

Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Engenharia Química
Área de Concentração
Desenvolvimento de Processos Químicos

DESENVOLVIMENTO DE TÉCNICAS PARA MONTAGEM DE UM SISTEMA ESPECIALISTA APLICADO À ENGENHARIA DE SEPARAÇÕES

Autor: Luiz Fernando de Lima Luz Jr

Orientador: Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Campinas – São Paulo

Julho de 2001



UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

UNIDADE Be
 N.º CHAMADA:
T/UNICAMP
L979d
 V. _____ Ex. _____
 TOMBO BC/ 46427
 PROC. 16-392/01
 C D
 PREÇO R\$11,00
 DATA 15/09/01
 N.º CPD _____

CM00159632-0

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
 BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

L979d

Luz Júnior, Luiz Fernando de Lima
 Desenvolvimento de técnicas para montagem de
 um sistema especialista aplicado à engenharia de
 separações / Luiz Fernando de Lima Luz Jr. --Campinas,
 SP: [s.n.], 2001.

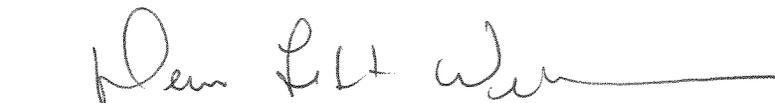
Orientador: Maria Regina Wolf Maciel.
 Tese (doutorado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Separação(Tecnologia). 3.
 Sistemas tutoriais inteligentes. 4. Azeotropo. 5. Controle
 preditivo. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II.
 Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
 Engenharia Química. III. Título.

Tese de Doutorado defendida por Luiz Fernando de Lima Luz Junior e aprovada em 30 de julho de 2001 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



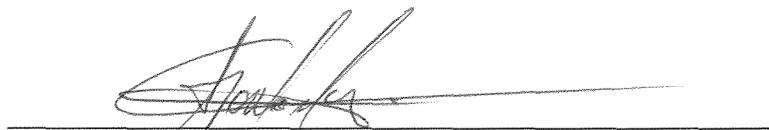
Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel - Orientadora



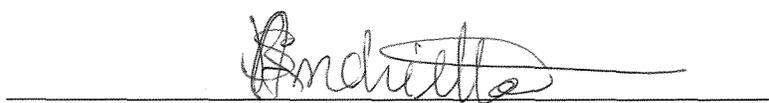
Prof. Dr. Denis Libert Westphalen (titular)



Prof. Dr. Reginaldo Guirardello (titular)

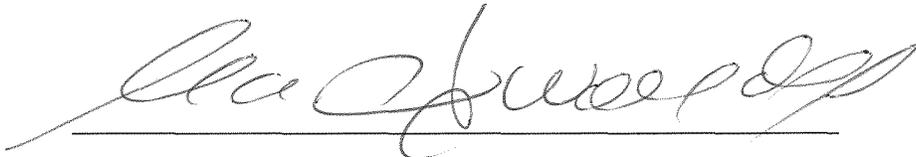


Prof. Dr. Carlos Alberto Ubirajara Gontarski (titular)



Prof. Dr. Silvio Roberto Andrietta (titular)

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em
Engenharia Química.

A handwritten signature in black ink, written in a cursive style, positioned above a horizontal line. The signature appears to read 'Maria Regina Wolf Maciel'.

Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Dedico este trabalho à minha esposa
Alexandra e aos meus filhos Luiz
Fernando e Eduardo Henrique

Agradecimentos

Agradeço a Professora Dra. Maria Regina Wolf Maciel por todo seu apoio e empenho dedicado ao meu trabalho e pela amizade construída ao longos dos anos, durante o mestrado e durante o doutoramento.

A minha esposa Alexandra pela confiança, compreensão e dedicação demonstrada durante todo o período do doutoramento e sempre. A meus dois filhos por, da maneira deles, entenderem os impedimentos resultantes das atividades desenvolvidas neste trabalho e que no futuro compreendam porque nasceram em Campinas.

A meus pais e irmãos por entenderem a necessidade de ficar longe e pelo amor que sempre demonstraram. A família da Alexandra pela mesma compreensão e pelo carinho.

A Carlos A. U. Gontarski e sua família pela amizade e apoio ao longo dos últimos anos e pelas discussões sobre este trabalho de tese. A família Moraes, Luiz Fernando, Cristina, Fernanda e Carolina por sempre nos garantirem, a mim e a minha família, o aconchego de lar que é importante para todos que estão longe de casa.

Aos amigos Renata T. Pinto e Jair Maggioni, Aline Costa e Martin Aznar, Marilsa A. Mota e Marlus P. Rolemberg pelo companheirismo e pela convivência proveitosa destes últimos anos. Aos amigos Henry F. Meier, Romildo P. Brito e José Jailson N. Alves pelos longos papos sobre teses e sobre a vida. Aos amigos Adilson J. Assis, Eduardo Dechechi, Claudia J. Vasconcelos e Fabiano R. Perioto que colaboraram em etapas deste trabalho de tese. Aos amigos do LDPS e do LOPCA pelas conversas, cafés e boas lembranças que sempre levarei comigo.

Ao departamento de engenharia química da UFPR pela compreensão quando está foi necessária.

Ao programa PICDT da CAPES pelo apoio financeiro no desenvolvimento deste trabalho.

A todos que não mencionei aqui e que contribuíram direta ou indiretamente para que o trabalho fosse realizado.

Resumo

A síntese otimizada de processos é uma preocupação constante do engenheiro químico. Este sempre deve ter disponível o maior número de informações possível para que a sua tomada de decisão seja a mais correta do ponto de vista econômico, ambiental e de obtenção dos produtos desejados. Neste trabalho de tese, enfoca-se a síntese de processos de separação, visto que as etapas de separação podem significar uma grande parte do custo total de um processo químico e/ou bioquímico, além de sua viabilidade ou não. Teve-se como objetivo desenvolver uma metodologia de definição, avaliação, análise e agrupamento de informações a respeito dos componentes e da mistura a ser separada. Desta forma, a seleção de processos de separação e o sequenciamento dos mesmos torna-se uma atividade acompanhada com o maior número de dados de projeto e de custos das etapas de separação. Foi desenvolvida uma interface especialista para dar acesso fácil às informações sobre propriedades físico-químicas de componentes puros e algumas propriedades de misturas. O sistema especialista retira todos os dados para os cálculos do banco de dados do simulador comercial ASPEN PLUS, sem nenhuma intervenção do usuário. Nesta interface, também se tem acesso a um procedimento desenvolvido em Fortran para estimativa da presença de azeótropos homogêneos ou heterogêneos, informação imprescindível durante a separação de misturas. Um parâmetro para auxílio no sequenciamento de colunas de destilação foi proposto e se mostrou bastante eficiente na definição de uma seqüência inicial que sempre foi bastante próxima da ótima. As simulações necessárias durante a operação do sistema especialista são realizadas usando o simulador e podem ser aproximadas ou rigorosas. Para alguns casos, o uso de diferentes modelos foi importante na escolha da etapa de separação. A interface desenvolvida permite fácil obtenção dos resultados obtidos através do uso de um navegador de internet, facilitando sobremaneira a visualização dos mesmos. Além do sistema especialista permitir o acompanhamento completo da síntese da seqüência de colunas (dimensões, especificações, custos, etc.), pode-se utilizá-lo para avaliar rapidamente o maior número de possibilidades, tirando qualquer dúvida a respeito da rota escolhida. Como alternativa a uma seqüência de colunas de destilação, mostrou-se o quanto seria eficiente o uso de uma coluna de destilação em batelada multicomponente operada utilizando técnicas avançadas de controle, como o controle por matriz dinâmica (*Dynamic Matrix Control*). Avaliou-se também como o posicionamento de sensores pode ser bastante importante na hora de se analisar uma estratégia de controle de processos. A ferramenta desenvolvida é, sem dúvida, bastante eficiente na ajuda ao engenheiro de processos durante a síntese de processos de separação.

Palavras chave: destilação, síntese de processos de separação, sistemas especialistas, destilação em batelada, controle preditivo.

Abstract

Processes synthesis is a constant concern of the chemical engineer. He must have as much information as possible available to make the correct decision from the economical and environmental point of view, besides guaranteeing the obtention of the desired products. In this work, the synthesis of separation processes is focused. The separation tasks may constitute a large part of the total costs of a chemical or biochemical process, besides determining its viability. The objective was to develop a methodology of definition, evaluation, analysis and information grouping with respect to components and to the mixture to be separated. In this way the selection of separation processes and their sequencing need to have the largest number of design data and costs of separation task available. An expert interface was developed to enable easy access to physical-chemical properties of pure components and to some properties of the mixture. The expert system reads all the data from the databanks of the commercial simulator Aspen Plus™ without any user intervention. The interface also gives access to FORTRAN routines, which estimates the presence of homogeneous and heterogeneous azeotropes, information that is very important for mixture separation. A parameter to aid in distillation columns sequencing was proposed and it was shown that it gives an initial sequence always very close to the optimal one. The simulations needed to the operation of the expert system were carried out using the simulator and can be rigorous or short-cut. In some cases, the use of different models was important for the choice of the separation task. The developed interface enables easy visualisation of the results by using an Internet browser. The expert system enables the complete understanding of the column sequence synthesis (dimensions, specifications, costs, etc.) and it can be used to the fast evaluation of the largest number of feasible sequences, not letting any doubt about the chosen one. It was shown that the use of a multicomponent batch distillation operated using advanced control techniques (Dynamic Matrix Control, for instance) would be a good choice as an alternative for a sequence of distillation columns. It was also shown that the positioning of the sensors is very important for the analysis of process control strategies. The developed tool is, without any doubt, very useful to aid the process engineer during separation processes synthesis.

Key-words: distillation, separation processes synthesis, expert systems, batch distillation, predictive control

Sumário

Agradecimentos	vi
Resumo	vii
Abstract	viii
Sumário	ix
Nomenclatura	xiii

CAPÍTULO 1. MOTIVAÇÃO PARA A REALIZAÇÃO DESTE PROJETO DE TESE **1**

CAPÍTULO 2. OBJETIVOS DESTE PROJETO DE TESE **5**

CAPÍTULO 3. SÍNTESE DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO: ESTADO DA ARTE **9**

3.1. INTRODUÇÃO	9
3.2. SÍNTESE DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO	9
3.3. MÉTODOS HEURÍSTICOS	10
3.3.1. <i>SÍNTESE DE SEQÜÊNCIAS DE DESTILAÇÃO</i>	10
3.3.2. <i>SEQÜÊNCIAS GERAIS DE SEPARAÇÃO</i>	10
3.4. ESTRATÉGIAS DE EVOLUÇÃO	12
3.4.1. <i>DESENVOLVIMENTO DA SEQÜÊNCIA INICIAL DE SEPARAÇÃO</i>	12
3.4.2. <i>IDENTIFICAR REGRAS DE EVOLUÇÃO</i>	13
3.4.3. <i>DETERMINAÇÃO DAS ESTRATÉGIAS DE EVOLUÇÃO</i>	14
3.5. MÉTODOS ALGORÍTMICOS- OTIMIZAÇÃO	14
3.6. PROCESSOS DE SEPARAÇÃO – A ENGENHARIA DAS SEPARAÇÕES	16

3.7. CARACTERÍSTICAS DO PROCESSO	27
3.7.1. <i>TIPO DE SEPARAÇÃO (CONCENTRAÇÃO)</i>	27
3.7.2. <i>PUREZA</i>	29
3.7.3. <i>RECUPERAÇÃO</i>	29
3.8. SEPARAÇÃO DE MISTURAS ZEOTRÓPICAS E AZEOTRÓPICAS	30
3.9. PROCESSOS PROGRAMADOS PARA INICIALMENTE PERTENCEREM AO SISTEMA ESPECIALISTA	37
3.10. CONCLUSÕES	38

CAPÍTULO 4. DESENVOLVIMENTO DA INTERFACE INTERATIVA E DO SISTEMA ESPECIALISTA **39**

4.1. INTRODUÇÃO	39
4.2. METODOLOGIA UTILIZADA	39
4.2.1. <i>CARACTERIZAÇÃO DA MISTURA</i>	40
<i>FLASH RESULTS OF THE INITIAL MIXTURE</i>	43
<i>FLASH RESULTS OF THE INITIAL MIXTURE</i>	43
<i>FLASH RESULTS OF THE INITIAL MIXTURE</i>	44
4.2.2. <i>TIPO DE OPERAÇÃO E CONDIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO</i>	45
4.2.3. <i>PROPRIEDADES DE COMPONENTES PUROS E RECOMENDAÇÃO DAS OPERAÇÕES DE SEPARAÇÃO</i>	45
4.3. SÍNTESE DOS PROCESSOS DE SEPARAÇÃO	46
4.3.1. <i>ETAPAS ENVOLVIDAS NA SÍNTESE DA SEQÜÊNCIA DE SEPARAÇÃO</i>	47
4.4. CONCLUSÕES	64

CAPÍTULO 5. ALGORITMO MULTIPROPÓSITO PARA CARACTERIZAÇÃO DE SISTEMAS LÍQUIDOS COMPLEXOS **67**

5.1. INTRODUÇÃO	67
5.2. IMPLEMENTAÇÃO DE UM ALGORITMO PARA O CÁLCULO DE <i>FLASH</i> MULTIFÁSICO ISOTÉRMICO	67
5.3. O CÁLCULO <i>FLASH</i>	68
5.4. MÉTODOS NUMÉRICOS EMPREGADOS	73

5.5. SUPERFÍCIES DE EQUILÍBRIO	75
5.6. CÁLCULO DOS AZEÓTROPOS	79
5.7. A PREDIÇÃO DE AZEÓTROPOS	82
5.8. CONCLUSÕES	89
<u>CAPÍTULO 6. A INTERFACE “UNIEXPERT”</u>	<u>91</u>
6.1. MENU MIXTURE (MISTURA)	92
6.1.1. <i>SUBMENU: NEW MIXTURE (NOVA MISTURA)</i>	93
6.1.2. <i>SUBMENU OLD MIXTURE (MISTURA EXISTENTE)</i>	97
6.1.3. <i>SUBMENU COMPONENTS CHARACTERISTICS (CARACTERÍSTICAS DOS COMPONENTES)</i>	97
6.1.4. <i>SUBMENU PRODUCTS CHARACTERISTICS (CARACTERÍSTICAS DOS PRODUTOS)</i>	99
6.1.5. <i>SUBMENU INITIAL MIXTURE FLASH (VAPORIZAÇÃO PARCIAL DA MISTURA INICIAL)</i>	100
6.1.6. <i>SUBMENU SETTINGS (CONFIGURAÇÕES)</i>	101
6.2. MENU RUN (EXECUTAR)	103
6.2.1. <i>SUBMENU PROCESSES (PROCESSOS)</i>	103
6.2.2. <i>SUBMENU AZEOTROPES PREDICTION – PREDIÇÃO DE AZEÓTROPOS BINÁRIOS E TERNÁRIOS.</i>	105
6.2.3. <i>SUBMENU EQUILIBRIUM SURFACES – SUPERFÍCIES DE EQUILÍBRIO</i>	106
6.2.4. <i>SUBMENU PROPERTY MATRIX – MATRIZ DAS PROPRIEDADES</i>	107
6.2.5. <i>SUBMENU RUN- EXECUTAR O SEQUENCIAMENTO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO</i>	108
6.3. MENU VIEW RESULTS (VISUALIZAR RESULTADOS)	112
6.4. CONCLUSÕES	114
<u>CAPÍTULO 7. AVALIAÇÃO DO PARÂMETRO CES MODIFICADO APLICADO AOS CASOS ESTUDOS</u>	<u>117</u>
7.1. INTRODUÇÃO	117
7.2. CASO ESTUDO A – SEPARAÇÃO DO 1-BUTENO	117
7.3. CASO ESTUDO B – MISTURA COM 6 COMPONENTES	122
7.4. CASO ESTUDO 3 – INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO INICIAL DA ALIMENTAÇÃO	131
7.5. CONCLUSÕES	144

<u>CAPÍTULO 8. ALTERNATIVA: PROCESSO DE DESTILAÇÃO EM BATELADA - CONTROLE DO PROCESSO</u>	<u>145</u>
8.1. INTRODUÇÃO	145
8.2. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO EM BATELADA	146
8.3. SEPARAÇÃO DE UMA MISTURA QUATERNÁRIA	147
8.4. IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA DE CONTROLE	153
8.4.1. <i>CONTROLE PID - PROPORCIONAL-INTEGRAL-DERIVATIVO</i>	<i>154</i>
8.4.2. <i>CONTROLE DMC - DYNAMIC MATRIX CONTROL</i>	<i>159</i>
8.4.3. <i>CASO ESTUDO</i>	<i>167</i>
8.4.4. <i>CONTROLE ADAPTATIVO</i>	<i>183</i>
8.5. CONCLUSÕES	186
<u>CAPÍTULO 9. CONCLUSÕES</u>	<u>189</u>
9.1. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	191

Nomenclatura

Latinas

a = parâmetro heurístico ajustável (valor entre 0,5 e 2)

CES = coeficiente de facilidade de separação

$CES_{\text{modificado}}$ = coeficiente de facilidade de separação

D e B = vazões molares dos produtos de topo e fundo, respectivamente

d , b = frações recuperadas no destilado e no fundo, respectivamente

f = $\min(D/B, B/D)$, razão entre o vazões molares do produto de topo e de fundo, D/B ou B/D , o qual for menor.

F = vazão molar da alimentação (mol/h)

$K_{i,1}$ = constante de equilíbrio em relação à fase líquida 1 para o componente i

$K_{i,2}$ = constante de equilíbrio em relação à fase líquida 2 para o componente i

L_1 = vazão calculada para a fase líquida 1 (mol/h)

L_2 = vazão calculada para a fase líquida 2 (mol/h)

n = número de componentes

N_{min} = número mínimo de estágios de equilíbrio

P = pressão (bar)

Q_{max}/Q = relação entre o valor máximo do calor fornecido no refeedor das separações possíveis e o calor fornecido da separação possível atual.

S = número de seqüências possíveis

sp = fração de divisão dos componentes nos produtos de topo e fundo

T = número de processos de separação ou temperatura (K)

TAC	= custo anualizado total (US\$)
V	= vazão calculada para a fase vapor (mol/h)
$x_{i,1}$	= composição da fase líquida 1 para o componente i
$x_{i,2}$	= composição da fase líquida 2 para componente i
y_i	= composição da fase vapor para o componente i
z_i	= composição da alimentação para o componente i

Índices

1,2	= fase líquida 1 e 2, respectivamente
i	= componente i
LK	= componente chave leve
LLK	= componente mais leve que o chave leve
HHK	= componente mais pesado que o chave pesado
HK	= componente chave pesado

Gregas

α	= volatilidade relativa entre os componentes chave leve e chave pesado, ou fator de separação empregado para a fase vapor no <i>flash</i> trifásico
β	= fator de separação empregado para as fases líquidas
ψ_1, ψ_2	= fatores de separação empregados nas equações de Nelson (1987), no <i>flash</i> trifásico
Δ	= ΔT , diferença de ponto de ebulição entre os componentes chave, ou $\Delta=100(\alpha-1)$, onde alfa é a volatilidade relativa entre os componentes chaves

CAPÍTULO 1.

MOTIVAÇÃO PARA A REALIZAÇÃO DESTE PROJETO DE TESE

A maioria dos processos químicos, petroquímicos e bioquímicos contém etapas envolvendo a obtenção de misturas multicomponentes como produtos ou a purificação de um ou mais componentes. Para cada etapa de separação, muitas operações unitárias podem ser viáveis, e, assim, a melhor seqüência de operações de separação deve ser estabelecida, ao se considerar um processo completo de separação. Até mesmo a viabilidade de uma síntese pode ser contestada, dificultada ou encorajada dependendo das etapas finais de obtenção dos produtos.

Além disso, atualmente existem os apelos econômico-financeiros, as regulamentações ambientais e um incentivo cada vez maior para o desenvolvimento de produtos e, conseqüentemente, processos e, então, novamente a Engenharia das Separações desempenha papel relevante.

Convém destacar esta abrangência maior do termo “Engenharia” ao invés do acanhado “Processo de Separação”, uma vez que as atividades nesta área são hoje multidisciplinares envolvendo: termodinâmica, reação, otimização, síntese, controle, fenômenos de transporte e questões econômicas e ambientais.

No Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS), da FEQ/UNICAMP, desde sua fundação, tem-se trabalhado com a modelagem, simulação, otimização, e mais recentemente controle dos processos de separação difusionais, os quais podem apresentar algumas características bem diferentes entre si, as vezes, até para realizar a separação de um mesmo sistema e, assim, torna-se importante a preocupação em se utilizar o conhecimento gerado nestes trabalhos na escolha do melhor método para determinada condição de separação. Dentre os processos já estudados ou em estudos no LDPS, podem-se salientar: destilação extrativa, destilação azeotrópica, destilação em batelada, evaporação, extração líquido-líquido, destilação convencional (modelagem de não equilíbrio), destilação com reação, destilação com eletrólito, destilação molecular, absorção sem e com reação química, separação por membranas, adsorção, extração supercrítica,

crioconcentração, cristalização, cromatografia, ultrafiltração, entre outros (uns mais estudados e outros ainda no início). Além disso, várias consultas externas são feitas ao LDPS para avaliar a separação de misturas multicomponentes.

Um outro problema que, geralmente, acontece é a necessidade de, rapidamente, se escolher o melhor processo de separação para um dado sistema. Isto é uma tarefa complexa, primeiramente porque, embora esteja havendo um esforço dos pesquisadores da área, não há, ainda, disponíveis critérios determinísticos e/ou heurísticos para prontamente se apontar o melhor processo e/ou as respectivas condições operacionais.

Um outro aspecto a ser considerado é que, atualmente, existem interesses em processos de pequena escala, diluídos, de minimização de poluentes otimizado com menos demanda de energia e isto faz com que técnicas de separação mais convencionais sejam reavaliadas comparativamente e as mais novas (a que se convencionou chamar aqui de não convencionais) sejam mais profundamente estudadas, estabelecendo-se faixas de operações a serem representadas por modelos e simuladores próprios ou comerciais.

Assim sendo, há necessidade do desenvolvimento de programas para auxiliar nesta escolha, a qual demanda um grande estudo de viabilidade, flexibilidade e manuseio das principais variáveis para se manter a base de conhecimentos. A utilização de um sistema especialista é de extrema importância, pois ele possibilita uma decisão rápida e, ainda, cobrindo todas as possibilidades para uma dada separação.

Além disso, há de se desenvolver, ainda, vários modelos e métodos tanto para caracterização de sistemas, o que tem uma importância crucial neste nosso trabalho, quanto para cálculos mais rigorosos e robustos de processos e propriedades, atividades ainda não devidamente representadas na literatura.

Atualmente, existem disponíveis no mercado vários simuladores comerciais, cada um com a sua peculiaridade e potencialidade. Esta existência estimula e possibilita em muito o uso de sistemas especialistas para determinar fluxogramas de processos, os quais posteriormente podem ser calculados pelos simuladores, além de que, existindo as ferramentas com muitas possibilidades, é importante usá-las para se conhecer as suas restrições enquanto modelagem matemática e capacidade de abrangência.

Assim sendo, não se pode deixar de lado a importância do acoplamento entre sistemas especialistas e simuladores, tanto para aproveitamento dos vastos bancos de dados

disponíveis nos simuladores e possibilidades de cálculos rigorosos, quanto para verificação de soluções ótimas propostas pelo sistema especialista. Existem, portanto, grande motivação para o desenvolvimento de técnicas de síntese, uma vez que os simuladores comerciais oferecem possibilidade de cálculos rápidos e eficientes.

A preocupação ambiental em todos os seus níveis, inclusive minimização da geração de efluentes quanto ao uso de processos de separação não pode ser, atualmente, deixada de lado no desenvolvimento de um sistema especialista, pois mesmo sendo um processo viável tecnicamente, ele pode ser inviável ambientalmente, e esta consideração deve ser considerada pelo programa. Os problemas de minimização da geração de poluentes fazem com que todas as correntes de saída dos processos sejam levadas em conta no processo de síntese.

Outro ponto importante que motivou o desenvolvimento deste projeto foi a necessidade de desenvolvimento de processos de química fina, de produtos alimentares e de produtos de origem natural, os quais introduzem sistemas altamente complexos (sensíveis à temperatura, facilmente perdem a cor e sabor, além de substâncias nutritivas). Isto faz com que novos desenvolvimentos ou novas possibilidades de uso sejam realizados em relação a processos de separação, purificação e recuperação. Com isto, novas possibilidades estarão disponíveis, as quais podem talvez, efetivamente substituírem processos mais convencionais.

E, finalmente, com a importância e cada vez mais crescente aplicação prática de estratégias de controle avançado em processos já otimizados, é tarefa do engenheiro químico incorporá-lo em suas atividades rotineiras e, neste trabalho, haverá espaço para desenvolvimento nesta área também.

CAPÍTULO 2.

OBJETIVOS DESTE PROJETO DE TESE

Considerando-se as motivações todas descritas no capítulo anterior, os principais objetivos deste trabalho de tese são:

1) Desenvolver um sistema especialista para seleção e sequenciamento de processos de separação para misturas líquidas, considerando-se, inclusive, as etapas anteriores onde a mistura pode estar no estado gasoso (ou vapor). Ênfase será dada aos processos de destilação simples, extrativa, azeotrópica, extração líquido-líquido, destilação em batelada, adsorção, separação por membranas e *flasheamento*. A seleção mencionada contemplará dois itens adicionais em relação ao que se encontra na literatura hoje e que são da maior importância: aspectos ambientais e econômicos. O sistema estará pronto para que sejam incorporados em trabalhos posteriores todos os processos de separação apresentados na literatura, além de estar apto para que estratégias de controle sejam incorporadas no esquema de decisão.

2) Desenvolver uma interface interativa entre o usuário do programa especialista e o simulador de processos ASPEN PLUS. Toda parte de simulação de processos de separação e de custos do processo serão calculados com auxílio do simulador ASPEN PLUS. Além disso, serão apresentadas metodologias heurísticas de otimização dos processos, as quais farão uso de modelos termodinâmicos e de processos mais rigorosos, sem a necessidade de simplificações, o que deteriora, muitas vezes, as conclusões dos procedimentos convencionais apresentados na literatura, principalmente considerando-se misturas mais complexas, e também sem a necessidade de se adaptar a realidade física do processo às limitações matemáticas dos métodos numéricos. Neste ambiente interativo, o usuário terá disponível em suas mãos diversas informações que o auxiliarão na tomada de decisão, para a determinação de uma etapa de separação.

3) Propor uma metodologia de caracterização termodinâmica de sistemas binários e multicomponentes, além da identificação do estado de agregação dos componentes puros automaticamente. Com relação aos sistemas serão caracterizados, calculados e fornecidas informações a respeito do tipo de equilíbrio termodinâmico atingido (líquido-vapor,

líquido-líquido e líquido-líquido-vapor) e estados supercríticos. Será fornecida, ainda, a visualização gráfica destas informações através das Superfícies de Equilíbrio. Neste item, serão também exploradas a seleção de solventes e quantidade relativa a ser utilizada num dado processo. Vários softwares serão desenvolvidos, tais como *flash* trifásico, determinação automática de azeótropos binários e multicomponentes, homogêneos e heterogêneos, ponto de bolha multifásicos, além do desenvolvimento de metodologias para obtenção de parâmetros via banco de dados on-line e utilização das Superfícies de Equilíbrio.

