mole frac.	0.0008*	0.0000*	0.0000*	0.0008
CS2	mole frac.	0.0086*	0.0018*	0.0000*	0.0086
COS	mole frac.	0.0003*	0.0000*	0.0000*	0.0003
Methanol	mole frac.	0.9438*	0.9973*	0.0000*	0.9438
HCN	mole frac.	0.0001*	0.0000*	0.0000*	0.0001
Ammonia	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.0000*	0.0000

Stream		EN_AQUECIM	MET_K113	AGUA_K113	AGUA_P/W115
Description					
Vapour frac.		2.0000*	1.0000	0.0051	0.0000
Temperature C		0.0000*	65.5968	98.0219	25.2000*
Pressure Bar		0.0000*	1.0628	1.0628	4.6133*
Mass Flow Kg/h		0.0000*	70.3613	35.5455	7714.4321
Enthalpy KJ/h		519.0742	25058.2373	-55781.4842	-1.48344E+07
Hydrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000*
H2O	mole frac.	0.0000*	0.0011	0.9794	1.0000*
Nitrogen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000*
Oxygen	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000*
CO	mole frac.	0.0000*	0.0008	0.0000	0.0000*
CO2	mole frac.	0.0000*	0.0002	0.0000	0.0000*
H2S	mole frac.	0.0000*	0.0003	0.0000	0.0000*
CS2	mole frac.	0.0000*	0.0047	0.0000	0.0000*
COS	mole frac.	0.0000*	0.0001	0.0000	0.0000*
Methanol	mole frac.	0.0000*	0.9927	0.0206	0.0000*
HCN	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000*
Ammonia	mole frac.	0.0000*	0.0000	0.0000	0.0000*

Stream		AGUA_W115	MET_W115	GC_W115	GNC_W115
Description					
Vapour frac.		0.0000	0.0010	0.0000	1.0000
Temperature C		27.7970	33.2000*	33.2000	33.2000
Pressure	Bar	4.5869	1.0626	1.0626	1.0626
Mass Flow	Kg/h	7714.4321	70.3613	70.2893	0.0721
Enthalpy	KJ/h	-1.47494E+07	-59942.7556	-59963.2802	20.5247
Hydrogen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0027
H2O	mole frac.	1.0000	0.0011	0.0011	0.0001
Nitrogen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0207
Oxygen	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0057
CO	mole frac.	0.0000	0.0008	0.0002	0.5641
CO2	mole frac.	0.0000	0.0002	0.0001	0.0869
H2S	mole frac.	0.0000	0.0003	0.0003	0.0290
CS2	mole frac.	0.0000	0.0047	0.0047	0.0491
COS	mole frac.	0.0000	0.0001	0.0001	0.0015
Methanol	mole frac.	0.0000	0.9927	0.9935	0.2402
HCN	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Ammonia	mole frac.	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

SIMULAÇÃO DA PLANTA DE MONÓXIDO DE CARBONO - DESCRIÇÃO DAS COLUNAS

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K110_AGUA

**** Column Input ****

Number of Real Stages 12
 Stage 1 Pressure 11.873 Bar
 Stage 12 Pressure 11.873 Bar
 Stage 1 Temperature Estimate 25.000 C
 Stage 12 Temperature Estimate 28.000 C
 Feed stream GAS_V110 enters on stage 12
 Feed stream AGUA_P111 enters on stage 1
 Overhead Vapour Estimated Flow 375.0000 Kg/h
 Overhead vapour product goes to stream GAS_K110AGUA
 Bottom liquid product goes to stream AGUA_K110
 Note - stage efficiencies are being used!

**** Specifications ****

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K110_AGUA

**** Stage Efficiencies ****

Stage	Efficiency
1	0.500000
2	0.500000
3	0.500000
4	0.500000
5	0.500000
6	0.500000
7	0.500000
8	0.500000
9	0.500000
10	0.500000
11	0.500000
12	0.500000

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K110_MET

**** Column Input ****

Number of Real Stages 4
 Stage 1 Pressure 11.873 Bar
 Stage 4 Pressure 11.873 Bar
 Stage 1 Temperature Estimate 18.400 C
 Stage 4 Temperature Estimate 21.000 C
 Feed stream MET_P/K110 enters on stage 1
 Feed stream GAS_K110AGUA enters on stage 4
 Overhead Vapour Estimated Flow 375.0000 Kg/h
 Overhead vapour product goes to stream GAS_K110
 Bottom liquid product goes to stream MET_K110
 Note - stage efficiencies are being used!