4) Propor um mecanismo de caracterização dos principais processos de separação difusionais para separação de misturas. Será desenvolvida uma metodologia para proceder com esta caracterização em termos de agentes de separação, princípio da separação, variáveis operacionais e de projeto e de propriedades físicas e termodinâmicas de misturas e principalmente, de componentes puros.

5) Aplicar as metodologias e o sistema especialista desenvolvido no sequenciamento de colunas de destilação e otimizar o processo de separação global, considerando as variáveis importantes dos processos, tais como, razão de refluxo, número de estágios, localização do prato de alimentação e calor fornecido ao refeedor. É importante salientar que neste item todas aquelas características apontadas no Capítulo 1 (motivação) estão sendo consideradas.

6) Estudar a aplicação do processo da destilação em batelada como alternativa ao sequenciamento de colunas de destilação convencional devido à sua característica multipropósito e incorporar critérios de adaptação no sistema especialista. Este é um exemplo que ilustra a capacidade do sistema especialista em auxiliar tarefas cujo benefício, além dos já citados, é garantir flexibilidade ao processo selecionado, frente a perturbações naturais ou propositas que são pertinentes a qualquer processo real. Outra intenção, neste item, é proporcionar ao sistema especialista capacidade de tratar sistemas diluídos, recuperação de resíduos das etapas anteriores de separação (ou não; ou seja, processos novos) e colunas de destilação em batelada, em geral. Estas aplicações, por sua vez, têm adquirido interesse e importância devido ao potencial destas colunas em trabalharem com diversos tipos de misturas, composições iniciais, especificação qualquer de produto com uma única coluna padrão projetada (ou, seja, ao contrário das colunas contínuas, cujo projeto depende totalmente destes fatores). Este exemplo ainda será usado para mostrar a

aplicação de técnicas de controle avançado em todos os seus itens possibilitando o seu uso para diferentes condições operacionais, visto que o grande problema deste tipo de processo é o seu acompanhamento. Com isto, o sistema especialista será alimentado com informações preliminares da última etapa de síntese que é o controle.

CAPÍTULO 3.

SÍNTESE DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO: ESTADO DA ARTE

3.1. INTRODUÇÃO

Procura-se mostrar, nesta parte do trabalho, de forma objetiva, os diferentes tratamentos dados à síntese e desenvolvimento de sistemas especialistas para processos de separação. Assim, neste capítulo, serão mostrados os trabalhos mais recentes na área, enfatizando a importância do estudo e as problemáticas pertinentes, não só a cada processo de separação, mas também às interações entre eles.

3.2. SÍNTESE DE PROCESSOS DE SEPARAÇÃO

Uma exaustiva revisão da síntese de processos foi apresentada em Nishida *et al.* (1981). Eles abordaram tópicos específicos para síntese dos processos reacionais, dos processos de separação e de redes de trocadores de calor.

Quanto à síntese dos processos de separação, Nishida *et al.* (1981) dividiram-na em três categorias:

- a) métodos heurísticos - empregam regras heurísticas resultantes da experiência em engenharia, adquirida ao longo dos anos e de conhecimento dos processos de separação.
- b) estratégias evolucionárias - tentam identificar o melhor esquema de separação através de uma seqüência de aperfeiçoamento evolucionário.
- c) técnicas algorítmicas - usam vários algoritmos desenvolvidos na área de programação não linear.

3.3. MÉTODOS HEURÍSTICOS

Pode-se dividir estes métodos em duas classes: síntese de seqüências de destilação e síntese de seqüências usando outros processos de separação, além da destilação.

3.3.1. Síntese de Seqüências de Destilação

Vários trabalhos foram apresentados na literatura visando síntese de seqüências de colunas de destilação. Algumas observações de Freshwater e Henry (1975), após extenso trabalho computacional foram:

- 1) Variações consideráveis ocorrem na diferença de custo entre todas as seqüências de destilação possíveis para uma dada separação.
- 2) Variações pequenas (diferenças de custo) são mais restritas ao caso onde a alimentação é predominante nos componentes menos voláteis, enquanto diferenças de custo maiores ocorrem na situação reversa.
- 3) O valor absoluto do custo de todas as seqüências exibe uma variação considerável com a composição da alimentação.
- 4) Se não existem separações difíceis, os componentes devem ser removidos na ordem decrescente de volatilidade, um por um, como produtos de topo, exceto quando um produto for predominante; aí, então este deve ser removido primeiro.
- 5) Deixar a separação mais difícil para o final; foi, em vários casos, um fator dominante.

A principal dificuldade é o fato de que pode haver uma regra heurística predominante que leve a erros sérios de cálculos, ou um conjunto de regras conflitantes que precisam ser comparadas efetivamente uma com a outra de uma maneira bastante subjetiva.

3.3.2. Seqüências Gerais de Separação

Este é o problema que sempre se encontra durante o projeto de uma planta química. Duas questões devem ser respondidas:

- 1) Qual é o método de separação que será utilizado? (problema de seleção).

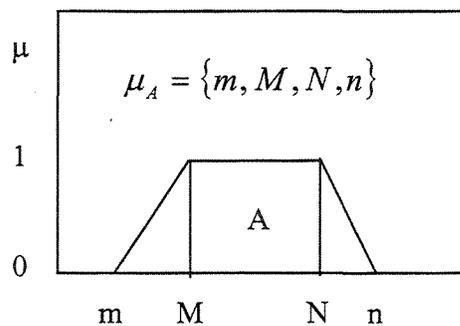
- 2) Qual é a seqüência em que as separações devem ser feitas? (problema de sequenciamento e reciclo).

Vários autores trabalharam somente com regras heurísticas, mas este tipo de procedimento tem suas dificuldades, muitas vezes chega-se a uma solução perto da ótima, mas não existe evolução para outras melhores, devido às limitações impostas pelo uso de somente regras heurísticas. Uma tendência é o uso das regras heurísticas junto com as estratégias evolucionárias e algorítmicas de forma a reduzir o número de seqüências de destilação possíveis. Isto reduz significativamente o risco de falhas.

Qian e Lien (1995) usaram um novo procedimento para interpretação retangular das regras heurísticas. Esta interpretação retangular apresenta limites retangulares para o uso da regra heurística. Na Figura 3.1 a regra heurística A só seria válida no trecho entre M e N. Qian e Lien (1995) usaram o conceito de número trapezoidal que é representado por:

$$\mu(x) = \{m, M, N, n\}$$

onde $\mu(x)$ pode ser visto com uma restrição na variável de projeto x. Representação gráfica pode ser vista na Figura 3.1. Nota-se na figura que a regra será parcialmente satisfeita entre m e M, totalmente satisfeita entre M e N, e parcialmente satisfeita entre N e n.



A é perfeitamente satisfeita na região [M,N]

A é parcialmente satisfeita na região [m,M] ou [N,n]

Figura 3.1. Representação trapezoidal

Usando este conceito, eles montaram um vetor de grau de aceitabilidade de N regras heurísticas. Eles também propuseram o uso de pesos para diferentes regras heurísticas.

3.4. ESTRATÉGIAS DE EVOLUÇÃO

Estas estratégias são divididas em três etapas que serão discutidas a seguir.

3.4.1. Desenvolvimento da Seqüência Inicial de Separação

A escolha da seqüência inicial de separação é de suma importância, pois quanto melhor ela for, mais perto se estará da solução ótima e mais rápido o ótimo será atingido. Muitos métodos heurísticos são empregados para gerar a seqüência inicial neste tipo de procedimento.

Seader e Westerberg (1977) sugeriram seis regras heurísticas para gerar a seqüência inicial e também para guiar a evolução para seqüências melhores. As seis regras foram:

- 1) Identifique as separações proibidas. Não são recomendadas separações por destilação quando a volatilidade relativa entre os componentes chaves é menor que 1,5.
- 2) Separações mais fáceis devem ser feitas primeiro.
- 3) Quando a fração molar dos componentes na alimentação varia bastante, mas a volatilidade relativa não, remova os componentes na ordem decrescente de fração molar na alimentação.
- 4) Quando nem a volatilidade relativa, nem a fração molar na alimentação variam consideravelmente, favoreça a seqüência direta, isto é, remova um componente no topo de cada vez.
- 5) Quando um agente de separação mássico é usado (destilação extrativa), remova-o no separador imediatamente posterior.
- 6) Quando produtos multicomponentes são desejados, favorecer a seqüência que produza o menor conjunto de produtos.

Deve-se ter em mente que estas regras constituem um procedimento para desenvolvimento da seqüência inicial de onde surgirão outras melhores. Um procedimento similar foi proposto por Nath e Motard (1978), para a seqüência inicial, considerando a destilação convencional e a destilação extrativa.

As regras empregadas foram:

- a) favorecer o menor conjunto de produtos
- b) favorecer a destilação
- c) as separações mais fáceis devem ser feitas primeiro
- d) uma separação usando um agente mássico não pode ser feita para isolar outro agente mássico.
- e) uma separação com volatilidade relativa entre componentes chaves menor que um mínimo não é aceitável.
- f) a pressão de operação deve ser próxima à ambiente
- g) fixar as frações dos componentes chaves nos valores pré-especificados
- h) fixar a razão de refluxo igual a 1,3 vezes a mínima para cada coluna.

3.4.2. Identificar Regras de Evolução

Uma vez gerada a seqüência inicial, a evolução pode começar. As regras de evolução devem ter as seguintes características:

- Eficiente: para criar seqüências de separação aceitáveis.
- Completa: para garantir através de aplicação repetida que todas as seqüências sejam obtidas.
- Racionalidade intuitiva: para gerar seqüências de separações, as quais não difiram significativamente da seqüência em evolução.

Por exemplo, Motard e Westerberg (1978), usaram as seguintes regras:

- Regra 1: Mover uma tarefa de separação para uma posição anterior na seqüência.
- Regra 2: Mudar o método de separação usado por uma tarefa.

Em cada caso, a mudança e a nova tarefa criarão diferentes produtos. A seqüência até o ponto onde ocorreu a mudança continua a mesma. Outra forma é colocar em discussão uma das regras heurísticas. Nath e Motard, (1978) desafiaram as primeiras regras heurísticas. A contestação foi limitada às primeiras 3 regras do item 3.4.1, que tratam especificamente da seleção dos separadores e da seqüência das separações.

3.4.3. Determinação das Estratégias de Evolução

Isto determinará como o sistema evolui para projetos melhores. Algumas alternativas são:

- Usando as regras de evolução, gerar todas as seqüências possíveis resultantes da seqüência corrente através de uma modificação. Dimensione e calcule custos de todas as alternativas e selecione a mais barata como a próxima seqüência corrente.
- Uma variação das estratégias acima permite o uso de heurísticos para a seleção do próximo fluxograma entre todas as alternativas geradas pela regra de evolução.
- Aplique as regras de evolução seletivamente e repetidamente (por exemplo, somente a regra 1) até um ótimo aparente, então, aplique outra(s) regra(s) para quebrar o impasse e gerar seqüências melhoradas.
- Aplicar a primeira alternativa após duas modificações sucessivas.

As estratégias de evolução constituem-se em uma importante ferramenta para engenheiros experientes, pois elas permitem o uso repetitivo de programas de simulação, em um meio interativo homem-computador, para melhorar o processo inteiro por modificações seqüenciais. Além disso, estratégias de evolução permitem grande flexibilidade das técnicas heurísticas e algorítmicas.

3.5. MÉTODOS ALGORÍTMICOS- OTIMIZAÇÃO

Nesta classe, consideram-se os métodos para se calcular a síntese da melhor seqüência de separação usando métodos de otimização bastante conhecidos. Todos os métodos algorítmicos são, em princípio, rigorosos, mas exigentes em termos de tempo e

esforço computacionais. Além disso, muitas vezes para se obter convergência, torna-se necessário recorrer-se a métodos simplificados e irreais, ou seja, tenta-se adaptar um problema físico real às possibilidades matemático-numéricas. Este é o procedimento mais freqüente encontrado na literatura. Neste trabalho, a intenção é justamente evitar isso. É comum o uso de regras heurísticas bastante aceitas para diminuir o espaço de pesquisa. Na Tabela 3.1, apresenta-se uma comparação entre os três métodos discutidos.

Tabela 3.1 Comparação entre os três métodos mais comuns de síntese de seqüência.

Métodos	Vantagens	Desvantagens
Heurísticos	Aplicado processualmente. Não requer embasamento matemático ou computacional. Pode gerar facilmente uma seqüência inicial para outros métodos	Heurísticas freqüentemente se contradizem ou sobrepõem-se. Requerem uma estratégia para implementação (qual regra heurística deve ser usada primeiro)
Evolucionários	Pode revelar novas seqüências durante as evoluções	Precisam de uma seqüência inicial gerada por outros métodos. Requerem uma estratégia para implementação (qual regra evolucionária deve ser usada primeiro?). Precisam de critérios quantitativos de desempenho (podem envolver projeto e custo de equipamento) Limitado pelo tamanho do problema (muitas seqüências precisam ser comparadas).
Otimização	Pode ser computacional. Pode encontrar facilmente seqüências sub – ótimas	Ignoram informações qualitativas (corrosão, venenos, características da alimentação). Dependente de uma equação de custo. Limitações no tamanho do problema.

Wahnschafft *et al.* (1991) desenvolveram o sistema de base de conhecimento *SPLIT*, para síntese de processos de separação. Os processos considerados no sistema foram a destilação normal, *flash*, separador (decantador), destilação azeotrópica, destilação extrativa e, finalmente, a extração líquido-líquido. No trabalho de Wahnschafft *et al.* (1991), o sistema combina múltiplas fontes de conhecimento de separação em um sistema integrado, chamado Quadro Negro (*blackboard*), com um software matemático de otimização. Eles utilizaram uma ferramenta comercial para desenvolvimento de sistemas especialistas (Knowledge Craft). O sistema também está sendo integrado com o simulador Aspen Plus. Eles trabalharam com processos usando a destilação azeotrópica. O banco de dados do software contém 150 componentes.

3.6. PROCESSOS DE SEPARAÇÃO – A ENGENHARIA DAS SEPARAÇÕES

Analisa-se a partir daqui como a literatura disponível trata a engenharia dos processos de separação.

A Engenharia das separações apresenta 3 tarefas primordiais:

- a separação de mistura
- a obtenção de produtos de alta pureza
- a recuperação de compostos

A cada uma delas está associada uma síntese. Vários métodos de separação podem, ainda, serem usados para cada uma destas tarefas. Para a separação de misturas líquidas, dentre outros, podem ser citados os seguintes processos:

- Destilação simples
- Destilação com eletrólitos
- Destilação azeotrópica
- Destilação extrativa
- Destilação com reação química
- Extração líquido-líquido

- Dessorção
- Adsorção
- Permeação por membranas
- Cristalização

Estes processos podem ser divididos, por exemplo, quanto ao agente de separação utilizado para promover a separação. Para a destilação simples e a cristalização, o agente de separação é o calor; para os demais o agente de separação será mássico (MSA) (as outras destilações requerem calor também). Dois tipos de agente de separação mássico podem ser empregados em processos de separação. Processos com introdução de um solvente que serão os métodos das Destilações, Extração Líquido-Líquido e Desorção, e processos com agente de separação sólido como a adsorção e a permeação por membranas.

O grande enfoque que será dado neste trabalho de tese é a relação entre o processo e a propriedade de componente puro como princípio de separação como ilustrado na Tabela 3.2.

A resolução de um problema de síntese de processo de separação deve considerar as seguintes informações e estas devem ser fornecidas ao sistema especialista (Luz Jr e Wolf-Maciel, 1999):

- 1) a mistura líquida de n-componentes a ser separada
- 2) as propriedades físicas da mistura (componentes e misturas)
- 3) as especificações dos produtos
- 4) a composição (e temperatura) da mistura a ser separada
- 5) as técnicas de separação potenciais

Deseja-se, então, como resposta do sistema especialista, os métodos e a seqüência de separação que forneçam:

1. os produtos desejados com as purezas desejadas
2. o menor custo de separação
3. um número limitado de projetos de processos possíveis e confiáveis.

Tabela 3.2. Exemplos de processos e suas respectivas propriedades fisico-químicas de interesse.

Operação Unitária	Tipo de Separação	Propriedades de Componente Puro Importantes
Absorção	Gás	parâmetro de solubilidade
Destilação Azeotrópica	Vapor-líquido	pressão de vapor, formação de azeótropos, parâmetro de solubilidade
Destilação criogênica	Vapor-líquido	pressão de vapor, calor de vaporização, pontos de ebulição
Cristalização	Sólido-líquido	ponto de fusão, calor de fusão no ponto de fusão
Desublimação	Sólido-vapor	ponto triplo (temperatura e/ou pressão)
Destilação	Vapor-líquido	pressão de vapor, calor de vaporização, ponto de bolha
Secagem	Sólido-vapor	pressão de vapor, difusividade
Destilação extrativa	Vapor-líquido	pressão de vapor, calor de vaporização, ponto de ebulição, parâmetro de solubilidade
<i>Flasheamento</i>	Vapor-líquido	pressão de vapor, calor de vaporização, ponto de ebulição
Fracionamento por espuma	Líquido	tensão superficial
Membranas (Separação de gases)	Gás	temperatura crítica, volume de Van der Waals
Troca Iônica	Líquido	carga iônica
Lixiviação	Sólido-líquido	parâmetro de solubilidade, difusividade
Extração líquido-líquido	Líquido-líquido	parâmetro de solubilidade

continuação da Tabela 3.2

Membranas (Líquido)	Líquido-gás	parâmetro de solubilidade, volume molar, raio de giração, afinidade com o carreador
Microfiltração	Líquido	tamanho, peso molecular
Adsorção em peneira molecular	Gás-líquido	diâmetro cinético, volume de Van der Waals, polarizabilidade, momento dipolar
Condensação parcial	Líquido-vapor	pressão de vapor, calor de vaporização, ponto de ebulição
Pervaporização	Líquido-vapor	volume molar, parâmetro de solubilidade e momento dipolar
<i>Stripping</i>	Gás-líquido	parâmetro de solubilidade
Sublimação	Sólido-vapor	ponto triplo (temperatura e/ou pressão)
Ultrafiltração	Líquido	tamanho, peso molecular

A estrutura para a separação de misturas líquidas é bastante complexa. Na Figura 3.2, a hierarquia completa de seleção/sequenciamento proposta por Barnicki e Fair (1990) é apresentada.

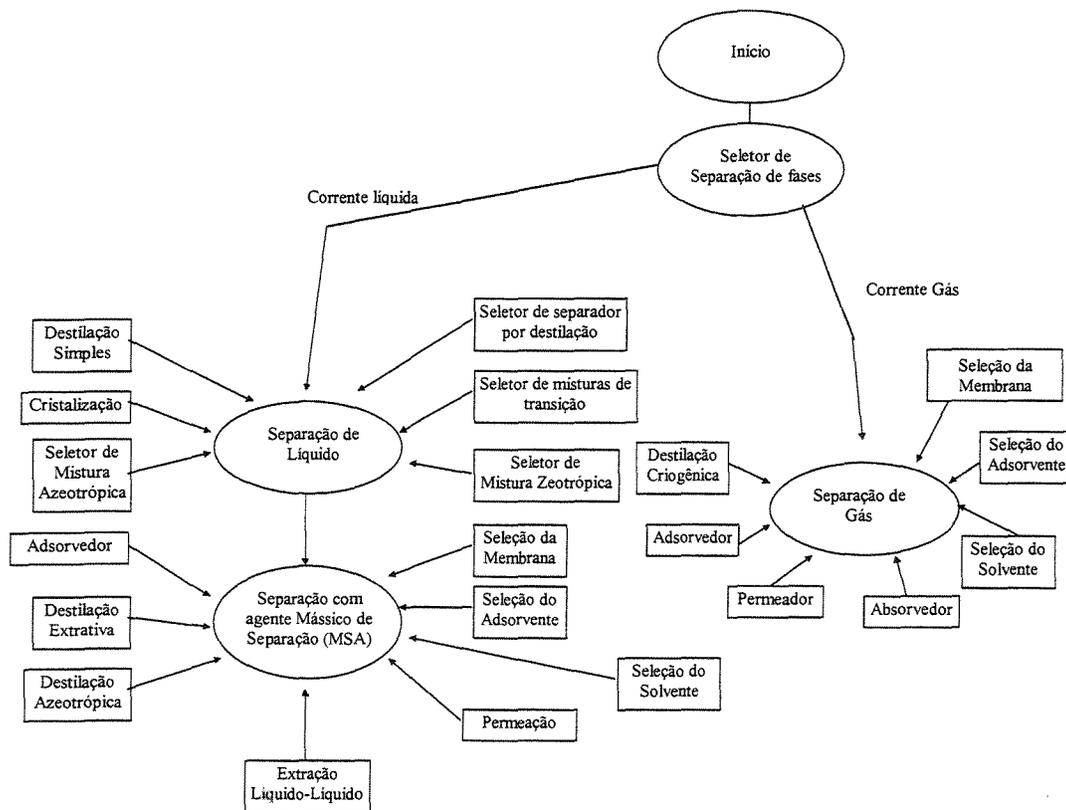


Figura 3.2. Esquema da estrutura de um sistema especialista para separação de misturas em geral.

Esta estrutura contém três sistemas especialistas:

1. O Sistema - Gerente: responsável pelo sequenciamento da separação
2. O Sistema - Seletor: responsável pela seleção do método de separação, seleção do agente mássico de separação
3. O Sistema - Projetista: responsável pelo projeto do equipamento de separação.

Normalmente, os métodos heurísticos publicados na literatura tratam com uma versão simplificada de um destes blocos. Nesta estrutura, o gerente da separação de líquido é o que trata da seqüência da separação.

Uma regra heurística frequentemente repetida na literatura (King, 1980, Rudd *et al.*, 1973) diz que o método de separação deve ser escolhido primeiro. Na estrutura aqui mostrada, o heurístico assume que todas as tarefas de seleção devem ser feitas primeiro

(todos os especialistas devem estar no topo da hierarquia de separação). Na maioria dos casos, dizer que não é necessário selecionar o processo de separação significa dizer que a destilação é assumida como a primeira opção de método de separação entre todos.

Assim, se o problema da seleção for inicialmente eliminado, só resta o problema do sequenciamento da divisão. Pode-se dizer que os problemas de seleção e sequenciamento podem ser completamente desacoplados. Entretanto, o método de seleção heurístico é muito restritivo e os problemas não são completamente desacoplados.

Nos processos MSA (*Mass Separation Agent*), o julgamento do método de operação não pode ser feito até que uma lista de potenciais solventes ou adsorventes esteja disponível. A escolha do solvente/adsorvente é influenciada pela composição da mistura à qual este será adicionado. Assim, o problema de seleção do método de separação é dependente da tarefa de seleção do solvente/adsorvente e no problema de sequenciamento da divisão (separação). A hierarquia de síntese de separação da Figura 3.2 reflete esta observação, tarefas de seleção e sequenciamento são distribuídas até o fim.

A forma com que a hierarquia é construída é regida por 2 princípios:

1. cálculos são feitos o mínimo possível. Nos níveis superiores da hierarquia, as decisões são baseadas em relações qualitativas deixando informações quantitativas para comparações finais no nível dos especialistas projetistas.
2. todos os outros métodos são comparados com a destilação.

A destilação é o primeiro método a ser considerado. Quando os resultados de outros métodos são equivalentes a ela, esta ainda é escolhida devido à sua confiabilidade e eficiência.

No topo da hierarquia proposta por Barnicki e Fair (1990) está o seletor de separação de fases. As informações utilizadas são dados de equilíbrio e pontos de ebulição normais, o que determina, se a separação será de uma mistura líquida, gasosa ou ambas.

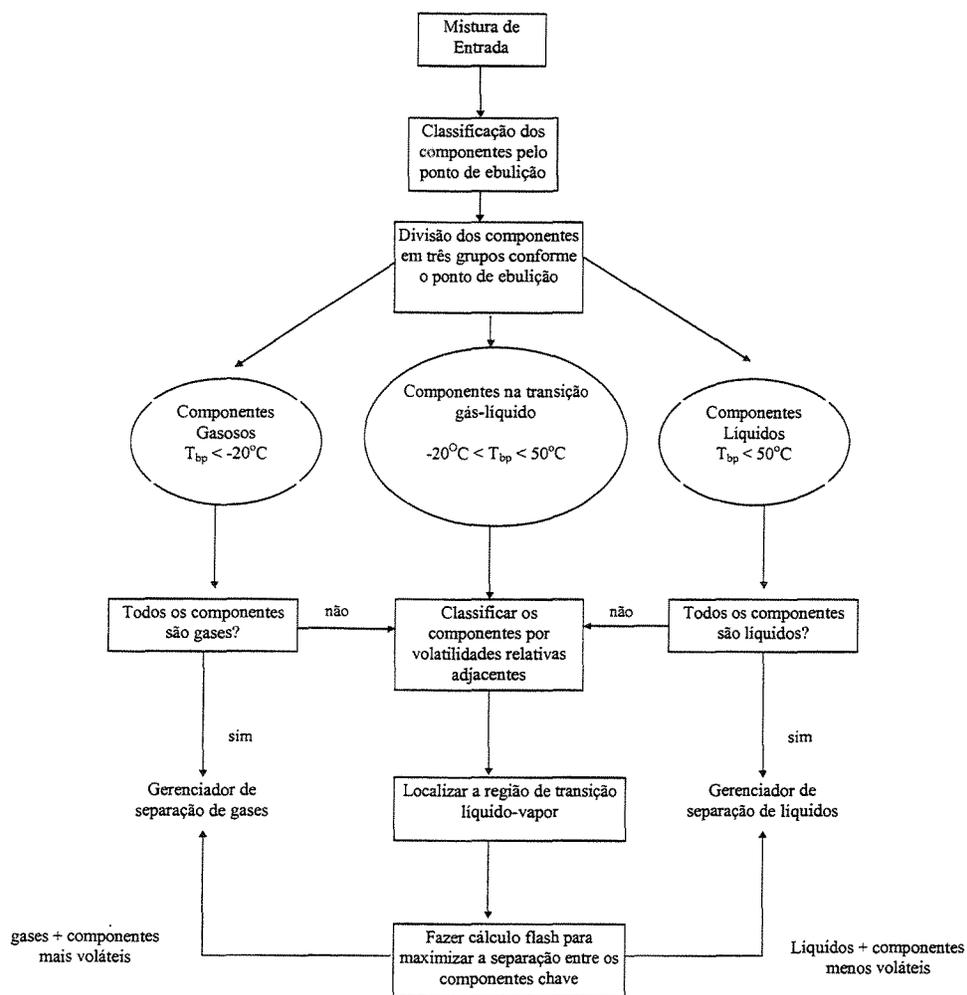


Figura 3.3. Esquema de separação de fases de uma mistura. (Barnicki e Fair, 1990)

O procedimento mostrado na Figura 3.3 divide a mistura de entrada em duas subcorrentes ($\downarrow\alpha$ - volatilidade relativa baixa e $\uparrow\alpha$ - volatilidade relativa alta). Embora alguns componentes possam se distribuir, são criados 2 problemas menores e independentes de sequenciamento. A remoção de um componente de uma mistura multicomponente reduzirá o número de seqüências de separação consideravelmente (uma ordem de magnitude ou mais).

O segundo propósito é a redução do problema de seleção. Para misturas gasosas, existem menos técnicas de separação que para misturas líquidas. Pela equação abaixo (Thompson e King (1972)) demonstra-se a vantagem desta divisão:

$$S = \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!} T^{n-1} \quad (3.1)$$

onde

n - número de componentes

T - métodos de separação

S - número de seqüências possíveis.

Supondo uma mistura com 6 componentes e 10 métodos de separação, pela equação 3.1, tem-se 4.200.000 seqüências possíveis. Fazendo a divisão e supondo a existência de 2 componentes não chaves que se distribuem, obtém-se duas misturas de 4 componentes. Supondo 4 métodos de separação para gases e 8 métodos de separação para líquidos, as seqüências possíveis são 320 e 2.560, respectivamente. Ocorreu uma redução de 99,9% no número de seqüências.

Na prática, a destilação a extremas temperaturas e pressões é, freqüentemente, muito cara. Outros métodos de separação nesta faixa competem com a destilação. Na tabela 3.3, as condições de temperatura e pressão para o processo de destilação são mostradas.

Tabela 3.3. Condições de temperatura (T) e pressão (P) para o processo de destilação.

Grupo	faixa do ponto de ebulição normal (°C)	Destilação / faixa de pressão (atm)	Tipo de condensador
Gás	$T_{bp} < -20$	$P > 25$	refrigeração
gás-líquido	$-20 < T_{bp} < 50$	$14,5 < P < 25$	parcial
Líquido	$T_{bp} > 50$	$P < 14,5$	total

Na faixa de transição gás-líquido pode ser melhor condensar estes componentes e, então, usar métodos de separação de líquidos para obtê-los, todavia não se deve esquecer que a separação de gases pode ser mais econômica.

Na literatura, normalmente, o primeiro propósito é achar, se possível, a melhor seqüência de destilação simples para a separação. O procedimento é mostrado na Figura 3.4.

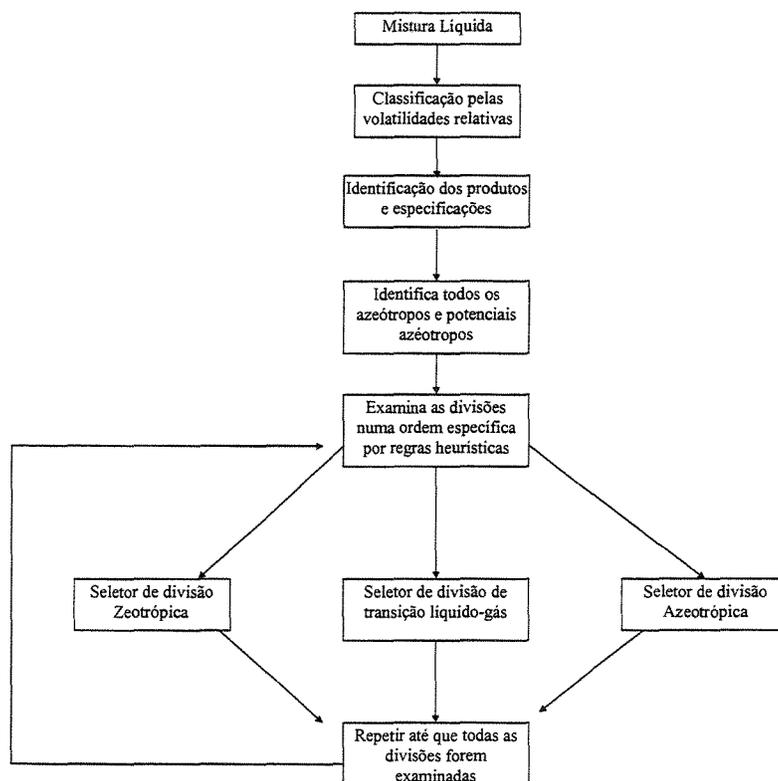


Figura 3.4. Separação de misturas líquidas.(Barnicki e Fair, 1990)

1. Identificar as correntes de produto e especificações dos produtos. Garantir que nenhuma separação desnecessária seja feita.
2. Classificar os componentes pela volatilidade relativa. Esta indica a facilidade da separação e a vantagem da separação por destilação simples.
3. Identificar todas as misturas azeotrópicas que possam interferir na especificação dos produtos. A existência de azeótropos requer considerações especiais de processamento. Deve ser tratada com mais informações.
4. Executar divisões (separações) na ordem especificada por um conjunto de regras heurísticas. Cada separação potencial é avaliada por um dos especialistas em

seleção de misturas. Se a destilação simples é o método mais favorável, então, a separação é feita e as subcorrentes são avaliadas, senão outros métodos são identificados. A próxima separação especificada é checada para a aplicação da destilação simples.

Brunet e Liu (1993) usaram o conceito de Matriz de designação de componentes proposta por Liu *et al.* (1990), para representar as alimentações e as correntes de produtos no sequenciamento de operações de separação. Este procedimento pode auxiliar na decisão de se fazer um *Bypass* de uma corrente de forma a simplificar o problema da separação. Eles usaram as equações de Kremser para achar o número de estágios teóricos (N) e as vazões e composições das correntes envolvidas. Estas equações são um método simplificado para o projeto de algumas operações de estágio de equilíbrio, como absorção, *stripping*, extração, extração sólido-líquido, adsorção e troca iônica, etc. (Wankat, 1988) Brunet e Liu (1993) consideraram os processos de absorção, *stripping* e extração no desenvolvimento do sistema especialista. Nota-se que estes processos necessitam da adição de um solvente, cuja vazão também deve ser otimizada. Eles citaram regras heurísticas para estimar o número de estágios teóricos, bem como os fatores de separação.

Brunet (1992) propôs uma função de avaliação heurística e esta foi empregada por Brunet e Liu (1993), para analisar diferentes fluxogramas gerados pelo sistema especialista EXSEP. Deve-se ter em mente que as diferentes regras não são vistas como sendo competidoras e/ou independentes, mas sim elas devem contribuir para decisões de projetos consensuais.

Uma análise de algumas propriedades relacionadas à separação de misturas líquidas é feita a seguir (Barnicki e Fair, 1990):

a) Volatilidade relativa (α)

Se $\alpha > 1,5$ - a destilação simples é operacionalmente o processo mais econômico.

Se $\alpha < 1,1$ - são necessários refluxos altos e um grande número de pratos. A destilação não é utilizada.

Se $1,1 < \alpha < 1,5$ - outros métodos de separação podem ser competitivos com a destilação simples.

b) Inclinação da curva de pressão de vapor

Se as inclinações das curvas de pressão de vapor diferem significativamente numa faixa de temperatura e pressão, então, pode-se alterar a volatilidade relativa para mais que 1,5. Estas condições dependem das condições das utilidades e dos materiais a serem processados.

c) Diferenças de pontos de congelamento.

Possíveis processos de cristalização requerem diferenças de 20 - 30°C nos pontos de congelamento de componente puro. E, ainda, estes devem ser próximos ou acima da temperatura ambiente para evitar aumento de custo com a refrigeração.

d) Similaridade de funções químicas

Solventes seletivos fisicamente para processos PSE (*Physical Solvent Entrainer* - processos com adição de solvente) só serão utilizados para a separação de componentes quimicamente diferentes. Homólogos de tamanhos similares e isômeros na mesma função química não podem ser geralmente separados por métodos PSE, devido à similaridade de propriedades físicas e solubilidade e seletividade similares em solventes.

e) Características de estrutura e de tamanho.

A adsorção em peneira molecular requer diferenças estruturais e de tamanho entre os componentes a serem separados. A seletividade é bastante afetada por estas propriedades usando zeólitas e peneiras de carvão. Os fornecedores de peneiras moleculares são a Union Carbide e a Sorbex. Até mesmo se a estrutura e o tamanho dos componentes são similares, a adsorção ainda pode ser empregada, desde que a polaridade varie.

f) Diferenças de polaridades

Adsorventes comerciais podem ser polares ou não polares. Solventes polares (sílica gel, alumina ativada e zeólitas) tendem a se ligar mais fortemente a componentes polares, e adsorventes apolares (carvão ativado) a componentes menos polares. Altas

seletividades podem ser atingidas se existe uma grande diferença de polaridade entre os adsorbatos desejados e o líquido não adsorvido. Mesmo para componentes com polaridades similares, porém com diferenças grandes de tamanho e de estrutura, a adsorção é ainda viável, conforme citado no item anterior.

h) Sensibilidade à temperatura

Alguns componentes podem decompor ou reagir desfavoravelmente na temperatura necessária para a destilação. Além disso, o ponto de congelamento pode ser muito alto para se destilar numa temperatura e pressão aceitáveis. As destilações simples, extrativa ou azeotrópica não podem ser utilizadas, porém a extração líquido-líquido, destilação molecular, adsorção ou a permeação por membranas podem ser aplicadas.

3.7. CARACTERÍSTICAS DO PROCESSO

Algumas características dos processos devem ser levadas em conta na elaboração do sistema especialista e no auxílio nas tomadas de decisão.

3.7.1. Tipo de separação (concentração)

As separações podem ser de misturas diluídas (Figura 3.5) ou concentradas (Figuras 3.6, 3.7e 3.8). Quando mais distante for a relação D (destilado) / B (produto de fundo) da unidade, outros métodos competem favoravelmente à destilação, onde D é a vazão de destilado e B a vazão de produto de fundo. A destilação de misturas diluídas normalmente não é econômica. Uma mistura é considerada diluída quando o total de destilado (D) ou do produto de fundo (B) é menor que 5% da alimentação.

Altas relações D/B têm efeito econômico maior que relações D/B baixas. Misturas compostas principalmente por componentes de baixo valor e baixo ponto de ebulição que sejam separadas de uma pequena quantidade ($< 10-15\%$) de um componente de baixo valor, mas com alto ponto de ebulição, requerem grandes quantidades de energia para vaporizar 85-90% da alimentação. Todas as formas de destilação (simples, extrativa e

azeotrópica) podem não ser recomendadas como métodos potenciais para separações diluídas.

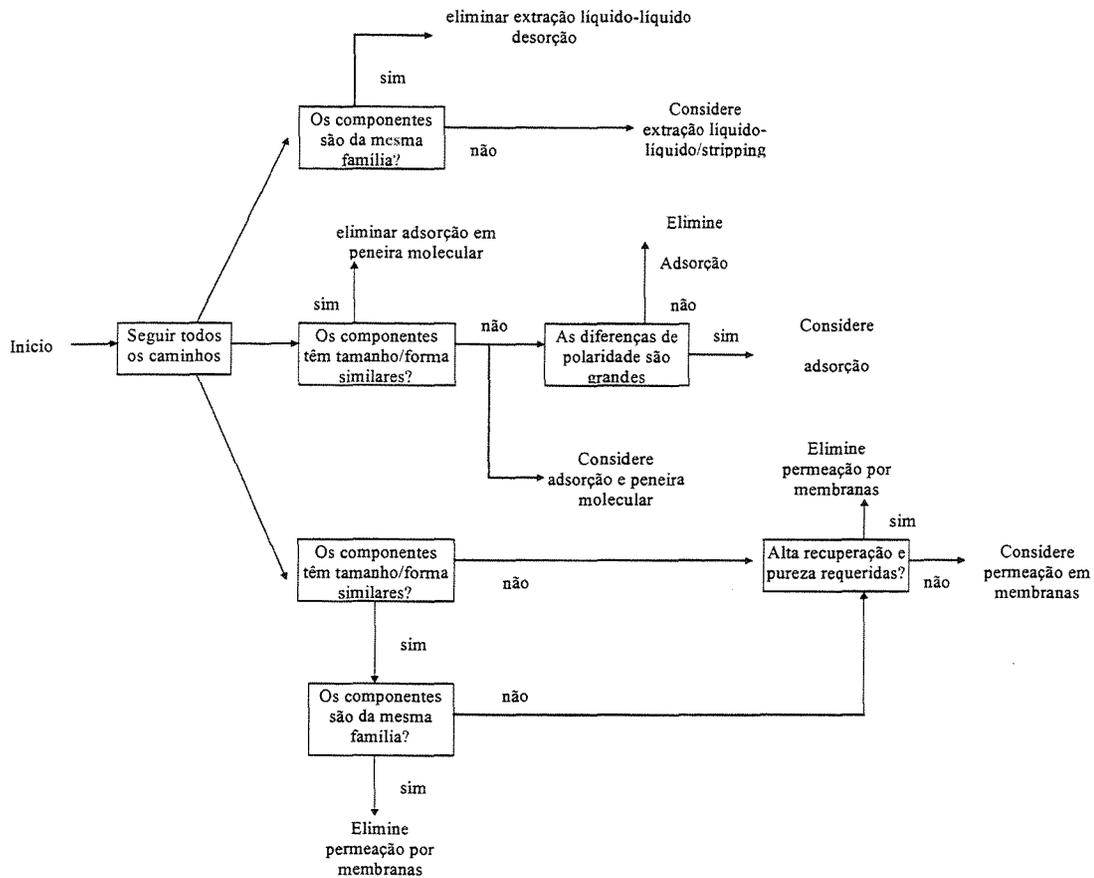


Figura 3.5. Separação de misturas líquidas diluídas. (Barnicki e Fair, 1990)

Nos últimos anos, a adsorção ganhou espaço como método de separação de misturas concentradas, mas ainda continua sendo utilizada como processo de separação de misturas diluídas. Novas tecnologias de fabricantes de peneira moleculares mostram esta nova capacidade de adsorção. A permeação por membrana pode ser utilizada somente para misturas líquidas diluídas. Comercialmente, nenhum processo de separação de misturas concentradas usa membranas. A cristalização está limitada à separação de misturas concentradas; não é empregada para soluções diluídas devido à sua baixa confiabilidade e baixa recuperação. A extração líquido-líquido e a dessorção podem ser utilizados, principalmente, para misturas diluídas; a dificuldade se encontra na escolha do solvente

apropriado, e também nos processos posteriores, onde serão recuperados os solvente e o componente de interesse.

3.7.2. Pureza

Tanto a cristalização como a destilação podem atingir elevadas purezas (> 99%). Já os processos com adição de solventes físicos só obterão altas purezas com a escolha apropriada do solvente. Na adsorção, se um adsorvente seletivo é encontrado, altas purezas podem ser obtidas.

Já a separação por membranas fornece apenas um incremento de pureza a cada passagem pela membrana. Altas purezas poderiam ser obtidas em processos multiestágios. Dependendo da seletividade, são necessários 4 estágios para obter purezas maiores que 90%, com uma baixa taxa de recuperação. Se alta pureza é desejada, pode-se esquecer a separação por membranas.

3.7.3. Recuperação

Definida como o grau de separação entre as correntes de produto. Uma separação com alta recuperação não resulta necessariamente em 2 produtos altamente puros. Se a mistura for multicomponente pode-se recuperar apenas um dos componentes. A destilação e os processos com PSE (com um solvente seletivo) podem atingir separações com alta recuperação. A recuperação no processo de adsorção pode ser alta tanto para misturas diluídas como concentradas, dependendo do adsorvente. Fabricantes reportam recuperações de 95-98% para adsorção de misturas.

Para a cristalização, a recuperação é limitada pela presença de pontos eutéticos. Na cristalização, somente um cristal deve ser obtido durante certo tempo. Se o sistema forma eutéticos, um segundo componente cristalizará simultaneamente numa composição intermediária. Mesmo que se possa separar cristais por diferença de densidade, isto não é uma opção industrial. Um ponto eutético representa o limite prático de recuperação (R) na cristalização:

$$R = \frac{X_{fc} - X_{ec}}{X_{fc}(1 - X_{ec})} \quad (3.2)$$

onde:

X_{fc} = fração molar na alimentação do componente cristalizando

X_{ec} = fração molar eutética do componente cristalizando

O ponto eutético define qual componente pode ser obtido com o cristal puro para uma dada alimentação. O primeiro a cristalizar é quando $X_{fc} > X_{ec}$.

A permeação por membranas é um processo de enriquecimento. Nem o permeado nem o líquido residual são altamente puros. Então, se altas recuperações são desejadas, a permeação por membranas e a cristalização (dependendo do ponto eutético) podem ser destacadas como métodos favoráveis.

3.8. SEPARAÇÃO DE MISTURAS ZEOTRÓPICAS E AZEOTRÓPICAS

Diferentemente do que ocorre para soluções diluídas, a destilação quase sempre pode ser utilizada para a separação de soluções concentradas. Considerem-se duas diferentes situações: na primeira, alguns componentes da mistura a ser separada podem ser sensíveis à temperatura; na segunda, os componentes não são termossensíveis. Na Figura 3.6 é mostrada a estrutura de avaliação para a separação da mistura com componentes sensíveis à temperatura. Observa-se que os processos de destilação foram deixados de lado, estes só seriam aplicados utilizando vácuo, de forma a reduzir as temperaturas na coluna.

Na Figura 3.7, a estrutura para a separação de misturas não azeotrópicas e concentradas é mostrada. Nota-se que, nesta situação, o primeiro processo avaliado é a destilação convencional, depois ocorre a análise dos outros processos de separação.

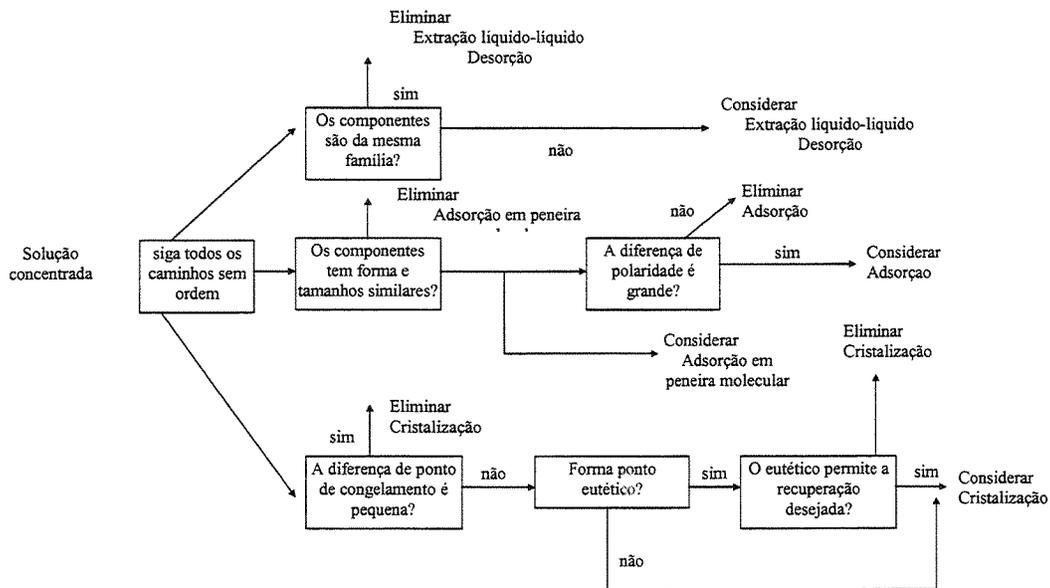


Figura 3.6. Separação de misturas líquidas sensíveis à temperatura. (Barnicki e Fair, 1990)

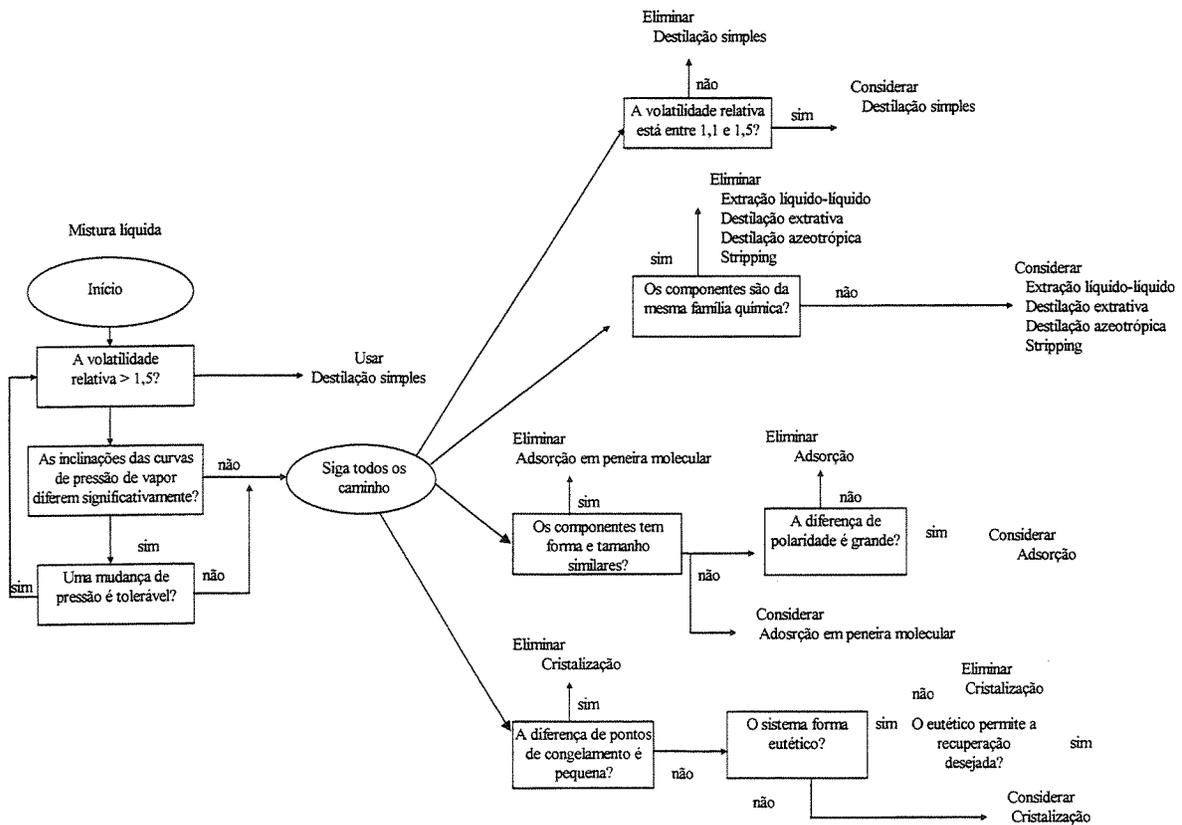


Figura 3.7. Separação de misturas líquidas Zeotrópicas. (Barnicki e Fair, 1990)

Se o sistema em estudo contém azeótropos, ele não pode ser separado por destilação simples, a menos que a composição do azeótropo varie com a pressão. Se não for sensível à pressão, então, a destilação simples pode ser descartada. As separações de misturas azeotrópicas são normalmente difíceis de executar. Devem ser feitas, se possível, sem a presença dos outros componentes. Na Figura 3.8, a estrutura para a separação de misturas azeotrópicas é mostrada.

A identificação de azeótropos não é difícil, quando se dispõe de dados e/ou de um software. Cinco questões podem colaborar para identificação da probabilidade de existência de azeótropos. A resposta afirmativa para as questões indica a menor probabilidade, porém um sim para 1^a questão é uma indicação mais forte da não existência do que um sim para a 5^a questão.

As questões para identificação de azeótropos são:

1. São os componentes homólogos ou isômeros da mesma função química?
2. A diferença entre os pontos de ebulição normais é maior que 15°C?
3. São os componentes membros de famílias químicas onde a formação de azeótropos é improvável?
4. O número de carbonos dos componentes é maior que seis?
5. A relação entre as pressões de vapor é menor que o coeficiente de atividade à diluição infinita?

A seguir, apresenta-se uma lista de regras heurísticas adaptadas de Nadgir e Liu (1983) levando em conta a presença de azeótropos:

1. Remova primeiro materiais corrosivos e perigosos.
2. Remova componentes reativos primeiro.
3. Execute por último as separações azeotrópicas.
4. Execute por último as separações zeotrópicas (não-azeotrópicas) difíceis, mas antes das separações azeotrópicas. Modificação da regra de Rudd *et al.* (1973) e King (1980) dizendo que as separações com α (volatilidade relativa) baixa devem ser feitas sem outros componentes.

5. Remova os componentes em ordem decrescente de porcentagem de alimentação. Se a volatilidade relativa é razoável, um componente em grande fração de alimentação deve ser removido primeiro de forma a diminuir o tamanho do equipamento da próxima separação.
6. Favoreça as divisões 50/50. Se as porcentagens de alimentação não variam muito, favoreça seqüências que produzem resíduos e produtos equimolares, desde que a volatilidade relativa seja razoável.
7. Se todas as condições são iguais, execute a separação com menor coeficiente de dificuldade de separação (CDS) primeiro (Nath e Motard, 1981).

$$CDS = \frac{\ln \left[\frac{X_{LK}}{1 - X_{LK}} \frac{X_{HK}}{1 - X_{HK}} \right]}{\ln \alpha_{LKHK}} \left(\frac{D}{D + B} \right) \left[1 + \left(\frac{D - B}{D + B} \right) \right] \quad (3.3)$$

Na equação 3.3, o primeiro termo é equivalente ao número mínimo de estágios; quanto maior este valor maior será o CDS. Em relação aos outros termos, eles contribuem para taxas de destilados maiores, isto é, quanto maior o D (destilado) em relação ao B (produto de fundo), maior será o valor de CDS e mais difícil a separação. Este comentário também é válido para as distribuições desiguais dos produtos.

Na equação 3.3, os sub-índices LK e HK, significam componente chave leve e componente chave pesado. Os componentes chaves são aqueles que não se distribuem totalmente em uma coluna de destilação, isto é, o chave leve não sairá totalmente no topo e nem o chave pesado sairá totalmente no fundo.

Jaksland *et al.* (1995) propuseram uma estrutura baseada somente em propriedades físicas e químicas para seleção do melhor método de separação e para o sequenciamento dos métodos. A análise utilizou dois níveis. No primeiro ocorre a avaliação das propriedades dos componentes e as técnicas de separação e no segundo são tratadas as relações entre as propriedades de misturas e os sistemas de separação. A base de conhecimento consiste de informações sobre propriedades de componente puro, das técnicas de separação e métodos de predição de propriedades dos componentes (não cobertos pela base de conhecimento) e propriedades de misturas. A estrutura é montada baseada em uma matriz de razão entre propriedades de componentes puros e também usa a

representação trapezoidal. A grande contribuição do trabalho de Jaksland *et al.* (1995) é a possibilidade de seleção do solvente.

As informações utilizadas para esta seleção são:

- dados de solubilidade mista obtidos durante a análise da mistura os quais são utilizados para verificar se um solvente pré-selecionado já está presente na mistura.
- usar dados de solubilidade em água para verificar se ela é considerada um solvente
- buscar novos solventes, para tipos de separação especificados.