**** Specifications ****

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K110_MET

**** Stage Efficiencies ****

Stage	Efficiency
1	0.561800
2	0.561800
3	0.561800
4	0.561800

Hyprotech's Process Simulator HYSIM!- Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K111

**** Column Input ****

Number of Real Stages 22
 Stage 1 Pressure 11.824 Bar
 Stage 22 Pressure 11.833 Bar
 Stage 1 Temperature Estimate -4.000 C
 Stage 22 Temperature Estimate 2.000 C
 Feed stream MET_V120 enters on stage 1
 Feed stream GAS_K110 enters on stage 22
 Feed stream FLUXO_ENERG enters on stage 16
 Overhead Vapour Estimated Flow 370.0000 Kg/h
 Overhead vapour product goes to stream CO_PURO
 Bottom liquid product goes to stream MET_K111
 Note - stage efficiencies are being used!

**** Specifications ****

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K111

**** Stage Efficiencies ****

Stage	Efficiency
1	0.561800
2	0.561800
3	0.561800
4	0.561800
5	0.561800
6	0.561800
7	0.561800
8	0.561800
9	0.561800
10	0.561800
11	0.561800
12	0.561800
13	0.561800
14	0.561800
15	0.561800
16	0.561800
17	0.561800
18	0.561800
19	0.561800
20	0.561800
21	0.561800
22	0.561800

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K112

**** Column Input ****

Number of Real Stages 23
 Stage 1 Pressure 1.106 Bar
 Stage 23 Pressure 1.106 Bar
 Stage 1 Temperature Estimate 63.600 C
 Stage 23 Temperature Estimate 69.000 C
 Feed stream MET_W111RECY enters on stage 1
 Feed stream MET_P113RECY enters on stage 1
 Overhead Vapour Estimated Flow 1088.0000 Kg/h
 Side Exchanger on stage 23 is energy stream EN_W112
 Overhead vapour product goes to stream GNC_K112
 Bottom liquid product goes to stream MET_K112
 Note - stage efficiencies are being used!

**** Specifications ****

1: Temperature on stage 1 is to be 63.600 C

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name AS121191.SIM
 Time 18:10:06 Prop Pkg PR Column Name K112

**** Stage Efficiencies ****

Stage	Efficiency
1	0.550000
2	0.550000
3	0.550000
4	0.550000
5	0.550000
6	0.550000
7	0.550000
8	0.550000
9	0.550000
10	0.550000
11	0.550000
12	0.550000
13	0.550000
14	0.550000
15	0.550000
16	0.550000
17	0.550000
18	0.550000
19	0.550000
20	0.550000
21	0.550000
22	0.550000
23	1.000000

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name D121191.SIM
 Time 18:9:28 Prop Pkg Wilson Column Name K113

**** Column Input ****

Number of Real Stages 18
 Stage 1 Pressure 1.063 Bar
 Stage 18 Pressure 1.063 Bar
 Stage 1 Temperature Estimate 66.000 C
 Stage 18 Temperature Estimate 98.000 C
 Feed stream MET_P/K113 enters on stage 1
 Feed stream MET_HEAT enters on stage 7
 Feed stream VAPOR_P/K113 enters on stage 18
 Overhead Vapour Estimated Flow 70.0000 Kg/h
 Overhead vapour product goes to stream MET_K113
 Bottom liquid product goes to stream AGUA_K113
 Damping Factor is 0.25000
 Note - stage efficiencies are being used!

**** Specifications ****

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UNICAMP
 Date 23/04/92 Version C1.51 Case Name D121191.SIM
 Time 18:9:28 Prop Pkg Wilson Column Name K113

**** Stage Efficiencies ****

Stage	Efficiency
1	0.933000
2	0.933000
3	0.933000
4	0.933000
5	0.933000
6	0.933000
7	0.933000
8	0.933000
9	0.933000
10	0.933000
11	0.933000
12	0.933000
13	0.933000
14	0.933000
15	0.933000
16	0.933000
17	0.933000
18	0.933000

Bibliografia

- [1] Astarita, G., Savage, D.W. and Bisio, A., "Gas Treating with Chemical Solvents", John Wiley & Sons.
- [2] Barash, M. and Gooderham, W.J., "Gas", A. Wheaton & Co. (1971).
- [3] BASF, "Manual de Operação da Planta de Monóxido de Carbono", 1982.
- [4] Bassyoni, A.A., McDaniel, R. and Holland, C.D., "Examination of the use of mass transfer rate expressions in the description of packed distillation columns-II", Chem. Eng. Sci., 25, 437 (1970).
- [5] Biegler, L.T., "Chemical Process Simulation", Chem. Eng. Progr., 85, 50 (1989).
- [6] Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N., "Transport Phenomena", John Wiley & Sons, New York (1960).
- [7] Chang, T., Rousseau, R.W. and Ferrel, J.K., "Use of the Soave Modification of the Redlich-Kwong Equation of State for Phase Equilibrium Calculations. Systems Containing Methanol", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 22, 462 (1983).