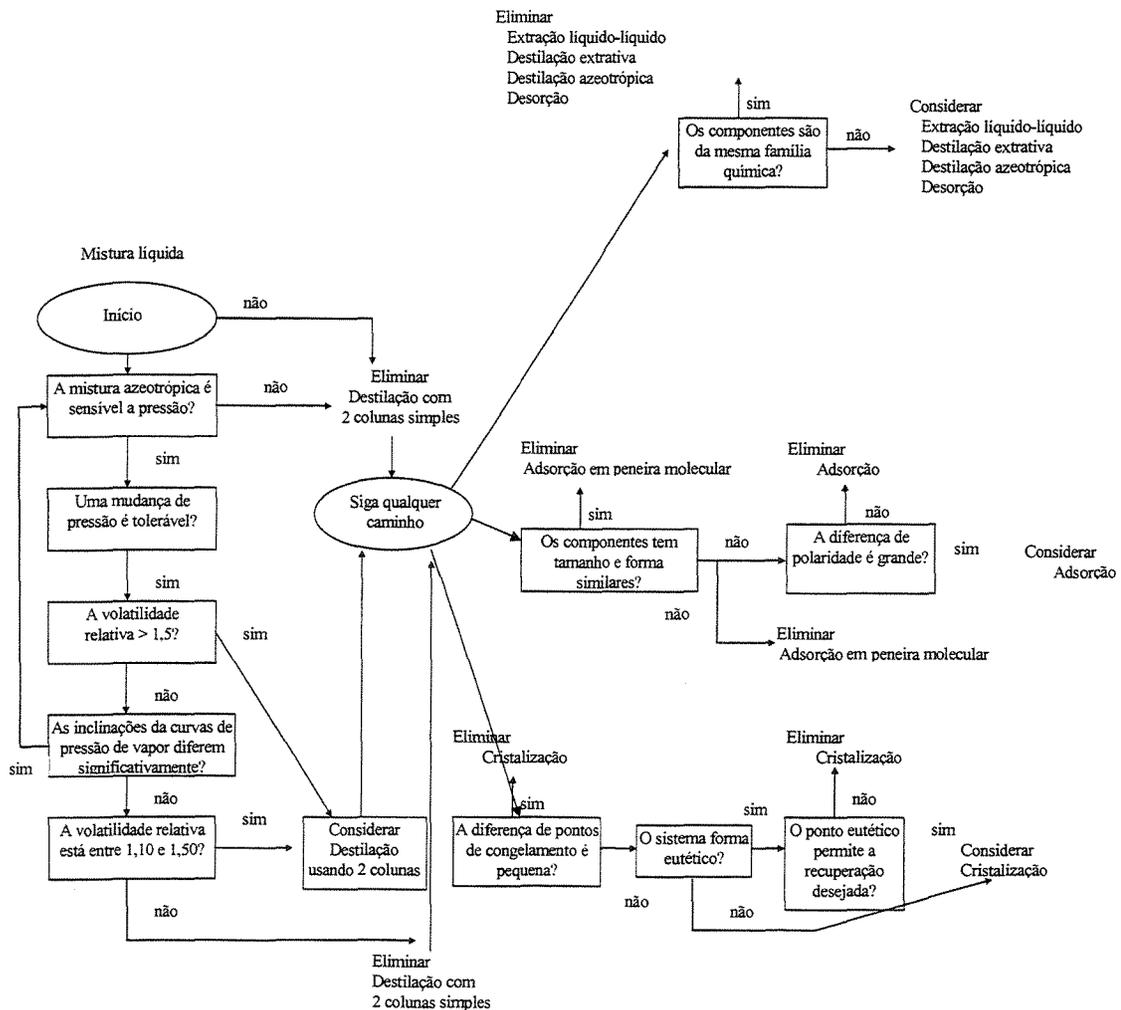


Figura 3.8. Separação de misturas azeotrópicas. (Barnicki e Fair, 1990)

Na tabela 3.4, apresentam-se algumas considerações importantes relativas às separações de misturas líquidas.

Tabela 3.4. Condições especiais para as técnicas de separação de misturas líquidas

Método Favorecido	Características dos sistemas
Extração líquido-líquido	solução diluída (entre 1 e 5%) do componente polar e de maior ponto de ebulição; destilação requereria a vaporização de grandes quantidades da alimentação
Dessorção (<i>Stripping</i>)	solução diluída (< 5%) do componente de menor ponto de ebulição, se um solvente altamente seletivo está disponível <i>stripping</i> competirá com a destilação
Destilação azeotrópica	baixa concentração (< 10-15%) do componente que forma um azeótropo de ponto de mínimo com o <i>entrainer</i> . Neste caso, o azeótropo vai para o topo, uma baixa concentração deste componente reduz a carga de vapor na coluna.
Destilação extrativa	mistura com componentes com ponto de ebulição próximos, onde o produto é o componente menos volátil, o solvente será introduzido no topo da coluna, e portanto alterará a volatilidade relativa através da coluna
Adsorção em peneira molecular	quando as diferenças de polaridade e tamanhos são grandes, a seletividade do adsorvente é aumentada pela presença de efeitos de peneiramento molecular e polaridade.

Nos últimos anos, novas técnicas de otimização estão sendo empregadas para a síntese de processos de separação. Normalmente os autores estão utilizando colunas de destilação integradas e então otimizando o processo. As técnicas de otimização são

promissoras, porém necessitam grande esforço computacional (Zdravko e Grossmann, 1997), algumas vezes se torna necessário fazer algumas modificações para que os modelos matemáticos possam ser mais facilmente tratados. Estas simplificações podem levar a erros práticos significativos. Recentemente (Wang et al., 1998) propuseram o uso de algoritmos genéticos para a síntese de colunas de destilação. A técnica é bastante interessante e se mostrou muito eficiente para os dois exemplos apresentados; novamente os cálculos foram feitos utilizando modelos aproximados. Apesar dos resultados usando otimização serem muito bons, quando se usa este tipo de técnica, o usuário não tem muita interferência durante o andamento da otimização para a obtenção da seqüência ótima, portanto algumas vezes se perde a experiência do usuário.

Fraga e Matias, (1996) também utilizaram algoritmos genéticos para otimizar a síntese de colunas de destilação. O esforço computacional exigido por técnicas de otimização é elevado mesmo usando modelos aproximados de cálculos de colunas. Fraga e Matias empregaram técnicas de computação paralela que diminuíram o tempo computacional em 5 vezes, mas mesmo assim estes ficaram na casa de 20 minutos para a otimização da separação de uma mistura de três componentes. Acredita-se que uma síntese híbrida utilizando modelagem matemática e regras heurísticas, além de diminuir o esforço computacional, torna a síntese mais transparente para o engenheiro de processo.

Rong et al. (2000) apresentaram a síntese de um processo usando colunas de destilação integradas para a separação de uma mistura com 5 componentes, devido a uma lacuna de trabalhos com este número de componentes. Os autores procuraram realmente abranger um grande número de casos (diferentes misturas e diferentes composições da mistura a separar), mas ainda utilizam um modelo aproximado para o cálculo da coluna, porém são rigorosos quando ao modelos termodinâmicos utilizados para o equilíbrio de fases líquido-vapor. Em Rong *et al.* (2000), também, são propostas regras heurísticas que recomendam quando se deve utilizar colunas complexas (integradas) ao invés de colunas simples, a saber:

- quando a composição dos componentes intermediários é maior que 60%, não se recomenda o uso de colunas complexas (integradas)

- o uso de colunas complexas é vantajoso quando se tem quantidades maiores e similares dos componentes mais leve e mais pesado (50% do total para os dois).

Rong *et al.* (2001) apresentaram mais dois exemplos de separação de misturas com 5 componentes usando colunas integradas, porém continuam a empregar modelos aproximados para o cálculo da colunas. Eles não apresentaram nenhuma comparação de resultados com modelos rigorosos.

Uma tentativa de minimizar o esforço computacional foi proposta por Bek-Pedersen *et al.*, (2000). Eles propuseram uma expressão para representar a força motriz que comandaria um processo de separação, baseando-se para isto em um fator de separabilidade relativa. Para o cálculo deste fator utilizaram a propriedade físico-química relacionada ao processo de separação. O trabalho é bastante interessante e os autores mostraram a aplicabilidade do fator, inclusive para diferentes processos de separação. Este é um fator que deve ser mais bem explorado e pode ser utilizado como mais uma informação do sistema especialista.

Hostrup *et al.* (1999) também trabalharam com uma metodologia híbrida para a síntese de processos de separação. O trabalho apresentado pelos autores é bem consistente e utilizam as regras heurísticas e propriedades termodinâmicas para diminuir o tamanho do problema de otimização e eliminar alternativas redundantes ou inviáveis. Uma inovação pretendida pelos autores é a introdução de restrições ambientais. Nos exemplos mostrados inicialmente eles avaliam a troca de solventes inadequados ambientalmente, por outros que apresentam menores restrições ambientais.

3.9. PROCESSOS PROGRAMADOS PARA INICIALMENTE PERTENCEREM AO SISTEMA ESPECIALISTA

Vários processos de separação podem ser considerados no desenvolvimento do sistema especialista. Neste projeto de tese não é intenção que todos os processos de separação estejam embutidos ainda, pois o objetivo é a elaboração do sistema especialista e os desenvolvimentos intrínsecos, que serão ferramentas de decisão e cujos resultados alimentarão a base de conhecimentos. Os processos de separação serão divididos em duas

classes: convencionais e não convencionais. Os processos são: destilação (nas suas mais diferentes formas), absorção, extração líquido-líquido, e os não-convencionais: os processos de adsorção em geral, separação por membranas, extração supercrítica, os processos de recuperação e purificação de biomoléculas como cromatografia, extração em duas fases aquosas, troca-iônica e ultrafiltração e todos os demais que constituem a Engenharia das Separações.

3.10. CONCLUSÕES

Como se pode observar, existem na literatura algumas estratégias de se promover a seleção e o sequenciamento de processos de separação para misturas líquidas.

Muitos avaliam os processos de separação como sendo determinados somente por diferenças de propriedades físico-químicas, mas isto não pode ser considerado definitivo, visto que o tipo de alimentação, o grau de pureza desejado, a recuperação necessária dos componentes, todas essas informações além das propriedades físico-químicas também devem ser analisadas e estar presentes no critério de decisão.

Mostrou-se que existem muitos trabalhos na área, porém falta especial atenção aos processos com agentes de separação mássicos, isto é, processos com introdução de solventes.

Acredita-se que com esta revisão do estudo da arte, pode-se avaliar a importância deste tipo de estudo, bem como limitações e contribuições existentes na literatura. Assim, pretende-se, neste trabalho de tese, criar uma ferramenta capaz de auxiliar os engenheiros de processos na síntese de processos de separação de misturas líquidas.

Além disso, os problemas econômicos e ambientais hoje fazem com que ocorra uma revisão, uma adequação e novos desenvolvimentos dos processos de separação convencionais, além dos não convencionais.

Problemas de síntese aliados à escolha de solventes, à composição de alimentação, às especificações, à alta pureza e à preocupações com todas as correntes de processo, tornando complicados os problemas de reciclo e convergência, não se encontram na literatura. Estes aspectos serão fortemente explorados neste trabalho.

CAPÍTULO 4.

DESENVOLVIMENTO DA INTERFACE INTERATIVA **E DO SISTEMA ESPECIALISTA**

4.1. INTRODUÇÃO

Nos últimos anos observou-se, na literatura, um crescente número de trabalhos na área de síntese de processos de separação. Nos trabalhos em que regras heurísticas são utilizadas, os tempos gastos na simulação das operações e das seqüências obtidas são minimizados (Quantrile e Liu, 1991). Devido a esta preocupação, é comum o uso de modelos aproximados ou reduzidos para representar os processos de separação.

Neste trabalho, tentou-se reduzir os tempos gastos nas simulações dos processos de separação, mas sempre garantindo o uso de modelos rigorosos para representar estes processos. Um software *user-friendly* foi desenvolvido, o qual ajudará engenheiros de processos na escolha da melhor seqüência de separação para um mistura líquida. O software, no entanto, estará apto a acomodar qualquer tipo de mistura e qualquer tipo de processo de separação (difusional).

A metodologia usada no desenvolvimento do software inclui o uso de regras heurísticas, rotinas desenvolvidas em FORTRAN 90 e o uso do simulador comercial Aspen Plus™ (banco de dados de componentes puros, estimativa de propriedades, simulações e estimativas de custos dos processos de separação).

As interações entre as rotinas desenvolvidas e o simulador são transparentes para o usuário. Toda a seleção dos processos de separação é baseada em conceitos termodinâmicos, em propriedades físico-químicas, na modelagem matemática, em simulações e na estimativa de custos do processo.

4.2. METODOLOGIA UTILIZADA

Antes de descrever as etapas da síntese de processo, mostra-se como será a estrutura global da interface interativa e do sistema especialista a serem desenvolvidos. A

Figura 4.1 ilustra um esquema mostrando as diferentes partes do projeto e as interações entre elas. Nota-se que, além do uso do simulador comercial, outras rotinas desenvolvidas são utilizadas na síntese do esquema de separação.

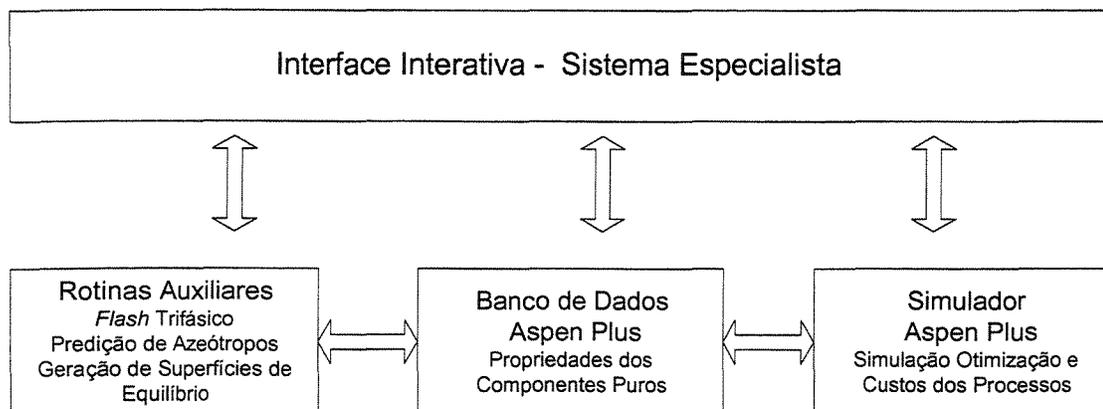


Figura 4.1. Estrutura de relações do projeto proposto

A Figura 4.2 ilustra como serão organizadas as etapas gerenciadas pelo sistema especialista para a síntese das tarefas de separação. Cada uma dessas etapas da superestrutura do sistema especialista será discutida a seguir.

4.2.1. Caracterização da Mistura

Nesta etapa, as informações sobre as condições de entrada da mistura a ser separada são fornecidas ao programa usando “janelas” amigáveis. Inicialmente, todas as “janelas” foram desenvolvidas em inglês, tendo como objetivo facilitar o intercâmbio de informações e futuras publicações. Estas informações são:

- Componentes
- Vazão molar da alimentação
- Composição
- Características ambientais
- Características químicas (corrosivo ou não)
- Temperatura e pressão da alimentação

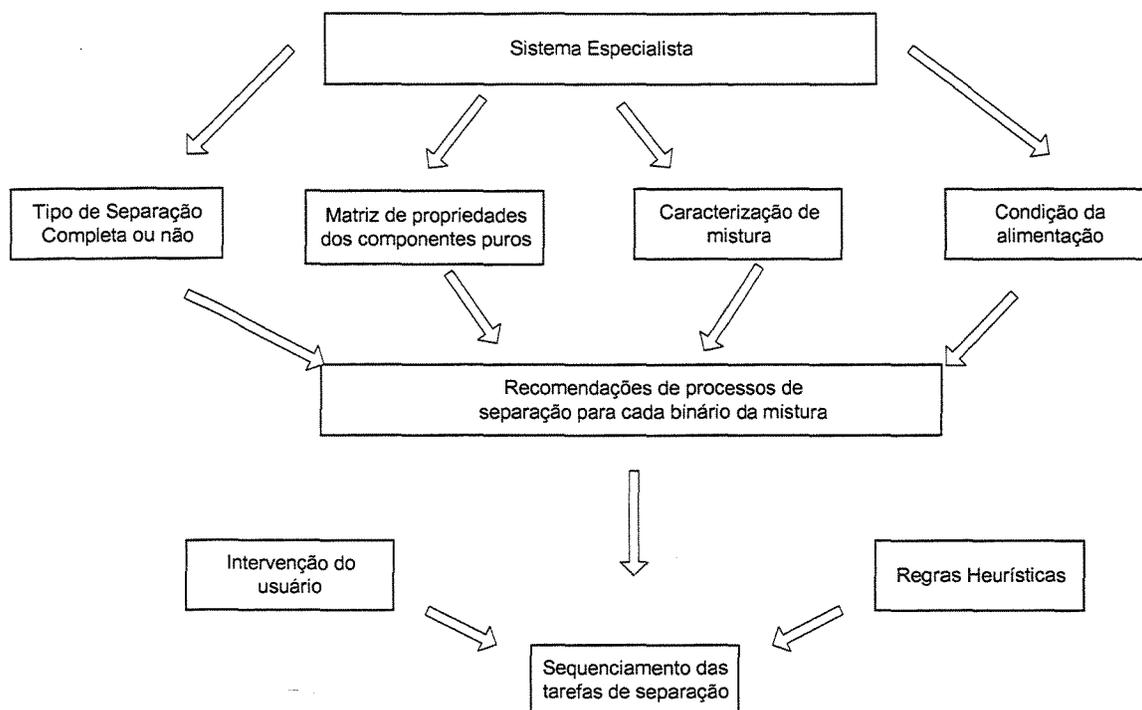


Figura 4.2 Estrutura geral do sistema especialista para a síntese do processo de separação

Nesta etapa, o usuário dispõe de pelo menos três formas para caracterizar a mistura, a saber, “*flasheamento*” da mistura inicial, predição da existência de azeótropos e a geração e utilização de superfícies de equilíbrio. As rotinas para executar estas tarefas serão discutidas no Capítulo 5. Neste trabalho sempre que utiliza-se as palavras *FLASH* ou *FLASHEAMENTO* se está referindo à operação vaporização parcial.

O usuário também precisa selecionar o modelo de coeficiente de atividade para cálculo ou predição do equilíbrio de fases (UNIQUAC, NRTL, UNIFAC e Ideal). Com estas informações em mãos, o *software* busca no banco de dados do simulador comercial ASPEN PLUS™ os pontos de ebulição dos componentes puros e organiza os componentes em ordem crescente de pontos de ebulição. O software também busca no banco de dados do ASPEN PLUS™ os parâmetros do modelo do coeficiente de atividade selecionado. Se alguns destes parâmetros não estão disponíveis (esta informação é mostrada pelo software), o usuário, então, seleciona para quais binários deseja que o simulador estime os parâmetros de interação. A predição dos parâmetros não disponíveis no banco de dados do ASPEN PLUS™ é realizada sem a interferência do usuário. Todas as informações de entrada sobre

a mistura e dos parâmetros de atividade são gravadas em dois arquivos, um para futuros usos da mistura e o outro escrito em HTML para utilização e visualização das informações, usando um *Browser* (Netscape™ Communicator ou Microsoft™ Internet Explorer). Estes arquivos e todos os demais gerados pelo software, serão escritos em inglês e em linguagem HTML, conforme justificativa já comentada.

Se um dos componentes da mistura tiver o ponto de ebulição menor que 20°C, o software sugere o uso da operação *flash* isotérmico (bifásico ou trifásico) da mistura inicial, porém o *flash* da mistura inicial pode ser executado a qualquer momento pelo usuário. O usuário pode executar quantas simulações quiser; as especificações necessárias são as condições do tambor de *flash*: pressão e temperatura ou fração vaporizada.

Todos os resultados são escritos em um arquivo HTML para posterior visualização e ou impressão usando um Internet *browser*. Nas Figuras 4.3 e 4.4, os resultados do *flasheamento* de duas misturas são mostrados e pode-se observar que, dependendo das características de um dos componentes (metano ou etano), é possível separar este componente usando somente a simples operação *flash*. O exemplo considera um *flash* isotérmico bifásico (Figura 4.3) e trifásico (Figura 4.4). O *flasheamento* da mistura inicial também permite verificar se a mesma está na fase líquida e/ou na fase vapor. Para realização desta tarefa, basta especificar para as condições do tambor a mesma pressão e a mesma temperatura da alimentação; desta forma, as condições de alimentação da mistura são obtidas.

Porém, antes de realizar o *flasheamento* da mistura, é interessante avaliar a existência de azeótropos. Para esta avaliação, o programa usa a rotina desenvolvida e mostrada no próximo capítulo deste trabalho. O software sugere três pressões para a predição dos azeótropos binários e ternários homogêneos e heterogêneos, mas o usuário pode alterar estas pressões e executar quantos cálculos achar necessário. Desta forma, o usuário terá em mãos a verificação da presença de azeótropos em uma faixa larga de pressão. Após a execução da rotina, as informações são gravadas em um arquivo em linguagem HTML. As propriedades necessárias para a corrida são retiradas do banco de dados do Aspen Plus, isto é, o usuário não precisa fornecer nenhum outro dado além das pressões.

Flash results of the initial mixture

Feed Conditions:

Pressure (bar) = 10,0130
 Temperature (K) = 453,1500
 Flow-rate (kg-mol/h) = 100,0000

Flash Vessel Conditions:

Pressure(bar)= 1,0130
 Temperature(K)=293,1
 Vapour fraction = 0,25
 Phase=2

Component	Feed	Vapour	Liquid1	K ₁	Liquid2	K ₂
METHANE	0,25000	0,97820	0,00727	134,63334	0,00000	0,0000
N-HEPTAN	0,25000	0,01574	0,32809	0,04797	0,00000	0,0000
N-OCTANE	0,25000	0,00473	0,33176	0,01426	0,00000	0,0000
N-NONANE	0,25000	0,00133	0,33289	0,00399	0,00000	0,0000
Flow-rate(KMOL/HR)	100,00000	25,00000	75,00000	-	0,00000	-
Temperature(K)	453,15000	293,11035	293,11035	-	0,00000	-
Pressure(Bar)	10,01300	1,01300	1,01300	-	0,00000	-

Flash results of the initial mixture

Feed Coonditions:

Pressure (bar) = 10,0130
 Temperature (K) = 453,1500
 Flow-rate (kg-mol/h) = 100,0000

Flash Vessel Conditions:

Pressure (bar) = 0,5000
 Temperature (K) = 277,6177
 Vapour fraction = 0,2500
 Phase = 2

Component	Feed	Vapour	Liquid1	K ₁	Liquid2	K ₂
METHANE	0,25000	0,98175	0,00608	161,34968	0,0000	0,0000
N-HEPTAN	0,25000	0,01369	0,32877	0,04163	0,0000	0,0000
N-OCTANE	0,25000	0,00367	0,33211	0,01105	0,0000	0,0000
N-NONANE	0,25000	0,00090	0,33303	0,00270	0,0000	0,0000
Flow-rate(KMOL/HR)	100,00000	25,00000	75,00000	-	0,0000	-
Temperature(K)	453,15000	277,61769	277,61769	-	0,0000	-
Pressure(Bar)	10,01300	0,50000	0,50000	-	0,0000	-

Figura 4.3 - *Flasheamento da mistura metano, n-heptano, n-octano e n-nonano.*

Flash results of the initial mixture

Feed Coonditions:

Pressure (bar) = 10,0130
 Temperature (K) = 323,1500
 Flow-rate (kg-mol/h) = 100,0000

Flash Vessel Conditions:

Pressure (bar) = 1,0130
 Temperature (K) = 273,9176
 Vapour fraction = 0,2500
 Phase = 3

Component	Feed	Vapour	Liquid1	K ₁	Liquid2	K ₂
ETHANE	0,25000	0,95321	0,00937	101,72852	0,02860	33,33130
ETHANOL	0,25000	0,00869	0,45373	0,01914	0,07248	0,11982
BENZENE	0,25000	0,03322	0,04796	0,69289	0,89622	0,03707
WATER	0,25000	0,00488	0,48895	0,00999	0,00270	1,80656
Flow-rate(KMOL/HR)	100,00000	25,00000	50,74710	-	24,25290	-
Temperature(K)	323,15000	273,91758	273,91758	-	273,91758	-
Pressure(Bar)	10,01300	1,01300	1,01300	-	1,01300	-

Figura 4.4 - *Flasheamento* da mistura etano, etanol, benzeno e água

A mistura também pode ser caracterizada usando o conceito de Superfícies de Equilíbrio proposto por Maciel (1989). A visualização das superfícies de equilíbrio contribui para o conhecimento do grau de idealidade ou de não-idealidade do sistema na faixa completa de composição (0,0 a 1,0) e também para a seleção de um solvente quando um agente de separação mássico é requerido. Usando a rotina desenvolvida e discutida no próximo capítulo, o *software* desenvolvido gera as superfícies de equilíbrio automaticamente, retirando todas as propriedades físico-químicas necessárias do banco de dados do ASPEN™. Estas superfícies podem ser impressas ou modificadas, se necessário. O usuário escolhe os três componentes que quer avaliar e especifica a pressão. Deve-se lembrar que os componentes devem ser escolhidos em ordem de volatilidade (temperatura de ebulição). Sugere-se que, antes de iniciar a escolha do solvente no banco de dados do Aspen, se verifique se um dos componentes da mistura não pode ser utilizado como solvente. Com as Superfícies de Equilíbrio também é possível avaliar as presenças de azeótropos e de duas fases líquidas no sistema.

4.2.2. Tipo de operação e Condição de alimentação

Após a definição dos componentes da mistura, o usuário deve especificar os produtos desejados. Se somente uma caracterização da mistura é desejada, esta etapa pode ser executada posteriormente. Na especificação do produto, o usuário pode usar as vazões molares dos componentes ou as recuperações dos componentes ou, ainda, as composições em fração molar e as vazões de produto. O usuário pode criar pseudo-produtos de forma a tornar uma separação mais fácil.

Com base nestas informações e em outras obtidas na fase de caracterização da mistura, o sistema especialista toma decisões relacionadas ao tipo de operação e à condição da alimentação. O sistema especialista analisa se a operação será de recuperação ou de separação propriamente dito, ou ainda, se produtos com alta pureza são desejados.

Quanto à condição de alimentação, o sistema especialista avalia se a solução a ser alimentada à próxima tarefa de separação é uma solução diluída ou concentrada. Esta análise deve ser feita antes de cada uma das tarefas de separação envolvidas no sequenciamento de processos de separação.

4.2.3. Propriedades de Componentes Puros e Recomendação das Operações de Separação

Após caracterização da mistura inicial, a próxima etapa induzida pelo software é a montagem da matriz com as propriedades físico-químicas dos componentes puros. O intuito da montagem desta matriz é obter as relações entre as propriedades de componentes puros para os diferentes binários (componentes) da mistura inicial.

Como se descreveu no item estado da arte, cada operação de separação está relacionada a uma ou mais propriedades físico-químicas. Quanto maior for a relação (a diferença) entre as propriedades de um binário de componentes, mais recomendado será o uso de determinada operação de separação relacionada àquela propriedade.

No *software* elaborado, o usuário, inicialmente, escolhe as operações unitárias de separação que este deseja que sejam consideradas na montagem da matriz de relações de propriedades. Automaticamente, com a escolha do processo, as propriedades relacionadas

ao processo escolhido são selecionadas. O usuário pode escolher outras propriedades disponíveis no banco de dados do simulador para serem colocadas na matriz de propriedades de componentes puros. Além das propriedades de componentes puros, o programa calcula as volatilidades relativas entre os componentes da mistura, para que esta informação também esteja presente na matriz de propriedades.

As volatilidades relativas não são calculadas pontualmente, isto é, somente nas condições de pressão, temperatura e composições da alimentação. A metodologia utilizada para cálculo da volatilidade relativa para os diferentes binários da mistura inicial foi a seguinte:

- Fixa-se a pressão do sistema igual à da mistura inicial
- Variam-se os valores de fração vaporizada de 0,02 a 0,98 (3 pontos intermediários)
- Variam-se os valores de composição de um dos componentes de 0 a 1 (8 pontos intermediários)
- Considera-se a presença de 3 fases (líquido-líquido-vapor)

O objetivo é ter um valor de volatilidade relativa que abranja todas as faixas de composição do binário. O valor final é obtido pela média geométrica dos valores obtidos para cada fração vaporizada.

As informações de propriedades físico-químicas dos componentes puros e das volatilidades relativas são gravadas em um arquivo de fácil visualização. Baseado nestas informações, o software emite um relatório com as operações de separação recomendadas para cada binário da mistura inicial. Na Figura 4.5, apresentam-se dois exemplos das informações obtidas a partir da matriz de propriedades. Após a matriz, também são gravados os valores máximos, mínimos e médios das volatilidades relativas calculadas pela metodologia citada. Com esta tabela, pode-se avaliar se a curva de equilíbrio corta a diagonal, mostrando, assim, a existência de azeótropo binário.

4.3. SÍNTESE DOS PROCESSOS DE SEPARAÇÃO

Após a caracterização da mistura e da utilização da matriz de propriedades, pode-se iniciar o procedimento de síntese do processo de separação. Até o momento, somente se

considera a destilação convencional como processo de separação. Outros processos difusionais serão implementados durante o aprimoramento do software. Cada tarefa fornece dois produtos, isto é, tem-se uma alimentação e dois produtos. As separações consideradas poderão ser completas, com obtenção de componentes puros, ou parciais, onde se obtém produtos dentro de especificação.

Binary : ETHANOL – BENZENE	Binary: BENZENE – TOLUENE
Azeotropic Distillation - Extractive Distillation	<i>Flash</i> Operation-Liquid Membranes-Distillation
Liquid Membranes	Binary: BENZENE - M-XYLENE
Distillation	Liquid Membranes- <i>Flash</i> Operation-Distillation
Binary: ETHANOL – WATER	Binary: BENZENE - P-XYLENE
Azeotropic Distillation - Extractive Distillation	Liquid Membranes- <i>Flash</i> Operation-Distillation
Liquid Membranes - Distillation	Binary: TOLUENE - M-XYLENE
Binary: BENZENE - WATER	Liquid Membranes - Distillation
Azeotropic Distillation - Extractive Distillation	Binary: TOLUENE - P-XYLENE
Liquid Membranes - Distillation	Liquid Membranes – Distillation
	Binary: M-XYLENE - P-XYLENE
	Distillation - Distillation - Liquid Membranes

Figura 4.5. Recomendações para a separação de duas misturas. Mistura A: etanol - benzeno - água; Mistura B: benzeno, tolueno, m-xileno e p-xileno. As operações estão ranqueadas em ordem de preferência.

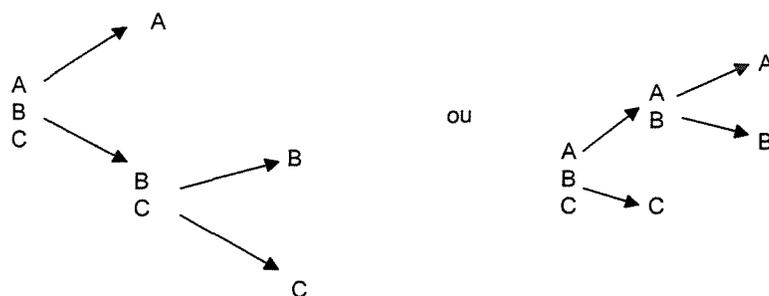
4.3.1. Etapas Envolvidas na Síntese da Seqüência de Separação

Como já foi dito, até o momento, somente o processo de destilação está sendo considerado durante a síntese da seqüência de separação, porém outros métodos de separação difusionais serão implementados em trabalhos futuros.

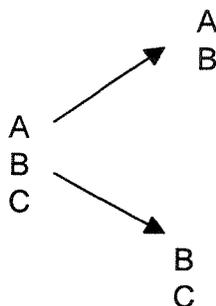
Tipo de separação

Antes da escolha dos componentes chaves propriamente ditos, o sistema especialista, baseado nas condições especificadas para os produtos, define se uma separação será completa ou não. A seguir, ilustra-se como seriam essas separações.

Uma separação completa é exemplificada a seguir considerando-se três componentes em ordem decrescente de volatilidade: A, B, e C. Tem-se, neste caso, duas seqüências possíveis:



Nem sempre produtos com alta pureza são desejados. Pode-se ter, industrialmente, nos produtos mais de um componente. Para o mesmo exemplo anterior tem-se:



Esta separação passará a chamar-se de separação não completa. Nota-se que o número de separações necessárias é bem menor para as separações não-completas.

Como discutido no Capítulo 3, um dos problemas envolvidos no sequenciamento de processos de separação é o número de seqüências teoricamente possíveis para separar uma mistura multicomponente em produtos compostos por componentes puros.

Relembrando, Henley e Seader (1981) mostram que o número de seqüências teoricamente possíveis, S_n , para separar uma mistura de n-componentes em n produtos de componentes puros por um único método de separação é:

$$S_n = \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!} \quad (4.1)$$

O número de seqüências possíveis, S, para separar uma mistura de n-componentes em n produtos (componentes puros) por T métodos de separação é:

$$S = T^{n-1} \cdot S_n = T^{n-1} \frac{[2(n-1)]!}{n!(n-1)!} \quad (4.2)$$

Na Tabela 4.1, observa-se os valores do número de seqüências para até 10 componentes e 2 métodos de separação.

Tabela 4.1. Número de seqüências teoricamente possíveis

Números de Componentes, n	T = 1	T = 2
3	2	8
5	14	224
7	132	33792
10	4862	9957376

Se existe a possibilidade de se obter os produtos diretamente, esta possibilidade deve ser investigada. O software permite que o usuário considere as duas opções, separações completas ou não.

Análise da Tarefa de Separação - Escolha dos componentes chaves

Antes de realizar os cálculos para cada coluna de destilação, uma análise da possibilidade da realização de uma separação tem que ser realizada. Esta análise é feita para as separações não completas (*Sloppy Separation*), pois é necessário saber como todos os componentes vão se distribuir durante a separação. Primeiramente, o software pede a entrada das especificações dos produtos desejados. Podem ser utilizadas as vazões molares dos componentes, a recuperação dos componentes ou, ainda, a composição (fração molar)

dos componentes no produto. Pode-se acrescentar ou diminuir o número de produtos conforme as necessidades.

Esta análise é feita através:

- das especificações das recuperações dos componentes nos produtos de topo e fundo
- da escolha dos componentes chave-leve e chave-pesado
- da distribuição dos componentes não chaves nos produtos de topo e fundo

As especificações das recuperações dos componentes são entradas do programa. A escolha dos componentes chaves é feita utilizando todas as combinações entre os componentes presentes na mistura para as separações não completas e utilizando componentes adjacentes para as separações completas. Para avaliar a escolha dos componentes chaves e a distribuição dos componentes não chaves, utilizou-se a análise aproximada proposta por Cheng e Liu (1988). Esta análise é dividida em dois testes:

- teste das especificações das recuperações dos componentes
- teste de distribuição dos componentes não chaves

Para isto, utilizou-se a equação de Fenske que calcula o número mínimo de estágios de equilíbrio.

$$N_{\min} = \frac{\log \left[\left(\frac{d}{b} \right)_{LK} \left(\frac{b}{d} \right)_{HK} \right]}{\log(\alpha_{LK, HK})} \quad (4.3)$$

onde

N_{\min} = número mínimo de estágios de equilíbrio

$\alpha_{LK, HK}$ = volatilidade relativa entre o chave leve e o chave pesado

d, b = frações recuperadas no destilado e no fundo

No teste de especificação de recuperação, as seguintes relações devem ser satisfeitas:

$$d_{LLK3} \geq d_{LLK2} \geq d_{LLK1} \geq d_{LK} \geq d_{HK} \geq d_{HHK1} \geq d_{HHK2} \geq d_{HHK3} \dots \quad (4.4)$$

$$b_{LLK3} \geq b_{LLK2} \geq b_{LLK1} \geq b_{LK} \geq b_{HK} \geq b_{HHK1} \geq b_{HHK2} \geq b_{HHK3} \dots \quad (4.5)$$

No teste de distribuição de componentes não chaves, calcula-se o número mínimo de estágios de equilíbrio para todas as combinações de LK e HK para determinada separação. Se um dos componentes, devido às especificações dos produtos, não se distribui, isto é, sai todo no destilado ou no fundo, considera-se a seguinte distribuição 0,99/0,01 e 0,01/0,99. Isto é feito para evitar a divisão por zero na equação de Fenske.

A distribuição dos componentes não chaves também é calculada pela equação de Fenske. Para os componentes mais leves que o chave leve, tem-se:

$$N_{\min} = \frac{\log \left[\left(\frac{d}{b} \right)_{LLK} \left(\frac{b}{d} \right)_{HK} \right]}{\log(\alpha_{LLK, HK})} \quad (4.6)$$

e que,

$$d_i + b_i = 1 \text{ para o componente } i \quad (4.7)$$

O N_{\min} é calculado para os componentes chaves. LLK são os componentes mais leves que o chave leve. Com as duas equações, pode-se calcular $(d/b)_{LLK}$. Analogamente, para os componentes mais pesados (HHK) que o chave-pesado, tem-se:

$$N_{\min} = \frac{\log \left[\left(\frac{d}{b} \right)_{LK} \left(\frac{b}{d} \right)_{HHK} \right]}{\log(\alpha_{LK, HHK})} \quad (4.8)$$

Usando as equações (4.7) e (4.8), pode-se calcular $(b/d)_{HHK}$. Foram consideradas as separações não completas possíveis, quando (d/b) calculado está na faixa $\pm 20\%$ de (d/b) especificado. Fora desta faixa, as separações se tornariam muito caras, pois precisariam de colunas com maiores números de pratos e maiores razões de refluxo.

Definindo-se as separações possíveis, calculam-se os valores do coeficiente de facilidade da separação (CES), proposto por Cheng e Liu (1988):

$$CES = f \cdot \Delta \frac{1}{\log \left[\left(\frac{d}{b} \right)_{HK} \left(\frac{b}{d} \right)_{HK} \right]} \quad (4.9)$$

onde:

$f = \min(D/B, B/D)$, razão entre a vazão molar dos produtos de topo e de fundo

$\Delta = \Delta T$, diferença dos pontos de ebulição entre os componentes chaves ou, $\Delta = 100(\alpha_{LK,HK} - 1)$.

Quando maior for o valor de **CES**, mais fácil é a separação.

Também se calcula o valor de CDS, proposto por Nath e Motard (1981):

$$CDS = \frac{\log \left[\frac{sp_{LK}}{1 - sp_{LK}} \cdot \frac{sp_{LK}}{1 - sp_{HK}} \right]}{\log \alpha_{LK,HK}} \cdot \frac{D}{D + B} \cdot \left\{ 1 + \left| \frac{D - B}{D + B} \right| \right\} \quad (4.10)$$

onde:

sp_{LK} e sp_{HK} = frações de divisão dos componentes chave-leve e chave-pesado nos produtos de topo e fundo

D e B = vazões molares dos produtos de topo e fundo

$\alpha_{LK,HK}$ = volatilidade relativa entre os componentes chaves

Quanto menor o CDS, mais fácil é a separação, conforme discutido no Capítulo 3.

Regras Heurísticas

O software, até o momento, usa o método de regras heurísticas (classificadas, escalonadas) proposto por Nadgir e Liu (1983), incluindo as extensões desenvolvidas por Cheng e Liu (1988), bem como as propostas de Liu *et al.* (1990). Outras regras heurísticas serão incorporadas, principalmente, relacionadas aos aspectos ambientais. Uma modificação também foi proposta para o Coeficiente de Facilidade de Separação (**CES**). Neste método, as regras heurísticas são classificadas em quatro categorias:

1. Regras Heurísticas Método - chamadas de heurísticas M. Estas favorecem os métodos de separação baseados nas especificações de problema.
2. Regras heurísticas Projeto – chamadas de heurísticas P. Estas favorecem as seqüências de separação baseada em propriedades dos produtos.
3. Regras Heurísticas Especiais – chamadas de heurísticas E. São baseadas nas diferenças de propriedades entre as espécies a serem separadas.

4. Regras Heurísticas Composição – chamadas de heurísticas C. São relacionadas aos efeitos de alimentação e composição dos produtos no custo total das seqüências.

- M1 - favorecer a destilação convencional e remover os agentes de separação mássicos primeiramente.
- M2 - evite destilação a vácuo e a refrigeração
- P1 - favorecer o menor número de produtos
- E1 - remover primeiramente os componentes corrosivos e perigosos
- E2 - fazer por último as separações mais difíceis
- C1 - remover o produto em maior quantidade por primeiro
- C2 - favorecer separações 50/50

Uma descrição completa destas regras é feita a seguir .

HEURÍSTICO M1 - favorecer as destilações convencionais e remover os agentes de separação mássicos por primeiro.

(a) Se tudo for igual, favoreça métodos de separação como a destilação convencional que utiliza somente o agente de separação energia. Evite o uso de métodos de separação com agentes mássicos, como a destilação extrativa que requer componentes que, normalmente, não se encontram na alimentação (Rudd *et al.*, 1973). Entretanto, se o fator de separação e a volatilidade relativa dos componentes chaves $\alpha_{LK,HK}$ for menor que 1,05 (Van Winkle, 1967; Seader e Westberg, 1977) ou 1,10 (Nath e Motard, 1981), a destilação convencional não deve ser utilizada. Um agente de separação mássico pode ser usado para melhorar (aumentar) a volatilidade relativa entre os componentes chaves.

(b) Quando usar um agente de separação mássico, remova-o no separador imediatamente seguinte ao qual o agente foi utilizado, (Hendry e Hughes, 1972; Rudd *et al.*, 1973; Seader e Westberg, 1977).

HEURÍSTICO M2 - evite destilação a vácuo e a refrigeração.

Se tudo o mais for igual, evite extremos tanto em temperatura quanto em pressão, mas, se necessário, usar valores maiores de temperatura e/ou pressão (Rudd *et al.*, 1973), se ajustes forem necessários. Se destilação a vácuo for requerida, ao invés dela, se possível,

use a extração líquido-líquido com diferentes solventes. Se o processo requer refrigeração (separação de compostos com baixo ponto de ebulição e com altas volatilidades relativas), considere alternativas menos caras que a destilação, como, por exemplo, a adsorção (Souders, 1964; Seader e Westerberg, 1977; Nath e Motard, 1981).

HEURÍSTICO P1 - favorecer o menor número de produtos

Favorecer seqüências que rendam um número mínimo de produtos necessários. Evite seqüências que separem componentes que estão no mesmo produto final (Thompson e King, 1972, King, 1980). Para produtos multicomponentes, favoreça as seqüências que produzem estes produtos diretamente ou com o mínimo de mistura, a menos que as volatilidades relativas para esta seqüência sejam consideravelmente menores que as volatilidades da seqüência que necessite separadores adicionais ou mistura (Seader e Westerberg, 1977; Henley and Seader, 1981).

HEURÍSTICO E1 - remover primeiramente os componentes corrosivos e perigosos (Rudd *et al.*, 1973).

HEURÍSTICO E2 - fazer por último as separações mais difíceis.

Se tudo for igual, execute as separações difíceis por último (Rudd *et al.*, 1973). Em particular, execute as separações na ausência de componentes não-chaves quando a volatilidade relativa dos componentes-chaves for próxima de 1. Selecione seqüências que não permitem a presença de componentes não-chaves em separações onde os componentes-chaves são próximos em volatilidade ou em fatores de separação (King, 1980).

HEURÍSTICO C1 - remover por primeiro o produto em maior quantidade.

Um produto composto de uma grande fração da alimentação deve ser separado por primeiro, desde que o fator de separação ou a volatilidade relativa justifiquem a separação (Rudd *et al.*, 1973; King, 1980).

HEURÍSTICO C2 - favorecer separações 50/50.

Se as distribuições dos componentes não variam significativamente, favoreça as seqüências que dão uma divisão 50/50 (equivalente) da alimentação entre produtos destilados (D) e de fundo (B), quando se tem um fator de separação ou volatilidade relativa razoáveis (King, 1980).

Se existe dificuldade em julgar qual separação está próxima da divisão 50/50 e o fator de separação ou a volatilidade são razoáveis, então execute a separação com maior valor do coeficiente de facilidade da separação (Quantrille e Liu, 1991).

Modificação do coeficiente de facilidade da separação

Baseando-se nos resultados obtidos usando o valor de CES e tentando incluir no CES um fator que levasse em conta os custos dos equipamentos e do consumo de utilidades, uma modificação no coeficiente de facilidade da separação foi proposta. Esta modificação é mostrada na equação (4.11). Utiliza-se a relação entre cargas térmicas entre as diferentes possibilidades de separação usando colunas de destilação. Na modificação também se considera uma maior influência do fator f .

$$CES_{\text{modificado}} = f \cdot \Delta \cdot \frac{1}{\log \left[\left(\frac{d}{b} \right)_{LK} \left(\frac{b}{d} \right)_{HK} \right]} \cdot f \cdot \left\{ \frac{Q_{\max}}{Q} \right\}^a$$

Modificação proposta

(4.11)

onde

$f = \min(D/B, B/D)$, razão entre as vazões molares do produto de topo e de fundo, D/B ou B/D.

$\Delta = \Delta T$, diferença de ponto de ebulição entre os componentes chave, ou $\Delta = 100(\alpha - 1)$, onde alfa é a volatilidade relativa entre os componentes chaves.

$Q_{\max}/Q =$ relação entre o valor máximo do calor fornecido ao refeedor das separações possíveis e o calor fornecido da separação possível atual.

$a =$ parâmetro heurístico ajustável (pode variar de 0,5 a 2).

Este é o critério utilizado pelo software para definir qual é a melhor tarefa de separação entre as separações possíveis.

Intervenção do usuário

Algumas regras heurísticas não são aplicadas diretamente pelo programa. Isto tem por objetivo permitir uma melhor avaliação do usuário da separação definida pelo sistema especialista. O programa disponibiliza uma “janela” com as separações recomendadas, levando em conta as regras heurísticas aqui discutidas. Assim, o usuário pode intervir e modificar uma seqüência em desenvolvimento, baseando-se nas recomendações do programa e nas diversas informações disponíveis. Outra possibilidade que o software permite é o retorno ao ponto anterior da seqüência em estudo, isto é, se o resultado de uma escolha não for satisfatório, pode-se cancelar esta tarefa de separação e retornar à anterior.

Seqüenciamento das colunas de destilação

De posse de todas estas informações, o software vai selecionando, entre as separações possíveis, aquelas que apresentam o maior valor do **CES modificado**. O software mostra ao usuário quais seriam as recomendações de separação, conforme as diferentes regras heurísticas citadas anteriormente. Baseado em todas as informações fornecidas pelo programa, o usuário pode selecionar, manualmente, qual deve ser a tarefa de separação que deve ser considerada.

Cálculo das colunas de destilação

O cálculo das colunas pertencentes à seqüência pode ser aproximado ou rigoroso; o usuário escolhe qual método quer utilizar. Em ambos os casos, são calculadas as dimensões da coluna, do refeedor, do condensador e do acumulador e, ainda, os custos dos equipamentos e das utilidades. O software sempre faz, inicialmente, um cálculo pelo método aproximado para obter informações como a razão de refluxo mínima, localização do prato de alimentação, etc. Posteriormente, realiza um cálculo rigoroso, se o usuário especificar. No cálculo rigoroso, a razão de refluxo é um valor otimizado para obtenção das especificações desejadas e a posição do prato de alimentação também é otimizada. Todos os valores calculados são gravados em um arquivo em linguagem HTML de fácil visualização e utilização.

Caso estudo

A separação de uma mistura quaternária simples é utilizada para mostrar as potencialidades do software desenvolvido. Na Tabela 4.2, a mistura inicial e as especificações dos produtos são apresentadas.

Neste estudo, a mistura foi separada em 4 produtos. Após as primeiras etapas (caracterização da mistura, montagem da matriz de propriedades da mistura e recomendações dos processos de separação), o programa começa a montagem da seqüência de processos de separação. Os produtos podem ser obtidos considerando separações incompletas ou completas. Na primeira, considera-se a obtenção dos produtos nas especificações desejadas (*sloppy* - não completa); na outra, considera-se a obtenção dos componentes puros (*sharp* - completa) e, posteriormente, misturados para obter os produtos desejados. Todas as combinações de componentes chaves são avaliadas e a distribuição dos componentes não chaves verificada. Os processos que obtêm produtos na faixa de $\pm 20\%$ dos produtos especificados foram considerados possíveis. Na tabela 4.3, uma parte do relatório emitido pelo software é mostrada. Nesta tabela, as seqüências considerando o valor do **CESmodificado** são mostradas.

Tabela 4.2. Especificações da alimentação e dos produtos para o caso estudo

	Vazão molar (kg-mol/h)			
	n-butano	n-pentano	n-hexano	n-heptano
Alimentação Pressão=2,026 bar Temperatura = 323,15 K	25,00	25,00	25,000	25,00
Produto 1	20,00	5,00	0,00	0,00
Produto 2	5,00	15,00	5,00	0,00
Produto 3	0,00	5,00	15,00	5,00
Produto 4	0,00	0,00	5,00	20,00

As informações disponíveis na Tabela 4.3 são: a seqüência de separação, componentes chaves; números de pratos; **CES**; **CESmodificado**; calor fornecido no refeedor; custo dos equipamentos (coluna, condensador, refeedor e acumulador) usando aço carbono e o custo das utilidades (vapor e água de resfriamento ou fluido

refrigerante). O software, como citado anteriormente, usa o simulador ASPEN PLUS para estimar os custos dos equipamentos e das utilidades.

Tabela 4.3. Resultados para a síntese de seqüência de colunas de destilação para a mistura n-butano (C₄H₁₀-1), n-pentano (C₅H₁₂-1), n-hexano (C₆H₁₄-1) e n-heptano (C₇H₁₆-1).

Separação	Chave leve	Chave pesado	Número de pratos	Diâmetro (m)	CES	CESmodificado	Calor fornecido ao refeedor (MMKcal/h)	Custo equipamento (US\$)	Custo utilidades (US\$/ano)
Seqüência 1									
1 / 2 3 4	C ₄ H ₁₀ -1	C ₅ H ₁₂ -1	16	0,914400	10,12	76,47	0,248379	59400,00	855500,00
2 / 3 4	C ₅ H ₁₂ -1	C ₆ H ₁₄ -1	19	0,914400	15,13	50,64	0,263030	63400,00	1000000,00
3 / 4	C ₆ H ₁₄ -1	C ₇ H ₁₆ -1	24	0,914400	27,52	27,52	0,250953	72200,00	1093600,00
Total						47,41	0,762362	195000,00	2949100,00
Seqüência 2									
1 2 / 3 4	C ₅ H ₁₂ -1	C ₆ H ₁₄ -1	21	1,066800	27,12	66,88	0,434683	76600,00	1575600,00
1 / 2	C ₄ H ₁₀ -1	C ₅ H ₁₂ -1	16	0,762000	33,89	33,89	0,168034	50300,00	724800,00
3 / 4	C ₆ H ₁₄ -1	C ₇ H ₁₆ -1	24	0,914400	27,52	27,52	0,250953	72200,00	1093600,00
Total						39,66	0,853670	199100,00	3394000,00
Seqüência 3									
1 2 3 / 4	C ₅ H ₁₂ -1	C ₇ H ₁₆ -1	24	1,371600	8,13	11,29	0,579269	96800,00	2350100,00
1 / 2 3	C ₄ H ₁₀ -1	C ₅ H ₁₂ -1	16	0,762000	15,19	166,81	0,207990	50600,00	811400,00
2 / 3	C ₅ H ₁₂ -1	C ₆ H ₁₄ -1	16	0,762000	34,23	34,23	0,186972	50100,00	778200,00
Total						40,10	0,974231	197500,00	3939700,00

A separação na Tabela 4.3 é representada pelo símbolo " / ", por exemplo, o símbolo "12 / 34" representa a separação da mistura inicial (produtos 1, 2, 3 e 4) onde o produto de topo é a mistura dos produtos 1 e 2, e o produto de fundo é a mistura dos produtos 3 e 4. Se os valores CES fossem usados para comparar a primeira etapa de cada seqüência, observa-se que a melhor separação seria a 12 / 34, mas se os custos dos equipamentos e das utilidades fossem utilizados, esta já não seria a melhor escolha. Se os valores de **CESmodificados** fossem comparados, a primeira etapa seria a separação 1 / 234 e esta seqüência tem o menor custo de equipamento e utilidades. A seqüência 1 também

apresenta o menor consumo de energia. Com a modificação de **CES**, a separação 1 / 234 tornou-se mais fácil do que a separação 12 / 34 e o programa escolheu outra seqüência como a melhor seqüência inicial. Se somente os custos dos equipamentos fossem considerados, a segunda melhor seqüência seria a 3, mas se observa que os custos das utilidades desta seqüência são muito maiores que os das outras mostradas. Observa-se que, paralelamente, aos valores de **CESmodificado** estão os valores do calor fornecido no refulador. A seqüência que utiliza a menor quantidade de calor é a seqüência 1, depois a 2 e por último a 3.

Outros resultados serão mostrados e discutidos durante a apresentação do software nos Capítulos 6 e 7.

Parâmetro N_{min}/N

No cálculo das colunas de destilação para uma determinada separação, se faz necessária a especificação da relação entre o número mínimo de estágios (**N_{min}**) e o número de estágios reais (**N**) utilizados para a separação. Procurou-se não se fixar esta relação, isto é, pode-se utilizar qualquer valor entre zero e um para a mesma.

Para se ter subsídios para a determinação de um valor padrão para esta relação, é fundamental que se faça uma análise da influência deste parâmetro no projeto de colunas de destilação. Esta avaliação foi realizada utilizando uma mistura quaternária simples, a mesma utilizada durante a análise do **CESmodificado**. Novamente, se levou em conta, tanto a separação da mistura em componentes puros (separação completa), e quanto a separação da mistura diretamente nos produtos desejados (separação incompleta).

Os valores considerados para a relação **N_{min}/N** foram 0,2; 0,4; 0,6; 0,8 e 1,0. A influência deste parâmetro no número de estágios teóricos é facilmente observada, isto é, quanto menor for a relação, maior será o número de estágios utilizados na separação, portanto, maior o custo dos equipamentos. A avaliação aqui apresentada pretende não só mostrar como este parâmetro influencia o número de pratos, mas também como age sobre os custos das utilidades (vapor d'água, água de resfriamento e/ou refrigerante), visto que, por exemplo, quanto menor a coluna, maiores serão o refluxo necessário para a separação e o diâmetro da coluna.

Sabe-se que quanto menor a relação N_{\min}/N , maior é o custo dos equipamentos e menores devem ser os gastos com utilidades, visto que se pode trabalhar com refluxos menores. Sabe-se também que, quanto maior a relação N_{\min}/N , menor é o custo dos equipamentos, pois o número de pratos será menor, porém maior é o gasto com utilidades, pois devido ao menor número de pratos, deve-se utilizar maiores refluxos para garantir a separação.

Os resultados obtidos para a separação completa da mistura quaternária são apresentados na Tabela 4.4. Todas as seqüências mostradas foram baseadas no parâmetro **CESmodificado**. Nota-se na Tabela 4.4 que, para $N_{\min}/N=0,8$ e $N_{\min}/N=1,0$ a seqüência direta **A / BCD; B / CD** e **C / D** foi a que apresentou melhores resultados. Para $N_{\min}/N=0,6$ e $N_{\min}/N=0,4$, a melhor seqüência foi **AB / CD; A / B** e **C / D**. A seqüência direta é novamente obtida para $N_{\min}/N=0,2$. A influência deste parâmetro ocorre tanto em termos de custos como também em termos da seqüência obtida, isto é, pode-se obter diferentes seqüências de colunas de destilação conforme o valor de N_{\min}/N especificado.