- [8] Gmehling, J. and Onken, U., "Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection", 1977.
- [9] Goldstein, L.J., "Transferência de Calor Industrial", Departamento de Engenharia Térmica e de Fluidos, Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), São Paulo (1987).
- [10] Hitch, D.M., Rousseau, R.W. and Ferrell, J.K., "Simulation of Continuous-Contact Separation Processes: Multi-component, Adiabatic Absorption", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 25, 699 (1986).
- [11] Hochgesand, G., "Rectisol and Purisol", Ind. Eng. Chem., 62, 37 (1970).
- [12] Holland, C.D., "Multicomponent Distillation", Prentice-Hall Inc. (1963).
- [13] Holland, C.D. and McMahon, K.S., "Comparison of vaporization efficiencies with Murphree-type efficiencies in distillation-I", Chem. Eng. Sci., 25, 431 (1970).
- [14] Husain, A., "Chemical Process Simulation", John Wiley & Sons, Inc., New York (1986).
- [15] Hyprotech Ltd, "HYSIM - Users Guide", Canada (1991).
- [16] Kelly, R.M., "Use of Methanol as a Solvent in an Acid Gas Removal System Coupled with a Coal Gasifier I. Operation II. Simulation.", Ph.D. Thesis, North Carolina State University, Raleigh, North Carolina (1981).

- [17] Kelly, R.M., Rousseau R.W. and Ferrell, J.K., "Design of Packed, Adiabatic Absorbers: Physical Absorption of Acid Gases in Methanol", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 23, 102 (1984).
- [18] Kern, D.Q., "Process Heat Transfer", McGraw-Hill Book Company (1950).
- [19] Kirk, R.E. and Othmer, D.F., "Encyclopedia of Chemical Technology", The Interscience Encyclopedia, Inc., New York (1957).
- [20] Ludwig, E.E., "Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants", 2^a edition, Gulf Publishing Company, Houston, Texas (1979).
- [21] McCabe, W.C. and Smith J.A., "Unit Operations in Chemical Engineering", 2^a edition, McGraw-Hill, New York, N. Y. (1978).
- [23] McDaniel, R., Bassyoni, A.A. and Holland C.D., "Use of the results of field tests in the modeling of packed distillation columns and packed absorbers - III", Chem. Eng. Sci., 25, 633 (1970).
- [24] Newman, S.A., "Acid and Sour Gas Treating Processes", Gulf Publishing Company, Houston, Texas (1985).
- [25] Ower, E. and Pankhurst, R.C., "The Measurement of Air Flow", 4^a edition, Pergamon Press Ltd (1966).
- [26] Perry, R.H., Green, D.W. and Maloney, J.O., "Perry's Chemical Engineer's Handbook", 6^a edition, McGraw-Hill (1984).

- [27] Purdy, M.J., Felder, R.M. and Ferrell, J.K., "Coal Gasification in a Pilot Scale Fluidized Bed Reactor. 2. Gasification of a New Mexico Subbituminous Coal", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 23, 287 (1984).
- [28] Ravaglia, E. "Curso de Atualização de Combustíveis e Combustão", FDTE/EPUSP/IPT (1982).
- [29] Reid, C.R., Praunsnitz, J.M. and Poling, B.E., "The Properties of Gases and Liquids", 4ª edition, McGraw-Hill Book Company (1987).
- [30] Riesenfeld, F.C. and Kohl, A.L., "Gas Purification", 4ª edition, Gulf Publishing Company, Houston, Texas (1985).
- [31] Robertson, J.L., "The Ideal Process Simulator", Chem. Eng. Progr., 85, 62 (1989).
- [32] Russell, Richard A., "A flexible and reliable method solves single-tower and crudedistillation - column problems", Chem. Eng., 17, 53-59 (1983).
- [33] Schweitzer, P.A., "Handbook of Separation Techniques for Chemical Engineers", McGraw-Hill Book Company (1979).
- [34] Seader, J.D., "The Rate - based Approach for Modeling Staged Separations", Chem. Eng. Progr., 85, 41 (1989).
- [35] Sherwood, T.K. and Pigford, R.L., "Absorption and Extraction", 2ª edition, McGraw-Hill Book Company, New York, New York (1952).
- [36] Smool L.D. and Smith P.J., "Coal Combustion and Gasification", Plenum Press, New York (1985).

- [37] Treybal, R.E., "Mass Transfer Operations", 3a edition,
McGraw-Hill, New York, N. Y. (1980).