O custo dos equipamentos está diretamente ligado ao número de estágios e ao diâmetro da coluna de destilação. Nota-se na Tabela 4.4, que a influência do parâmetro N_{\min}/N é pouco significativa. Os diâmetros mudaram muito pouco com a alteração do parâmetro.

Para a separação da mistura inicial em produtos, a seqüência determinada usando o **CESmodificado** foi a mesma para todos os valores de N_{\min}/N (Tabela 4.5). Deve-se observar nas Tabela 4.4 e 4.5 que, para $N_{\min}/N=0,2$, o número de pratos é muito alto, levando a se ter custos mais elevados com os equipamentos. Para outros valores de N_{\min}/N , as diferenças no número de pratos não são significativas, principalmente para $N_{\min}/N \geq 0,6$. Quando se tem a faixa de $0,4 \leq N_{\min}/N \leq 0,6$, o número de pratos não são diferentes comparando-se com $N_{\min}/N=1,0$, porém ocorrem reduções consideráveis nos custos dos equipamentos e das utilidades.

Quando se deseja a melhor combinação entre custos dos equipamentos e das utilidades, deve-se considerar a faixa $0,4 \leq N_{\min}/N \leq 0,6$ para obtenção dos componentes puros. Quando os produtos são obtidos diretamente (Tabela 4.5), os menores custos foram atingidos quando os valores de N_{\min}/N se aproximam de 0,4. Para $N_{\min}/N \geq 0,6$, os custos das utilidades são extremamente altos.

Tabela 4.4 – Sequência de colunas de destilação para a separação da mistura inicial em componentes puros, onde: A=C4H10, B=C5H12, C=C6H14, D=C7H16 e o símbolo “/” significa onde é realizada a separação.

Separação	Chave-leve	Chave-pesado	Número de estágios	Diâmetro (m)	CES	CES Modif.	Carga térmica no refeedor (MMKcal/h)	Custo dos equip. (US\$)	Custo das utilidades (US\$/year)
$N_{min}/N = 1,0$									
A / B C D	C4H10	C5H12	19	1,0668	3,05	9,92	0,58072	91400	2302900
B C / D	C6H14	C7H16	26	1,5240	3,76	4,67	0,85970	125200	3818900
B / C	C5H12	C6H14	23	1,3716	8,18	8,18	0,67149	107900	3037800
Total							2,11192	432400	9159600
$N_{min}/N = 0,8$									
A / B C D	C4H10	C5H12	22	1,2192	3,05	9,84	0,57908	104000	2273500
B C / D	C6H14	C7H16	30	1,5240	3,76	4,62	0,85452	133500	3787600
B / C	C5H12	C6H14	28	1,3716	8,18	8,18	0,66774	113700	3016400
Total							2,10136	351200	9077500
$N_{min}/N = 0,6$									
A B / C D	C5H12	C6H14	48	1,3716	8,27	18,07	0,70094	155400	2718700
A / B	C4H10	C5H12	28	1,0668	9,16	9,16	0,39613	97800	1750600
C / D	C6H14	C7H16	46	1,3716	7,44	7,44	0,62044	148200	2815900
Total							1,71753	401400	7285200
$N_{min}/N = 0,4$									
A B / C D	C5H12	C6H14	73	1,3716	8,27	19,24	0,60341	211300	2274100
A / B	C4H10	C5H12	41	1,0668	9,16	9,16	0,34357	118600	1507300
C / D	C6H14	C7H16	66	1,2192	7,44	7,44	0,47517	180600	2153900
Total							1,42216	510500	5935300
$N_{min}/N = 0,2$									
A / B C D	C4H10	C5H12	84	1,0668	3,05	18,40	0,37330	205800	1324700
B / C D	C5H12	C6H14	135	1,2192	4,09	15,59	0,43271	373700	1833900
C / D	C6H14	C7H16	132	1,2192	7,44	7,44	0,44866	373300	2033000
Total							1,25467	952800	5191600

Tabela 4.5 – Seqüência de colunas de destilação para a separação da mistura inicial em produtos desejados, onde: 1, 2, 3, 4 são os produtos 1,2,3 e 4, respectivamente, e o símbolo “/” significa onde é realizada a separação.

Separação	Chave-leve	Chave-pesado	Número de estágios	Diâmetro (m)	CES	CES modificado	Carga térmica no refeedor MMKcal/h	Custo dos equip. (US\$)	Custo das utilidades (US\$/year)
Nmin/N = 1,0									
1 / 2 3 4	C4H10	C5H12	7	0,7620	10,12	99,49	0,24316	57100	979300
2 / 3 4	C5H12	C6H14	10	0,9144	15,13	20,81	0,39344	68500	1710800
3 / 4	C6H14	C7H16	10	0,9144	27,52	27,52	0,34898	69200	1613500
Total							0,98559	194800	4303600
Nmin/N = 0,8									
1 / 2 3 4	C4H10	C5H12	7	0,7620	10,12	101,40	0,24316	57100	979300
2 / 3 4	C5H12	C6H14	10	0,9144	15,13	22,70	0,39535	68500	1684600
3 / 4	C6H14	C7H16	10	0,9144	27,52	27,52	0,34898	69200	1613500
<i>Total</i>							0,98750	194800	4277400
Nmin/N = 0,6									
1 / 2 3 4	C4H10	C5H12	10	0,7620	10,12	64,34	0,30024	56800	1174600
2 / 3 4	C5H12	C6H14	14	1,0668	15,13	23,07	0,39150	75600	1629300
3 / 4	C6H14	C7H16	15	0,9144	27,52	27,52	0,34642	77100	1592700
Total							1,03816	209500	4396600
Nmin/N = 0,4									
1 / 2 3 4	C4H10	C5H12	14	0,7620	10,12	54,22	0,28407	60400	1061200
2 / 3 4	C5H12	C6H14	18	1,0668	15,13	30,69	0,32192	79800	1306700
3 / 4	C6H14	C7H16	19	0,9144	27,52	27,52	0,30136	77900	1384800
Total							0,90735	218100	3752700
Nmin/N = 0,2									
1 / 2 3 4	C4H10	C5H12	29	0,6096	10,12	73,79	0,24803	76200	897600
2 / 3 4	C4H10	C5H12	35	0,9144	12,04	44,44	0,23477	96500	960400
3 / 4	C6H14	C7H16	37	0,9144	27,52	27,52	0,26213	106600	1204100
Total							0,74493	279300	3062100

Depois desta investigação, o valor padrão recomendado para a relação N_{\min}/N é 0,4, mas o programa desenvolvido permite que outros valores sejam utilizados. Também se recomenda que o valor deste parâmetro deve estar entre 0,4 e 0,6 ($0,4 \leq N_{\min}/N \leq 0,6$). Na Figura 4.6, é mais fácil visualizar a influência deste parâmetro, N_{\min}/N , nos custos das colunas de destilação. Pode-se observar que, para a obtenção dos componentes puros (Figura 4.6a), a melhor combinação “custos da coluna e das utilidades” foi obtida na faixa $0,4 \leq N_{\min}/N \leq 0,6$. Quando a obtenção direta dos produtos foi considerada (Figura 4.6b), os melhores valores foram obtidos com N_{\min}/N próximo de 0,4. Para $N_{\min}/N = 0,6$, o valor padrão recomendado N_{\min}/N é 0,4, mas o software permite que o usuário defina um outro valor. Existe também uma recomendação para que o valor de N_{\min}/N esteja entre 0,4 e 0,6 ($0,4 \leq N_{\min}/N \leq 0,6$).

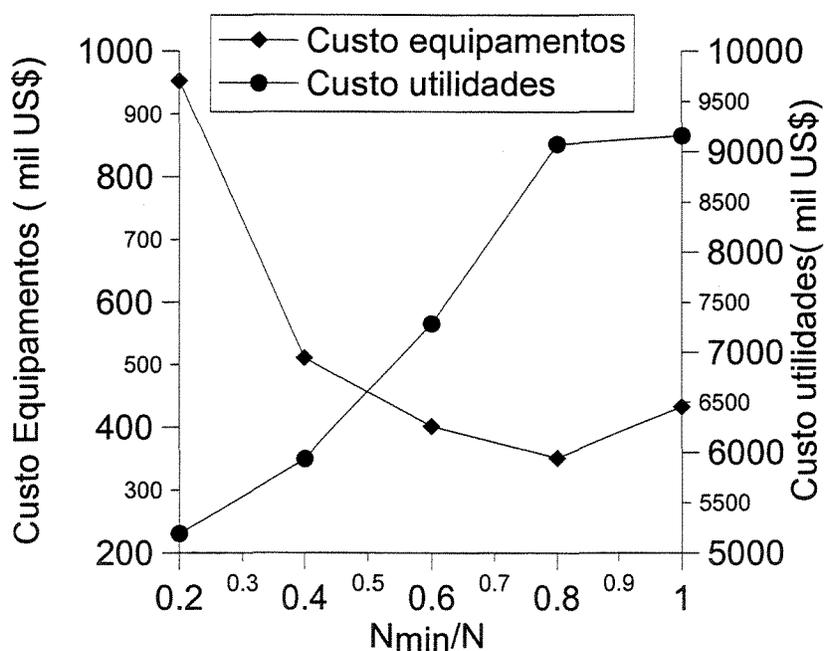


Figura 4.6.a. Separação completa – a mistura é separada em componentes puros

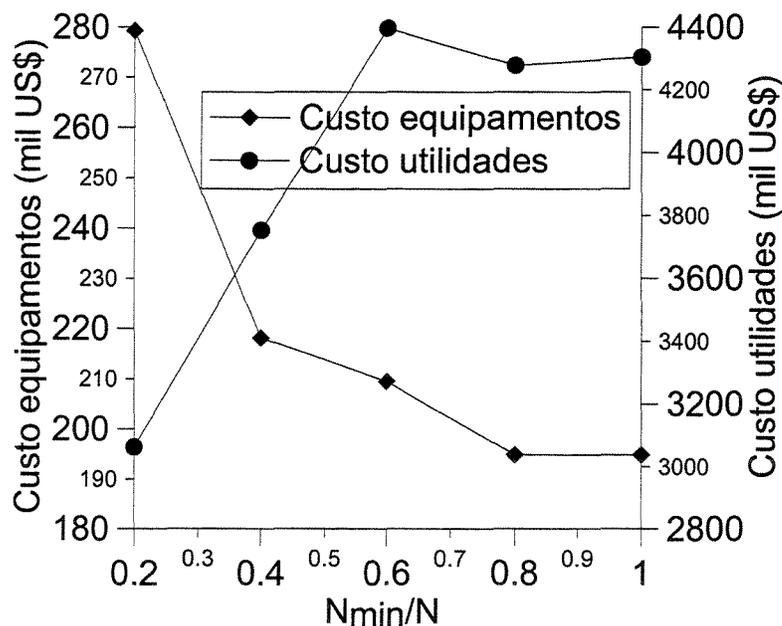


Figura 4.6.b Separação da mistura inicial em produtos

Figura 4.6. Custos dos equipamentos e das utilidades para uma seqüência de coluna de destilação.

4.4. CONCLUSÕES

A estrutura básica do sistema especialista foi apresentada neste capítulo. Procurou-se mostrar como são as interligações entre as diferentes rotinas presentes no programa, isto é, o que foi feito em linguagem FORTRAN, o que foi calculado a partir do simulador ASPEN PLUS™ e como visualizar os dados obtidos.

Uma adaptação do coeficiente de facilidade da separação foi proposta procurando levar em conta o consumo de utilidades usando o calor fornecido no refeedor como variável de análise e mostrou-se eficiente para auxiliar na síntese de seqüências de colunas de destilação. Esta adaptação será mais explorada no capítulo 7 deste trabalho de tese.

Além do parâmetro que indica a separação mais fácil e qual deve ser executada por primeiro, outro parâmetro foi discutido, o parâmetro N_{min}/N . Este parâmetro está diretamente ligado aos custos fixos e das utilidades em colunas de destilação. Avaliou-se

qual seria a faixa de valores aceitável para este parâmetro, pois se este é muito próximo de um, os custos com utilidades serão maiores, mas se este é próximo de zero, 0,1 por exemplo, os custos fixos tornam-se elevados demais. O valor recomendado para este parâmetro está entre 0,4 e 0,6. De qualquer forma, este valor pode ser modificado no início da utilização do programa.

Neste capítulo também foram apresentadas algumas regras heurísticas que devem ser utilizadas em conjunto com o parâmetro **CES modificado** para a síntese de processos de separação.

CAPÍTULO 5.

ALGORITMO MULTIPROPÓSITO PARA CARACTERIZAÇÃO DE SISTEMAS LÍQUIDOS COMPLEXOS

5.1. INTRODUÇÃO

Nesta etapa do trabalho procurou-se desenvolver rotinas específicas que contribuíssem para a caracterização da mistura a ser analisada pelo programa especialista e, também, para a seleção do melhor solvente (agente de separação mássico) para utilização em processos como a destilação extrativa e a destilação azeotrópica. Foram desenvolvidas três sub-rotinas: uma para cálculo do *flash* isotérmico trifásico, uma para gerar os pontos para o desenho das superfícies de equilíbrio e a última para a predição de azeótropos binários e ternários, heterogêneos ou homogêneos. Procurou-se ser o mais genérico possível no desenvolvimento destas rotinas, possibilitando, assim, sua fácil adaptação ao programa do sistema especialista em desenvolvimento.

5.2. IMPLEMENTAÇÃO DE UM ALGORITMO PARA O CÁLCULO DE *FLASH* MULTIFÁSICO ISOTÉRMICO

Entre as várias operações de separação existentes na indústria química, a destilação se destaca pelo seu extensivo emprego tendo como objetivo a separação de substâncias que possuem diferentes pressões de vapor a qualquer temperatura. Contudo, quando a volatilidade relativa dos diferentes componentes a serem separados é próxima da unidade ou quando a mistura apresenta azeótropo, surgem sérias limitações neste processo, inviabilizando, muitas vezes, a obtenção de substâncias de alta pureza ou a recuperação de substâncias de alto valor agregado. Nestes casos, uma das alternativas possíveis para que se consiga a separação é a destilação azeotrópica, caracterizada pela adição de um solvente à mistura alterando a volatilidade relativa dos componentes em uma direção favorável à

separação. O solvente adicionado, geralmente, é não miscível com um dos componentes da mistura original, o que poderá implicar na formação de duas fases líquidas nos pratos da coluna de separação. Então, a simulação efetiva destes processos deve levar em conta tal fato para que se possam obter respostas fisicamente corretas.

Este trabalho tem como uma de suas finalidades o desenvolvimento de um algoritmo eficiente de cálculo *flash* dos vários tipos de equilíbrio usualmente encontrados nos processos de destilação, englobando inclusive o equilíbrio líquido-líquido-vapor (ELLV). O presente algoritmo se constitui em uma ferramenta muito útil podendo ser empregada de maneira “on-line” com o sistema especialista. Além disso, a própria operação *flash* é um intermediário importante na indústria de processamento, configurando-se como uma operação de separação independente. Deste modo, a operação também estará constante no sistema especialista.

5.3. O CÁLCULO *FLASH*

Segundo a literatura, a eficiência dos algoritmos de cálculo *flash* está condicionada a dois pontos fundamentais:

- o emprego de um modelo termodinâmico das fases em equilíbrio o mais realista possível, capaz de representar ao mesmo tempo o equilíbrio líquido-líquido (ELL), equilíbrio líquido-vapor (ELV) e o equilíbrio líquido-líquido-vapor (ELLV);
- a disponibilidade de uma boa estimativa inicial das composições das fases em equilíbrio, para que a convergência obtida esteja fisicamente correta. Até mesmo a não necessidade desta estimativa, o que seria inovador.

Para o algoritmo proposto foi escolhida a metodologia de cálculo baseada na igualdade de fugacidades para cada componente em cada fase. Vários algoritmos foram propostos segundo esta metodologia. Por exemplo: Prausnitz et al (1991), Wu e Bishnoi (1986), Henley e Rosen (1969), Nelson (1987) e Andrade (1991).

Uma desvantagem deste método, nos procedimentos de cálculo convencionais apresentados na literatura, está no tempo computacional necessário para gerar estimativas iniciais, dificultando a aplicação do algoritmo na modelagem do processo de destilação azeotrópica.

A Figura 5.1 representa um processo isotérmico de *flash* em estado estacionário, onde são conhecidas a temperatura, pressão, composição e vazão da alimentação. As variáveis a serem calculadas são a composição e vazão das respectivas correntes de saída, ou seja, vapor (V), líquido 1 (L₁) e líquido 2 (L₂).

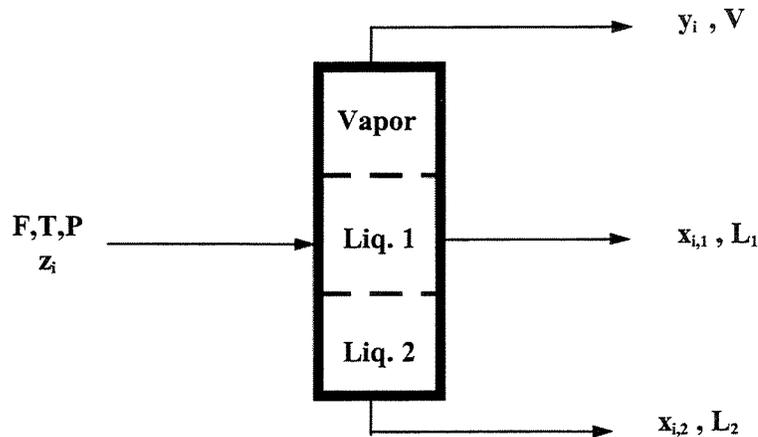


Figura 5.1. *Flash* com várias fases líquidas

O algoritmo elaborado realiza o cálculo de *flash* trifásico baseado na resolução das equações de balanço de massa e equilíbrio termodinâmico pela técnica de aproximação reduzida empregando dois fatores de separação definidos segundo Henley e Rosen (1969):

$$\alpha = \frac{V}{F} \quad (5.1)$$

$$\beta = \frac{L^I}{L^I + L^{II}} \quad (5.2)$$

Relacionaram-se os fatores de separação acima com as composições por meio das funções de Rachford-Rice:

$$f_{(1)}(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^c [y_i - x_i^I] \quad (5.3)$$

$$f_{(2)}(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^c [x_i^I - x_i^{II}] \quad (5.4)$$

Após algumas manipulações algébricas, obtém-se:

$$f_1(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^c \left[\frac{z_i(1 - K_{i,1})}{\beta(1 - \alpha) + (1 - \alpha)(1 - \beta) \frac{K_{i,1}}{K_{i,2}} + \alpha K_{i,1}} \right] = 0 \quad (5.5)$$

$$f_2(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^c \left[\frac{z_i \left(1 - \frac{K_{i,1}}{K_{i,2}} \right)}{\beta(1 - \alpha) + (1 - \alpha)(1 - \beta) \frac{K_{i,1}}{K_{i,2}} + \alpha K_{i,1}} \right] = 0 \quad (5.6)$$

onde:

$$K_{i,1} = \frac{y_i}{x_{i,1}} \quad (5.7)$$

$$K_{i,2} = \frac{y_i}{x_{i,2}} \quad (5.8)$$

As equações (5.5) e (5.6) associadas com uma relação para os K's permitem através de um procedimento iterativo a obtenção das quantidades e composições das respectivas fases:

$$K_{i,j} = K_{i,j}(X_j, Y, T, P) \quad (5.9)$$

$$x_{i,1} = \frac{z_i}{\beta(1 - \alpha) + (1 - \alpha)(1 - \beta) \frac{K_{i,1}}{K_{i,2}} + \alpha K_{i,1}} \quad (5.10)$$

$$x_{i,2} = \frac{z_i}{\beta(1 - \alpha) \frac{K_{i,2}}{K_{i,1}} + (1 - \alpha)(1 - \beta) + \alpha K_{i,2}} \quad (5.11)$$

$$y_i = \frac{z_i}{\beta(1 - \alpha) \frac{1}{K_{i,1}} + (1 - \alpha)(1 - \beta) \frac{1}{K_{i,2}} + \alpha} \quad (5.12)$$

Restrições:

$$0 \leq \alpha \leq 1 \quad (5.13)$$

$$0 \leq \beta \leq 1 \quad (5.14)$$

Para o cálculo de K estão disponíveis vários métodos para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor: para a fase vapor a equação do virial e para a fase líquida vários métodos como UNIQUAC, NRTL e Margules e método de contribuição de grupos (UNIFAC).

As estimativas iniciais para os fatores de separação e composições das fases em equilíbrio foram obtidas da seguinte maneira:

- emprego de um *flash* L-V para se obter estimativas para α e composição da fase vapor (y_i 's);
- cálculo do ponto de bolha e emprego de uma separação $L^{(1)}$ - $L^{(2)}$ para se conseguir estimativas para β e composição das fases líquida 1 ($x^{(1)}$'s) e líquida 2 ($x^{(2)}$'s).

O emprego destas estimativas geradas automaticamente contribuiu sensivelmente para o rápido cálculo do *flash*, tornando confiável e robusta a rotina desenvolvida.

Segundo Nelson (1987) e também testado por Andrade (1991), na maioria dos casos, somente uma ou duas fases de um sistema potencialmente trifásico está presente. Assim, com o intuito de se reduzir o tempo computacional e facilitar o cálculo dos fatores de separação, aplicou-se o método rápido de determinação do número e tipo de fases proposto pelo autor acima:

Fase Vapor (V):

$$\sum_{i=1}^c \frac{z_i}{K_{i,1}^l} < 1 \quad (5.16)$$

$$\sum_{i=1}^c \frac{z_i}{K_{i,2}^l} < 1 \quad (5.17)$$

Fase Líquida 1 ($L^{(1)}$):

$$\sum_{i=1}^c z_i K_{i,1}^l < 1 \quad (5.18)$$

$$\sum_{i=1}^c z_i \frac{K_{i,1}^l}{K_{i,2}^l} < 1 \quad (5.19)$$

Fase Líquida 2 (L⁽²⁾):

$$\sum_{i=1}^c z_i K_{i,2}^l < 1 \quad (5.20)$$

$$\sum_{i=1}^c z_i \frac{K_{i,2}^l}{K_{i,1}^l} < 1 \quad (5.21)$$

No caso de equilíbrio entre duas fases é necessário se analisar as funções abaixo para se ter unicidade nas condições apresentadas:

$$Q_1(\psi_1, \psi_2) = \sum_{i=1}^c \frac{z_i K_{i,2}^l (1 - K_{i,1}^l)}{K_{i,1}^l K_{i,2}^l + \psi_1 K_{i,2}^l (1 - K_{i,1}^l) + \psi_2 K_{i,1}^l (1 - K_{i,2}^l)} \quad (5.22)$$

$$Q_2(\psi_1, \psi_2) = \sum_{i=1}^c \frac{z_i K_{i,1}^l (1 - K_{i,2}^l)}{K_{i,1}^l K_{i,2}^l + \psi_1 K_{i,2}^l (1 - K_{i,1}^l) + \psi_2 K_{i,1}^l (1 - K_{i,2}^l)} \quad (5.23)$$

Fase Vapor (V) e Fase Líquida 1 (L⁽¹⁾):

$$\sum_{i=1}^c \frac{z_i}{K_{i,1}^l} > 1 \quad (5.24)$$

$$\sum_{i=1}^c z_i K_{i,1}^l > 1 \quad (5.25)$$

$$Q_2(\psi_1, 0) < 0 \text{ na raiz de } Q_1(\psi_1, 0) = 0;$$

Fase Vapor (V) e Fase Líquida 2 (L⁽²⁾):

$$\sum_{i=1}^c \frac{z_i}{K_{i,2}^l} > 1 \quad (5.26)$$

$$\sum_{i=1}^c z_i K_{i,2}^l > 1 \quad (5.27)$$

$$Q_1(0, \psi_2) < 0 \text{ na raiz de } Q_2(0, \psi_2) = 0;$$

Fase Líquida 1 (L⁽¹⁾) e Fase Líquida 2 (L⁽²⁾):

$$\sum_{i=1}^c z_i \frac{K_{i,1}^l}{K_{i,2}^l} > 1 \quad (5.28)$$

$$\sum_{i=1}^c z_i \frac{K_{i,2}^l}{K_{i,1}^l} > 1 \quad (5.29)$$

$$Q_1(\psi_1, 1 - \psi_1) > 0 \text{ ou } Q_2(\psi_1, 1 - \psi_1) > 0 \text{ na raiz de}$$

$$Q_1(\psi_1, 1 - \psi_1) - Q_2(\psi_1, 1 - \psi_1) = 0.$$

Foram empregados vários modelos termodinâmicos para a fase líquida, sendo que alguns resultados estão dispostos no próximo item. Em todas as simulações realizadas a fase vapor foi considerada ideal.

5.4. MÉTODOS NUMÉRICOS EMPREGADOS

As equações envolvidas no cálculo do *flash* trifásico apresentam um forte caráter não-linear exigindo assim a aplicação de métodos numéricos especializados na busca das soluções. Para o presente caso, aplicou-se:

- método de Newton-Raphson (MNR); com convergência global;
- método da secante;
- método da bissecção.

Após a obtenção das estimativas iniciais utilizou-se o método de Newton-Raphson para obter a solução do sistema de equações gerado, porém quando a solução estava muito próxima dos extremos das restrições físicas impostas a α e β , isto é, α ou β com valores muito próximos de zero ou de 1, a solução não era obtida devido a problemas de convergência. Nestes casos dois outros métodos para solução das equações foram empregados, o da secante e o da bissecção. A utilização destes métodos tem como objetivo uma maior aproximação da solução do sistema, e então utilizar novamente o método de Newton-Raphson.

Esta metodologia de cálculo garantiu que se obteria uma solução correta e rápida para o *flash* trifásico, visto que se aliou a rapidez de solução do Método de Newton-Rapson para se aproximar da solução, e empregaram-se métodos mais robustos para refinamento da solução final (Luz Jr *et al.*, 1998b). Também se garantiu, com o uso de métodos mais robustos, que quando o método de Newton-Rapson propusesse soluções fora das restrições

do sistema não ocorreriam problemas de convergência. A seguir estão ilustradas algumas aplicações do algoritmo elaborado:

- Sistema 01: Etanol-Benzeno-Água - Resultados podem ser vistos na tabela 5.1 Temperatura: 63,70 °C - Pressão: 1,013 bar

Tabela 5.1: Comparação entre as composições calculadas pelo programa elaborado e as obtidas por Henley e Rosen (1969). Tem-se que $\alpha^{(1)}=0.38894$ sendo $\alpha = 0.38884$ o valor da fração vaporizada obtida pelo programa; no caso da relação entre as fases líquidas tem-se que $\beta=0.89385$ e $\beta^{(1)}=0.89389$.

Espécie	z_i	$x_{i,1}^{(1)}$	$x_{i,1}$	$x_{i,2}^{(1)}$	$x_{i,2}$	$y_i^{(1)}$	y_i
Etanol	0.23	0.22451	0.22455	0.09664	0.09649	0.25994	0.25992
Benzeno	0.27	0.00422	0.00422	0.89016	0.89026	0.53984	0.53990
Água	0.50	0.77127	0.77122	0.01320	0.01324	0.20017	0.20016

- Sistema 02: Butanol-Água (vide Figura 5.2)
Pressão: 1,013 bar

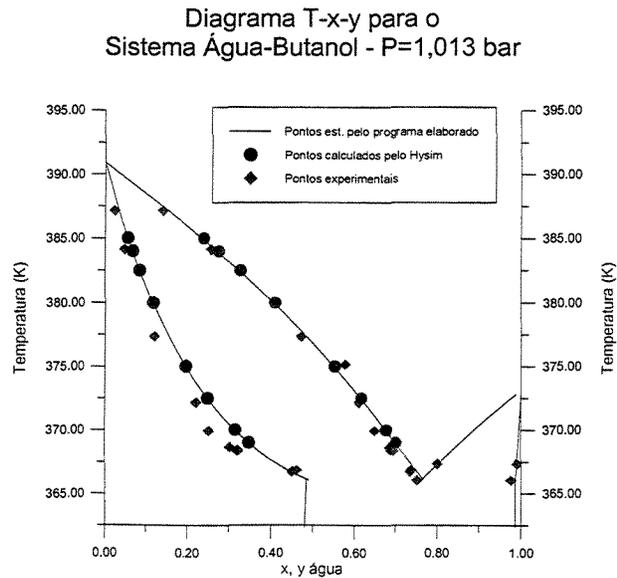


Figura 5.2. Diagrama T-x-y para o sistema Butanol-Água

Os resultados obtidos pela rotina desenvolvida foram comparados com os resultados obtidos pelo simulador comercial Hysim para o sistema Butanol-água. Analisando-se os resultados obtidos pode-se afirmar que os gerados pelo algoritmo proposto estão bastante próximos dos fornecidos pelo simulador comercial Hysim. Este simulador, no entanto, só trabalha ponto a ponto, e para a caracterização de um sistema, necessita-se de centenas de pontos (superfície de equilíbrio) (Maciel, 1989). Em relação aos dados experimentais, tem-se que houve boa concordância principalmente para a composição da fase vapor estimada (considerada ideal durante os cálculos); já as composições obtidas para as fases líquidas se desviaram um pouco mais dos respectivos valores experimentais, indicando uma forte não idealidade da fase líquida.

5.5. SUPERFÍCIES DE EQUILÍBRIO

A rotina desenvolvida para o cálculo do *flash* trifásico foi adaptada para a geração de superfícies de equilíbrio. O conceito de superfícies de equilíbrio foi desenvolvido por Maciel (Maciel, 1989). Estas superfícies representam o equilíbrio líquido - (líquido) - vapor de sistemas ternários em analogia às curvas de equilíbrio (diagramas XY) de sistemas binários.

Nas superfícies, o componente 1 será o mais volátil, o intermediário em volatilidade será o componente 2 e o menos volátil será o componente 3. As variáveis independentes são as frações molares na fase líquida e as frações molares na fase vapor são as variáveis dependentes. Duas superfícies entre as três possíveis são utilizadas para descrever um sistema, são elas as superfícies $X_1X_2Y_1$, $X_2X_3Y_2$ e $X_3X_2Y_3$. Nestas superfícies o X representa as frações molares na fase líquida, o Y as frações molares na fase vapor e, 1, 2 e 3 os componentes 1, 2 e 3, respectivamente.

Um sistema ideal é caracterizado pela ausência de vales, inflexões ou patamares. Nas Figuras 5.3, 5.4 e 5.5 mostram-se as superfícies para o sistema ideal n-butano, n-pentano e n-heptano. Um sistema não ideal, ao contrário do sistema ideal, apresentará inflexões ou patamares como se observa nas Figuras 5.6, 5.7 e 5.8 para o sistema etanol/benzeno/água e nas Figuras 5.9, 5.10 e 5.11 para o sistema etanol/água/etilenoglicol.

Outro conceito proposto por Maciel, 1989 foi o da linha de inversão. Esta linha representa os pontos onde a fração molar na fase vapor é igual à fração molar na fase líquida ($Y_2=X_2$). Nos sistemas ideais a linha de inversão é uma reta, para sistemas não ideais a linha de inversão terá diferentes formatos conforme a característica do solvente. Em Maciel e Vasconcelos (1998) foi mostrado como o formato da linha de inversão indica a aplicabilidade de um solvente para a destilação extrativa ou azeotrópica.

Nas Figuras 5.4, 5.7 e 5.10 podem ser observadas as linhas de inversão para diferentes sistemas. As superfícies de equilíbrio auxiliam na caracterização termodinâmica do sistema ternário. Através das superfícies Y_1 , Y_2 e Y_3 pode-se identificar se há formação de duas fases líquida, sua composição e se existe azeótropo ternário. Em Maciel e Vasconcelos (1998) mostra-se que o formato em L (Figura 5.10) da linha de inversão indica um bom solvente para ser usado na destilação extrativa. Nos solventes recomendados para a destilação azeotrópica a linha de inversão tem formato de **semicírculo** (Figura 5.7) na parte superior do plano diagonal. A rotina desenvolvida está acoplada ao programa especialista elaborado neste trabalho.

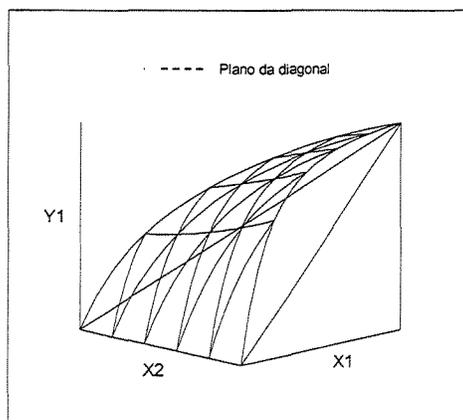


Figura 5.3 - Superfície de Equilíbrio em Y_1 para o sistema n-butano(1)/n-heptano(2)/n-hexano(3) a 2 atm.

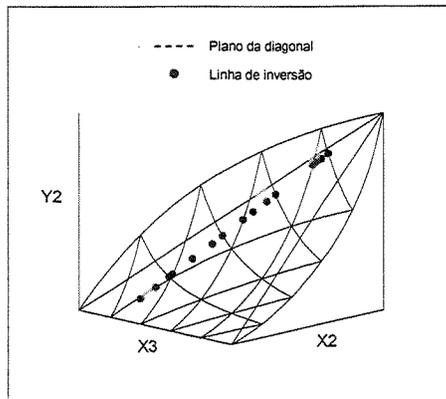


Figura 5.4 - Superfície de Equilíbrio em Y2 para o sistema n-butano(1)/n-heptano(2)/n-hexano(3) a 2 atm.

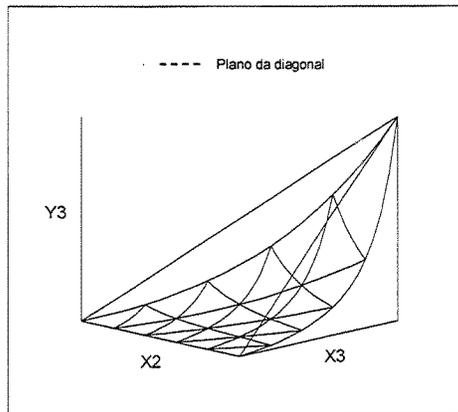


Figura 5.5 - Superfície de Equilíbrio em Y3 para o sistema n-butano(1)/n-heptano(2)/n-hexano(3) a 2 atm.

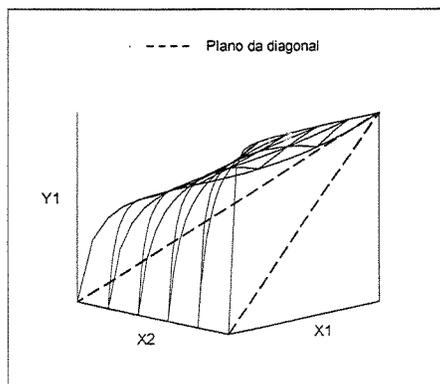


Figura 5.6 - Superfície de Equilíbrio em Y1 para o sistema etanol(1)/água(2)/etilenoglicol(3) a 1 atm.

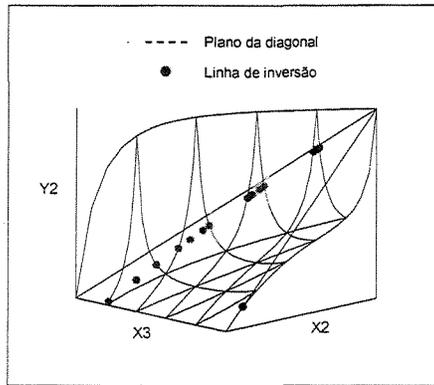


Figura 5.7 - Superfície de Equilíbrio em Y2 para o sistema etanol(1)/água(2)/etilenoglicol(3) a 1 atm.

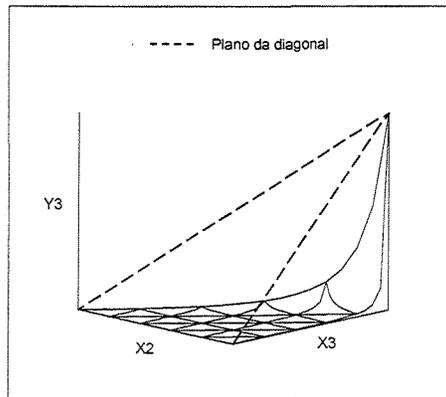


Figura 5.8 - Superfície de Equilíbrio em Y3 para o sistema etanol(1)/água(2)/etilenoglicol(3) a 1 atm.

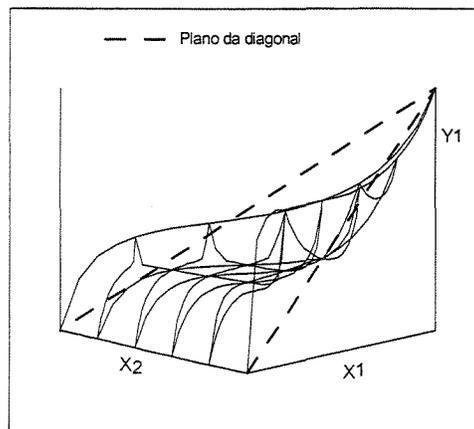


Figura 5.9 - Superfície de Equilíbrio em Y1 para o sistema etanol(1)/benzeno(2)/água(3) a 1 atm.

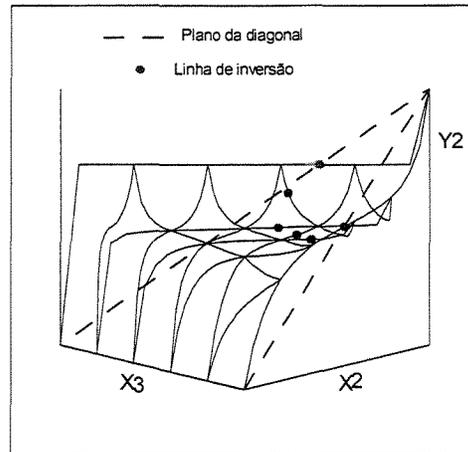


Figura 5.10 - Superfície de Equilíbrio em Y2 para o sistema etanol(1)/benzeno(2)/ água(3) a 1 atm.

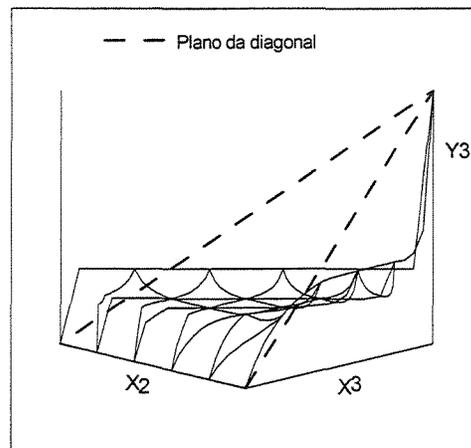


Figura 5.11 - Superfície de Equilíbrio em Y3 para o sistema etanol(1)/benzeno(2)/ água(3) a 1 atm.

5.6. CÁLCULO DOS AZEÓTROPAS

Algumas misturas importantes de uso industrial apresentam azeótropos, e a estimativa da existência de pontos de azeotropia homogêneos ou heterogêneos é particularmente importante na síntese e projeto de colunas de destilação azeotrópica, além de ser extremamente importante na caracterização de sistemas que vão ser separados. A importância do cálculo da composição do azeótropo heterogêneo está relacionada com a seleção do solvente que poderá ser empregado na destilação azeotrópica.

Quando uma mistura tem um ponto de azeotropia a fração molar do componente i (x_i) no líquido é igual à fração molar do mesmo componente (y_i) no vapor. Neste trabalho, empregou-se a minimização da diferença entre as composições do vapor e o do líquido, mais a diferença entre a temperatura do ponto de orvalho e do ponto de bolha. Definiu-se, então, a função objetivo que calcula a composição no ponto de azeotropia:

$$F_{\text{obj}} = \min \left[\sum_{i=1}^c (y_i - x_i) + (T_{\text{Orvalho}} - T_{\text{Bolha}}) \right] \quad (5.30)$$

que foi minimizada através da técnica de programação quadrática recursiva (*Recursive Quadratic Programming*, Barthlomev-Biggs, 1972). As estimativas para o primeiro passo da otimização foram obtidas com o método de Newton-Raphson. Apesar da equação da função objetivo ser bastante simples, a sua utilização mostrou-se bastante eficiente para a predição da existência de azeótropos. O ponto de partida para a minimização da função objetivo é obtido através de várias simulações de *flash* trifásico com diferentes composições iniciais. Aquela composição na qual se obtém o menor valor da função objetivo (equação 5.30) é o ponto inicial da busca do mínimo da função. Procurou-se durante a elaboração da rotina evitar-se que quando da predição de azeótropos binários, se obtivesse como resultado a condição de um dos componentes puros e que quando da predição dos azeótropos ternários, se obtivesse o azeótropo binário como resultado. Alguns resultados são apresentados na Tabela 5.2 a sistemas binários e ternários.

Os resultados obtidos pelo programa são bastante próximos aos reportados por Pham e Doherty (1990) usando o mesmo modelo termodinâmico (NRTL) para o cálculo dos coeficientes de atividade, entretanto, as metodologias empregadas são diferentes. Quando os resultados são comparados com os dados experimentais, observam-se desvios em relação a ambos os trabalhos. Este fato pode ser explicado pela escolha de parâmetros de interação binários, ou mesmo erros experimentais. Estes procedimentos serão utilizados na predição de pontos de azeotropia. Também poder-se-á avaliar como a pressão influencia nos pontos de azeotropia de certos sistemas. Outros exemplos usando o programa para predição de azeótropos podem ser vistos nas Tabela 5.3 e Tabela 5.4.

Tabela 5.2. Dados de Azeotropia para o sistema etanol(1)-benzeno(2)-água(3)

	<u>Este Trabalho</u>				<u>Pham and Doherty</u>				<u>Dados Experimentais(*)</u>			
	x ₁	x ₂	x ₃	T _{az}	x ₁	x ₂	x ₃	T _{az}	x ₁	x ₂	x ₃	T _{az}
(1)+(2)	0,4506	0,5494	-	341,49	0,4487	0,5513	-	341,49	0,4393	0,5607	-	341,25
(1)+(3)	0,9000	-	0,0999	351,24	0,8938	-	0,1062	351,31	0,9037	-	0,0963	351,32
(2)+(3)	-	0,7007	0,2993	342,51	-	0,6998	0,3002	342,44	-	0,7044	0,2956	342,40
(1)+(2)+(3)	0,2734	0,5219	0,2047	337,43	0,2738	0,5217	0,2045	337,41	0,2282	0,5387	0,2331	338,01

(*) Horsley(1973).

Tabela 5.3 - Comparação entre os valores calculados e tabelados para o ponto de azeótropo para o sistema etanol(1)/ciclohexano(2)/água(3).

	x ₁	x ₂	x ₃	T _{az}
Calculado pelo programa	0,3268	0,5226	0,1506	335,2
Eckert e Kubicek (1997)	0,3167	0,5265	0,1568	335,6
Muller et al (1997)	0,318	0,502	0,180	-

Tabela 5.4 - Comparação das composições das fases orgânica e aquosa para o sistema etanol(1)/ciclohexano(2)/água(3)

	Fase orgânica			Fase aquosa		
	x ₁	x ₂	x ₃	x ₁	x ₂	x ₃
Calculado pelo programa	0,6160	0,0530	0,3310	0,0906	0,9062	0,0032
Eckert e Kubicek (1997)	0,5994	0,0532	0,3474	0,0880	0,9092	0,0028

Além disso, as determinações das condições azeotrópicas podem ser empregadas para decidir, se um solvente é adequado para utilização em processo de destilação azeotrópica ou com modificações para a extração líquido-líquido. O cálculo do equilíbrio de fases trifásico pode realmente contribuir para especificar condições operacionais onde somente uma fase líquida ocorre, e regiões onde é impossível evitar a presença de duas fases líquidas.

5.7. A PREDIÇÃO DE AZEÓTROPIS

Durante qualquer análise que se faça sobre a separação de uma mistura é primordial que se saiba se os componentes presentes formam ou não azeótropos binários e ternários, homogêneos ou heterogêneos. A existência de azeótropos pode alterar completamente a seqüência dos processos de separação empregados na separação dos

produtos. Pode ser necessário até o uso de um novo componente de forma a modificar o equilíbrio de fases presente no sistema em estudo.

Neste item serão mostrados alguns resultados para diferentes misturas que apresentam azeótropos. Tem-se por objetivo mostrar que o procedimento proposto para a predição de azeótropos é bastante eficiente e robusto para a estimativa da temperatura e da composição do no ponto de azeotropia. Todos os parâmetros binários do modelo de atividade (NRTL) utilizados no programa foram retirados do Banco de Dados do simulador ASPEN PLUS.

Na Tabela 5.5 mostram-se os resultados para um primeiro grupo de mistura que relacionam alguns álcoois com a água. Nota-se que as estimativas para os pontos de azeotropia estão muitos próximas dos valores experimentais, principalmente com relação à predição das temperaturas, para as quais os erros foram menores que 1 %. Para as composições os erros foram um pouco maiores, chegando a um máximo em torno de 6 %. Depois, em um segundo grupo, avaliaram-se dois sistemas contendo água e hidrocarbonetos aromáticos, com desvios muitos pequenos entre os valores preditos e os experimentais. Finalmente comparou-se os resultados para os sistemas água-MEK (metil-etil-cetona) e água-acetato de etila, estes foram muito bons para predizer a temperatura do azeótropo, porém apresentaram grandes desvios para a composição.

Vale a pena citar a informação mais importante que se pode obter com este procedimento é a existência do azeótropo e depois quais são sua temperatura e composição. Um outro grupo analisado foi o de sistemas contendo o tetracloreto de carbono (CCl_4), da mesma forma que os sistemas anteriores obtiveram-se valores preditos para a temperatura muito próximos aos valores experimentais e a predição da composição no ponto de azeotropia com erros de até 10% para sistemas contendo álcoois.

Tabela 5.5. Comparação entre valores preditos do ponto de azeotropia e valores experimentais para alguns sistemas binários.

Componente	Componente	Valores Experimentais*			Valores preditos			x	T
		Fração molar (%)		T	Fração molar (%)		T		
1	2	x ₁	X ₂	(°C)	x ₁	x ₂	(°C)	(%)	(%)
Água	Etanol	10,57	89,43	78,15	10,46	89,54	78,14	-1,08	-0,01
Água	Álcool Alílico	54,50	45,50	88,20	56,07	43,93	88,67	2,89	0,53
Água	1-Propanol	56,83	43,17	87,72	59,79	40,21	87,68	5,21	-0,04
Água	2-Propanol	31,46	68,54	80,37	33,49	66,51	80,40	6,46	0,03
Água	n-Butanol	75,00	25,00	92,25	75,43	24,57	92,67	0,58	0,46
Água	Benzeno	29,60	70,40	69,25	29,90	70,10	69,35	1,02	0,14
Água	Tolueno	55,60	44,40	84,10	55,89	44,11	84,50	0,53	0,47
Água	Metil-etil-cetona	33,00	67,00	73,45	36,44	63,57	73,65	10,41	0,28
Água	Acetato de etila	24,00	76,00	70,40	32,66	67,34	71,61	36,07	1,71
CCl ₄	Metanol	44,50	55,50	55,70	46,66	53,34	56,11	4,86	0,73
CCl ₄	Etanol	61,30	38,70	64,95	61,06	38,94	65,24	-0,39	0,45
CCl ₄	Álcool Alílico	73,00	27,00	72,32	79,81	20,19	72,73	9,33	0,56
CCl ₄	1-Propanol	75,00	25,00	72,80	71,80	28,21	71,37	-4,27	-1,96
CCl₄	Acetato de etila	43,00	57,00	74,75	55,00	45,00	74,88	27,91	0,17
Etanol	Metil-etil-cetona	45,00	55,00	74,80	50,03	49,97	74,19	11,17	-0,81
Etanol	Acetato de etila	46,00	54,00	71,80	44,68	55,32	71,80	-2,88	0,00
Etanol	Hexano	33,20	66,80	58,68	33,72	66,28	57,82	1,56	-1,47
Etanol	Heptano	67,00	33,00	72,00	65,22	34,78	71,40	-2,65	-0,84
Etanol	Ciclohexano	44,50	55,50	64,90	43,90	56,10	64,80	-1,35	-0,16
Etanol	Benzeno	44,80	55,20	68,24	44,53	55,47	67,70	-0,61	-0,79
Etanol	Tolueno	81,00	19,00	76,65	80,93	19,07	76,85	-0,09	0,26
Etanol	Clorofórmio	16,00	84,00	59,30	15,59	84,41	59,28	-2,54	-0,03
1-Propanol	Benzeno	20,90	79,10	77,12	22,61	77,39	77,06	8,20	-0,08
1-Propanol	Tolueno	60,00	40,00	92,60	63,02	36,98	92,30	5,04	-0,33
1-Propanol	Hexano	6,00	94,00	65,65	14,93	85,07	66,71	148,85	1,62

Continuação da Tabela 5.5

Metanol	Acetona	20,00	80,00	55,70	22,41	77,60	55,23	12,03	-0,84
Metanol	Acetato de metila	35,00	65,00	54,00	31,71	68,29	54,00	-9,39	-0,01
Metanol	Acetato de etila	91,70	8,30	62,30	70,44	29,56	62,21	-23,19	-0,14
Metanol	n-Pentano	13,00	87,00	31,00	20,55	79,45	31,06	58,11	0,19
Metanol	Hexano	51,00	49,00	50,60	51,84	48,16	53,89	1,64	6,50
Metanol	Heptano	83,00	17,00	60,50	77,67	22,33	59,32	-6,42	-1,95
Metanol	Ciclohexano	61,00	39,00	54,20	60,44	39,56	54,43	-0,91	0,42
Metanol	Benzeno	61,40	38,60	53,84	60,70	39,31	57,94	-1,15	7,62
Metanol	Clorofórmio	35,00	65,00	53,50	34,30	65,70	53,72	-1,99	0,42

Ainda analisando a tabela 5.5, avaliou-se a predição para sistemas binários contendo, a saber: álcoois – hidrocarbonetos alifáticos, álcoois - hidrocarbonetos aromáticos e álcoois – hidrocarbonetos cíclicos. Os resultados preditos pelo programa foram excelentes para a temperatura do azeótropo e satisfatórios para a composição, com exceção para as misturas contendo o 1-propanol. Os maiores erros envolvendo misturas contendo álcoois ocorreram para os sistemas contendo acetatos ou cetonas, os quais estão em negrito na Tabela 5.5.

Além de comparar os resultados diretamente com valores experimentais, também foi realizada uma comparação com dados preditos apresentados em Perry *et al.* (1984). Na tabela 5.6 são apresentados alguns resultados experimentais para misturas binárias com ponto de azeotropia. São sistemas contendo água - hidrocarbonetos, água - anilina, água - n-butanol e acetonitrila - hidrocarbonetos alifáticos.

Na Tabela 5.7 são mostrados os valores preditos mostrados em Perry *et al.* (1984) e os obtidos pelo programa desenvolvido. Nota-se que os valores preditos pelas duas metodologias são similares, foram obtidos ótimos resultados para a temperatura e erros de até 10 % para a composição. O procedimento proposto neste trabalho apresentou melhores resultados para quase todos os binários, tanto para a temperatura quanto para a composição do azeótropo, obtendo excelentes predições para os sistemas água-anilina e água-butanol, diferentemente das mostradas em Perry *et al.* (1984). Os resultados só foram significativamente piores usando o procedimento proposto para o sistema acetonitrila-n-heptano.

Tabela 5.6. Dados experimentais para algumas misturas binárias

Componentes		Dados Experimentais (Perry <i>et al.</i> , 1984)	
1	2	x_1	Taz (°C)
Água	Benzeno	29,57	69,25
Água	m-xileno	76,67	92,00
Água	etil benzeno	74,37	92,00
Água	n-hexano	21,45	61,50
Água	n-heptano	45,17	79,20
Água	n-octano	68,45	89,60
Água	nitrometano	51,23	83,75
Água	anilina	95,60	98,60
Água	n-butanol	75,25	92,70
Acetonitrila	n-hexano	45,40	56,80
Acetonitrila	n-heptano	68,70	69,50
Acetonitrila	n-octano	84,70	76,70

Também foram comparados resultados para misturas ternárias. Na tabela 5.8 estes resultados podem ser observados. Nota-se que os valores preditos pelo programa apresentaram desvios pequenos em relação aos valores experimentais, mostrando que o procedimento é capaz e robusto o suficiente para garantir a predição de ponto de azeotropia para sistemas binários e ternários.

Observa-se também que as vezes quando foram empregados os parâmetro binários disponíveis no Banco de Dados do Aspen Plus, os resultados não foram satisfatórios (casos em **negrito** na Tabela 5.8). Estes casos foram simulados usando também parâmetros binários estimados através do método de contribuição de grupos UNIFAC. Com o uso dos

parâmetros binários estimados conseguiu-se aproximar os resultados da predição aos valores experimentais (sistemas n-butanol-benzeno-ciclohexano, clorofórmio-acetona-n-hexano e metil-etil-cetona-ciclohexano-isopropanol).

É certo que não se sabe quais dos resultados são os mais próximos do real, se os obtidos via parâmetros binários do banco de dados ou se via parâmetros estimados, mas com certeza o programa desenvolvido atingiu seu objetivo que é determinar a existência do azeótropo e suas condições de temperatura e composição.

Tabela 5.7. Comparação de valores preditos para misturas binárias com ponto de azeotropia

Componentes		PERRY <i>et al.</i> , 1984					Uniexpert				
1	2	Frações molares			Taz		Frações molares			Taz	
		preditas		x ₁	(°C)	(°C)	preditas		x ₁	(°C)	(°C)
Água	Benzeno	29,98	70,02	0,41	69,43	0,18	29,90	70,10	0,33	69,35	0,10
Água	m-xileno	76,20	23,80	-0,47	92,56	0,56	76,50	24,94	-0,17	92,68	0,68
Água	etil benzeno	74,30	25,70	-0,07	91,91	-0,09	75,07	24,94	0,70	92,17	0,17
Água	n-hexano	21,00	79,00	-0,45	61,42	-0,08	21,03	78,97	-0,42	61,45	-0,05
Água	n-heptano	45,60	54,40	0,43	79,09	-0,11	45,05	54,95	-0,12	79,30	0,10
Água	n-octano	67,80	32,20	-0,65	89,02	-0,58	68,06	31,94	-0,39	89,57	-0,03
Água	nitrometano	48,92	51,08	-2,31	80,90	-2,85	50,19	49,81	-1,04	82,39	-1,36
Água	Anilina	87,10	12,90	-8,50	95,54	-3,06	95,65	4,35	0,05	99,51	0,91
Água	n-butanol	66,75	33,25	-8,50	89,15	-3,55	75,43	24,57	0,18	92,67	-0,03
Acetonitrila	n-hexano	39,00	61,00	-6,40	53,94	-2,86	40,00	60,00	-5,40	56,11	-0,69
Acetonitrila	n-heptano	63,20	36,80	-5,50	67,62	-1,88	78,12	21,88	9,42	71,65	2,15
Acetonitrila	n-octano	80,80	19,20	-3,90	74,98	-1,72	82,50	17,50	-2,20	76,38	-0,32

Tabela 5.8. Resultados para alguns sistemas ternários

Componentes			Frações molares preditas (PERRY <i>et al.</i> , 1984)						Frações molares preditas (Uniexpert)						Taz °C
			x ₁	x ₁	x ₂	x ₂	x ₃	x ₃	x ₁	x ₁	x ₂	x ₂	x ₃	x ₃	
1	2	3	x ₁	x ₁	x ₂	x ₂	x ₃	x ₃	x ₁	x ₁	x ₂	x ₂	x ₃	x ₃	°C
Acetona	Clorofórmio	Metanol	33,3	1,7	24,5	0,5	42,4	-2,2	33,9	2,3	23,1	-0,9	42,9	-1,7	57,11
Acetona	Clorofórmio	Etanol	34	-1	48,5	2,5	17,5	-1,5	35,7	0,7	46,3	0,3	18,0	-1,0	62,71
Clorofórmio	Acetona	n-hexano	63,1	2,8	5,2	-2,5	31,7	-0,3	78,4	18,1	0,5	-7,2	21,1	-10,9	
UNIFAC									63,8	3,5	5,1	-2,6	31,1	-0,9	
Benzeno	Etanol	Ciclohexano	11	0	43,5	0,5	45,5	-0,5	10,8	-0,2	42,2	-0,8	46,9	0,9	
Acetato de metila	Clorofórmio	Metanol	15,5	-9,5	53,4	24,2	31,1	-14,7	25,0	0,0	30,7	1,5	44,2	-1,6	
UNIFAC									28,4	3,4	27,8	-1,4	43,8	-2,0	
Acetato de metila	Metanol	n-hexano	32	0,2	33,2	2,7	34,8	-2,9	43,8	12,0	25,8	-4,7	30,4	-7,3	
UNIFAC									44,1	12,3	24,9	-5,6	31,0	-6,7	
n-butanol	Benzeno	Ciclohexano	2	-2,4	49	-0,6	49	3	0,1	-4,3	54,2	4,6	45,7	-0,3	
UNIFAC									5,0	0,6	45,6	-4,0	49,5	3,5	
Ciclohexano	Etanol	Acetato de etila	50,1	-0,1	42,1	0,5	7,8	-0,4	53,4	3,2	41,8	0,2	4,8	-3,4	
Metil-etil-cetona	Ciclohexano	Isopropanol	20,6	3,3	44,1	-9,4	35,3	6,1	0,7	-16,6	61,1	7,6	38,2	9,0	
UNIFAC									16,8	-0,5	55,0	1,5	28,2	-1,0	

Taz: Temperatura do azeótropo (°C)

UNIFAC: A predição dos azeótropos foi feita se considerando o uso do método UNIFAC para predizer os parâmetros binários

x : Diferença entre o resultado experimental e o predito para as frações molares dos três componentes

Taz: Diferença entre o resultado experimental e o predito para a temperatura do azeótropo (°C)

5.8. CONCLUSÕES

Foram desenvolvidas rotinas genéricas para serem acopladas ao ambiente interativo desenvolvido neste trabalho de tese. Estas rotinas permitem a caracterização termodinâmica de misturas líquidas complexas. Pode-se prever a existência de azeótropos binários e ternários, homogêneos ou heterogêneos. Com as superfícies de equilíbrio geradas pode-se prever o comportamento de um determinado solvente na destilação extrativa ou azeotrópica, além de se avaliar a idealidade ou não idealidade da mistura.

A rotina para cálculo do *flash* trifásico foi utilizada para prever a existência de azeótropos na mistura. A metodologia empregada foi eficiente e confiável para o cálculo das condições dos azeótropos (temperatura e composição) binários e ternários. Os erros entre os valores preditos e experimentais para as temperatura dos azeótropos foram sempre menores que 2%, o mesmo não ocorreu para as composições, porém os valores preditos foram sempre próximos para a maioria dos binários e ternários testados (menor que 10 %). Os resultados também foram comparados com os valores preditos por outra metodologia. Os resultados obtidos pelo programa desenvolvido foram mais satisfatórios, isto é, apresentaram menores desvios em relação aos dados experimentais.

Como a informação importante que se deseja saber é se existe o azeótropo ou não. O procedimento proposto pode ser considerado robusto, visto que em todos os casos estudados os azeótropos foram encontrados. Não se deve esquecer que a confiabilidade dos parâmetros binários é condição primordial para a boa predição do equilíbrio de fases e no caso aqui discutido na predição dos azeótropos.

CAPÍTULO 6.

A INTERFACE “UNIEXPERT”

A interface UNIEXPERT é um programa de computador que tem como uma das funções fazer o gerenciamento de informações e decisões que o usuário deve fornecer; e ainda processar adequadamente as simulações a serem realizadas pelo simulador ASPEN PLUS. Neste capítulo, descrevem-se as diferentes telas presentes na interface desenvolvida, bem como as etapas que o usuário deve seguir durante a indicação dos processos de separação que podem ser empregados. A interface também é um sistema especialista que indica ao usuário do programa o sequenciamento recomendado para as colunas de destilação, no entanto o usuário pode modificá-lo sem qualquer dificuldade.

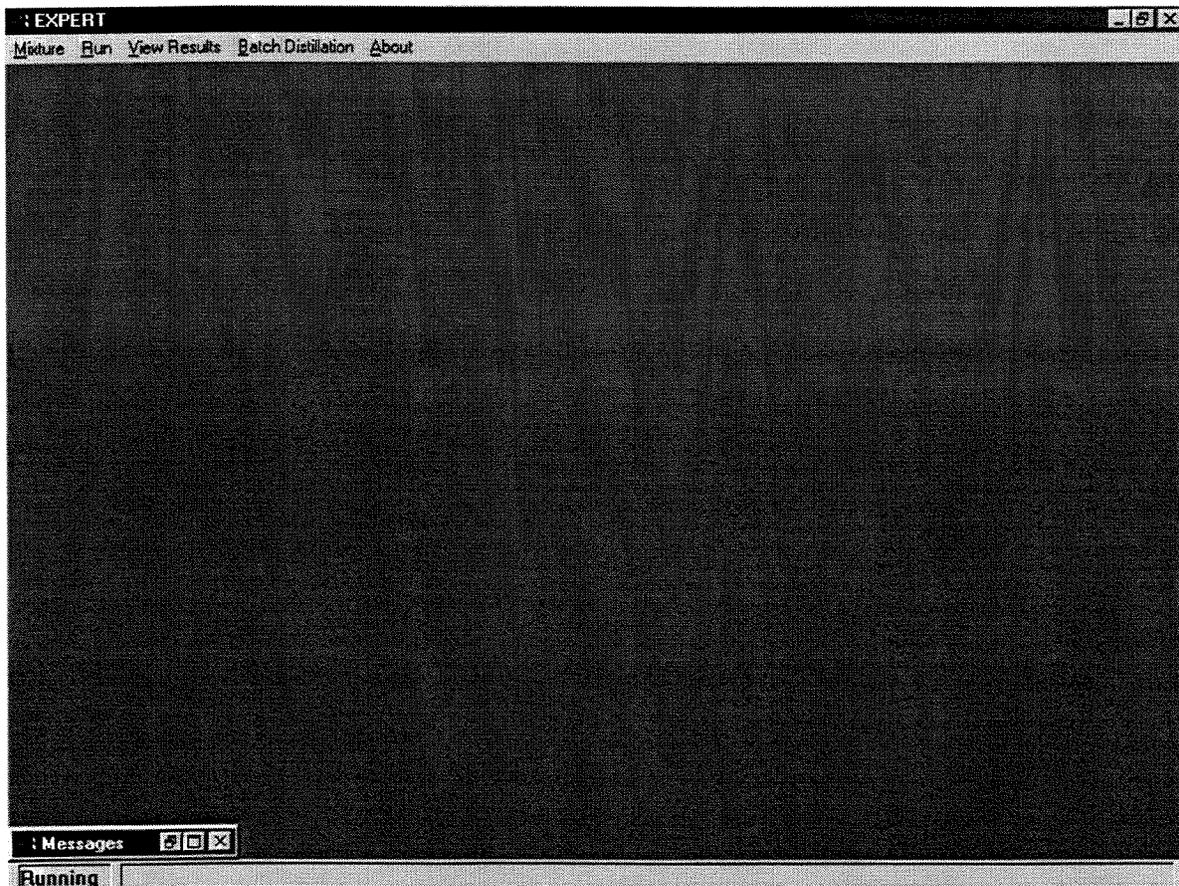


Figura 6.1. Tela principal e inicial da interface desenvolvida

Cada um dos menus do programa é discutido de forma a deixar bem claras as potencialidades do programa desenvolvido. O programa é capaz de se comunicar com qualquer versão do *software* Aspen Plus, porém seu rendimento será mais efetivo utilizando-se a versão 9.3 visto que todo este trabalho de pesquisa se desenvolveu empregando a referida versão.

Após a inicialização do programa, aparecerá a tela principal deste, a qual está ilustrada na Figura 6.1. Observa-se que ela é composta de 5 menus (*Mixture*; *Run*; *View Results*, *Batch Distillation* e *About*). O idioma utilizado nos menus e nas telas é o idioma inglês, porém tudo pode ser modificado facilmente para usar qualquer outro idioma. O principal motivo para que isto fosse adotado é que facilitaria a escrita de artigos onde o software fosse utilizado.

6.1. MENU *MIXTURE* (MISTURA)

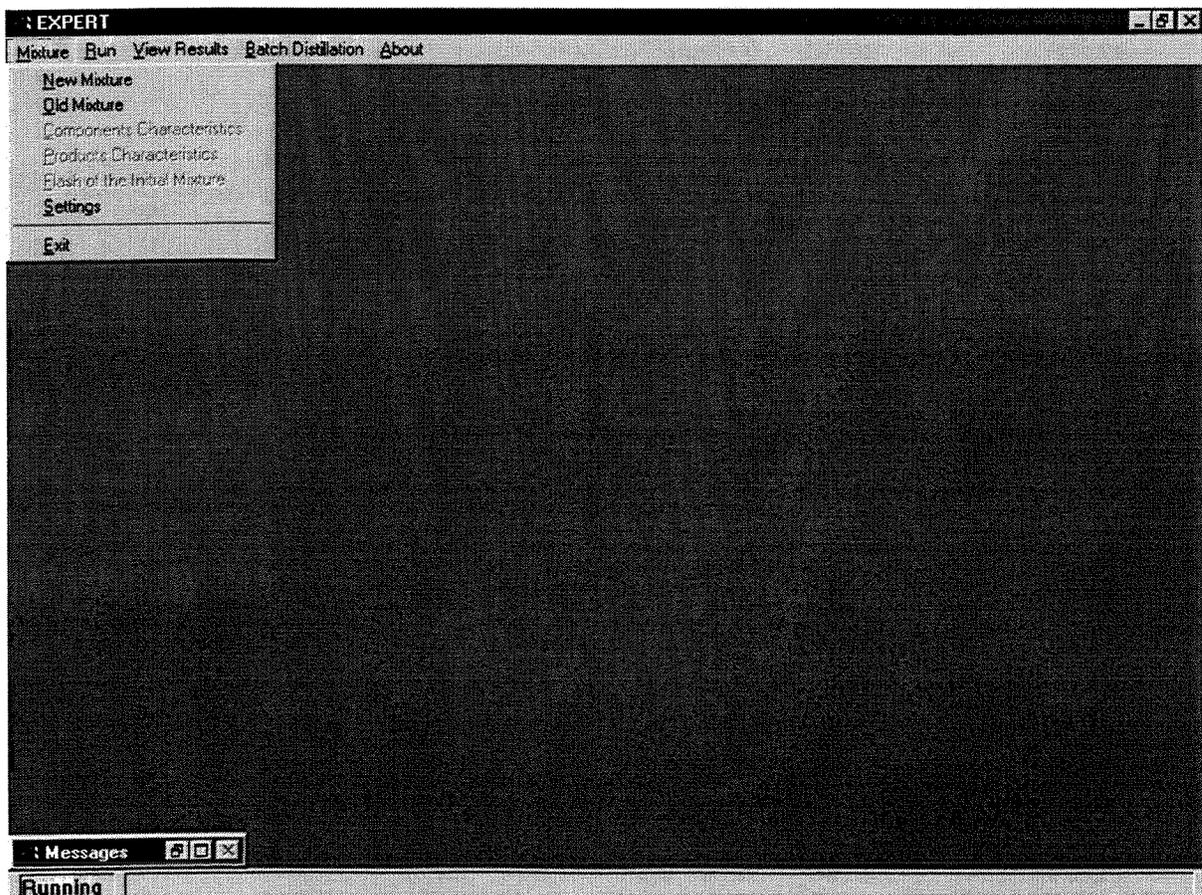


Figura 6.2. Abertura do Menu *Mixture*

As opções para o menu *Mixture* (Mistura) podem ser vistas na Figura 6.2. Este é o primeiro menu do programa, nenhum dos outros menus será liberado, enquanto os itens deste menu não forem preenchidos. As opções são *New Mixture* (Nova Mistura), *Old Mixture* (Mistura existente), *Component Characteristics* (Características dos componentes), *Products Characteristics* (Características dos Produtos), *Settings* (Configurações) e por fim *Exit* (a saída do programa).

Como o próprio nome da função no menu diz, em:

- Nova mistura, será introduzida uma nova mistura de trabalho;
- Mistura existente, o programa trabalhará com uma mistura já armazenada em arquivo;
- Características dos componentes, onde serão fornecidas informações sobre os componentes da mistura inicial;
- Características dos produtos, onde serão especificados os produtos desejados;
- Configurações, definem-se parâmetros de operação para o programa;
- Saída, executa-se o encerramento normal do programa.

6.1.1. Submenu: *New Mixture* (Nova Mistura)

Nesta janela (Figura 6.3) serão selecionados os componentes da mistura inicial, e devem ser informados:

- Título do projeto;
- Banco de dados de componentes puros do simulador Aspen Plus a ser utilizado;
- Marcar e selecionar os componentes. Estes são encontrados através da digitação da fórmula dos componentes e selecionados com o “mouse”. Devem ser, então, transferidos à área de componentes selecionados clicando na flecha para a direita. Estes podem ser excluídos da seleção, marcando-os

com o “mouse” e depois clicando na flecha para a esquerda retornando-os à área de componentes;

- Tipo de mistura, quanto à idealidade e quanto à presença ou não de eletrólitos;
- Solução inicial; se concentrada ou diluída;
- Modelo de atividade a ser utilizado, dentre as opções possíveis: Ideal, NRTL, UNIFAC, UNIQUAC.

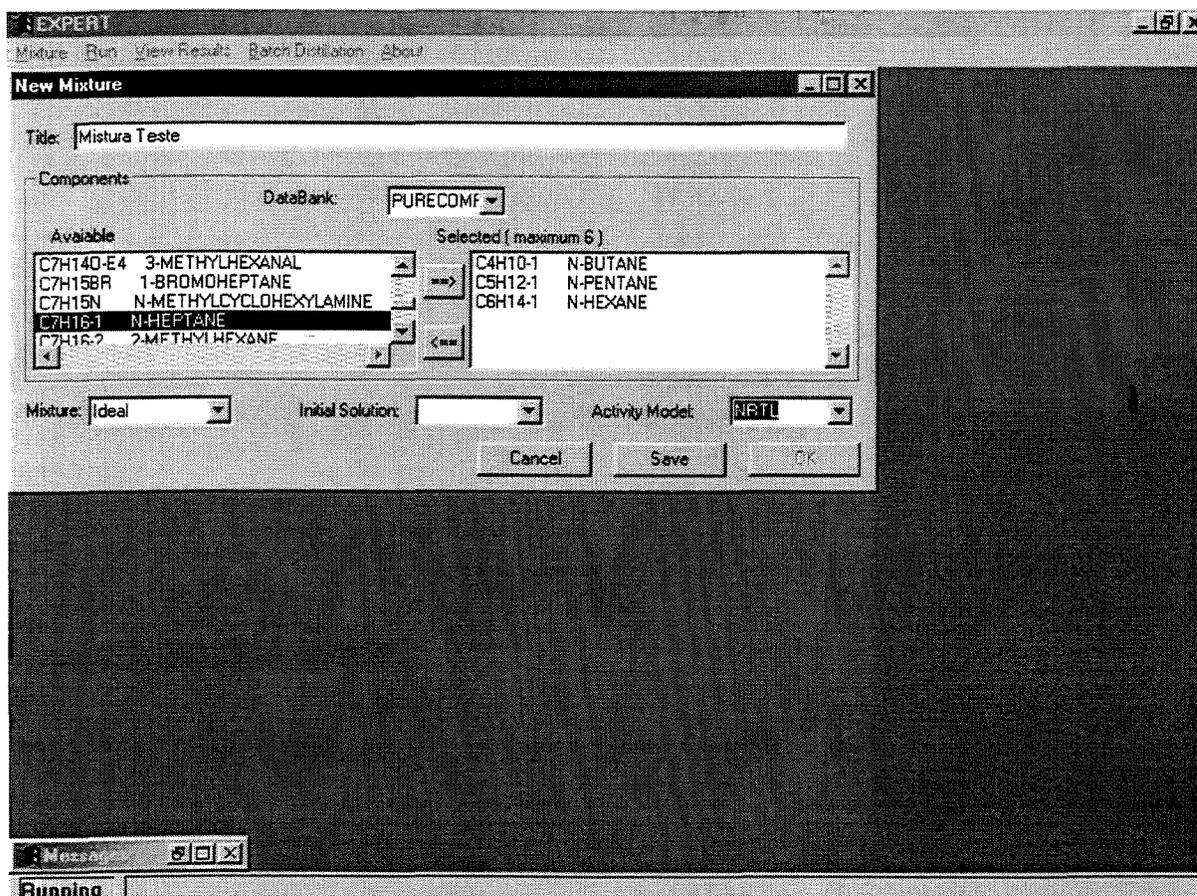


Figura 6.3. Submenu Nova Mistura (*New Mixture*)

Após o preenchimento de todas as informações, elas devem ser gravadas em um arquivo para posteriormente serem utilizadas. Para isto, clica-se sobre o botão *Save* (Gravar). Uma nova janela é aberta (vide Figura 6.4), onde se deve informar o nome do arquivo. A extensão do arquivo será “*.mis”.

Depois de gravar os dados iniciais, o programa volta à tela de seleção dos componentes. Clicando com o mouse no botão “OK”, a janela é fechada. Inicia-se, então, o

processo para retirar do banco de dados do software ASPEN PLUS, os ponto de ebulição dos componentes e os parâmetros binários do modelo termodinâmico (modelo de atividade) escolhido. Este procedimento é virtual, o usuário do programa precisa somente aguardar para que todas as rotinas se realizem.

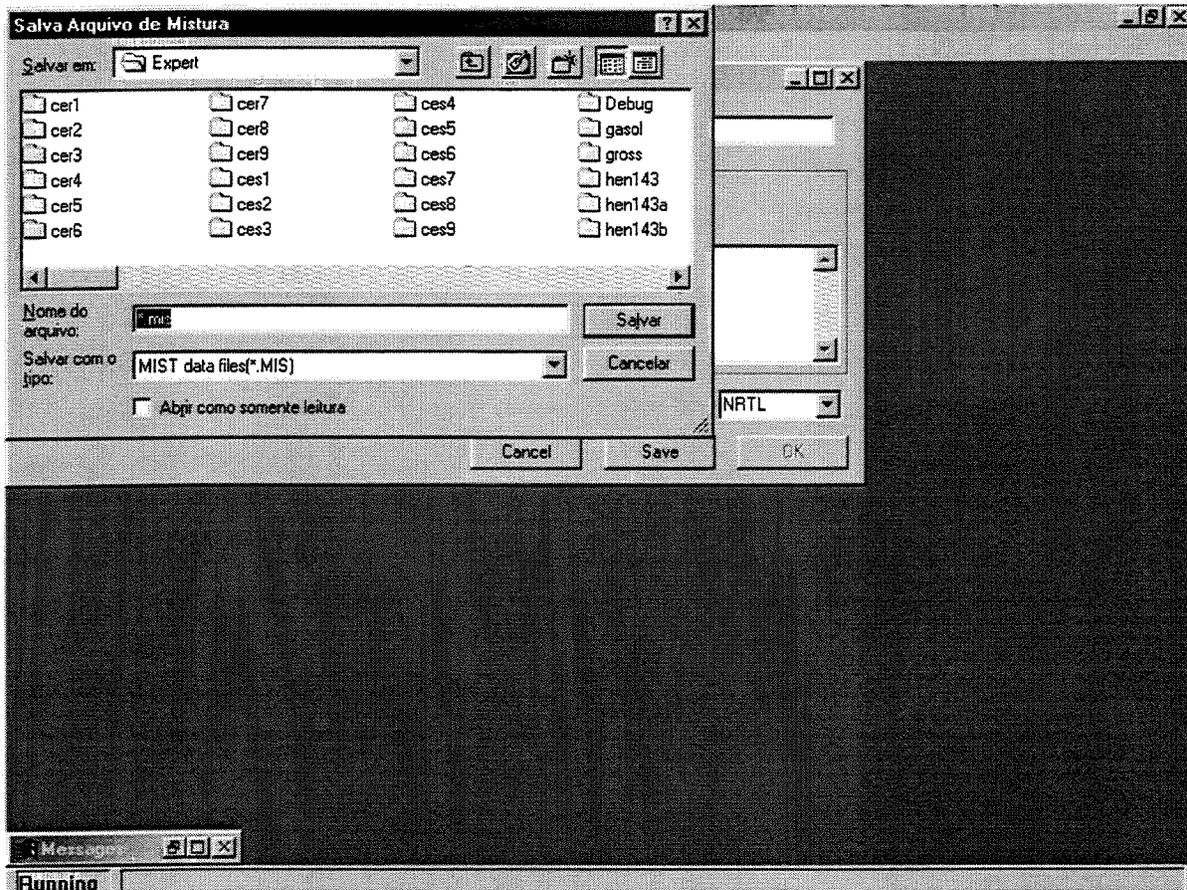


Figura 6.4. Janela para a escolha do nome do arquivo da nova mistura e também para escolher o arquivo de uma mistura existente.

Após a leitura do banco de dados, os componentes são colocados em ordem crescente de pontos de ebulição e uma nova janela é aberta (como ilustrado na Figura 6.5). Nesta janela são mostrados quais parâmetros binários estão disponíveis. Se não existirem no banco de dados do ASPEN, os parâmetros para algum dos binários presentes na mistura inicial, o programa reconhece automaticamente que estes devem ser estimados. O asterisco que aparece ao lado da palavra *Yes* informa que os parâmetros já foram estimados através do submenu Mistura existente.

Clicando no botão *Available parameters* (parâmetros disponíveis), será carregado através do navegador (*browser*) escolhido no submenu Configurações, um arquivo em

“HTML” com todos os parâmetros binários e faixa de temperatura dos dados experimentais. Os dois programas, UNIEXPERT e o navegador, funcionam separadamente, o que permite visualizar os parâmetros sem interromper os cálculos.

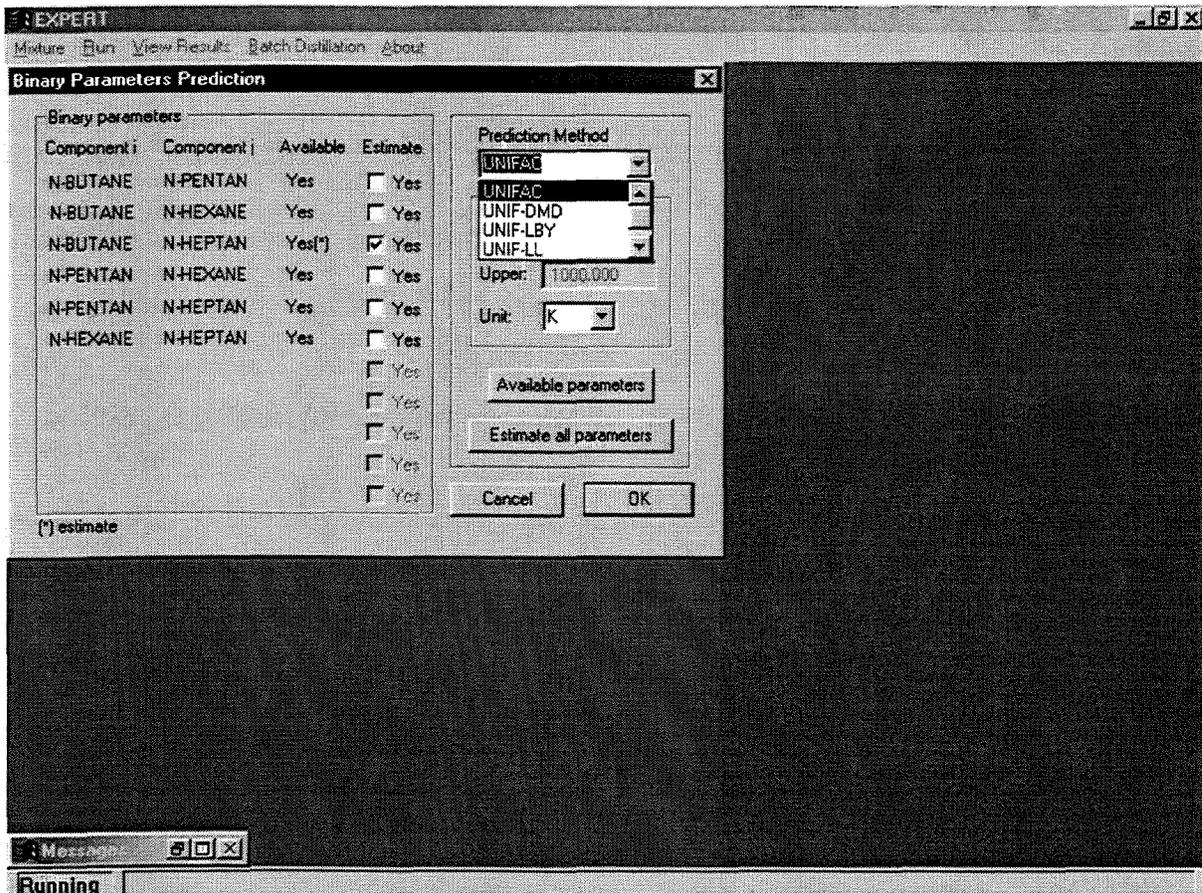


Figura 6.5. Tela para gerenciar a obtenção dos parâmetros binários do modelo termodinâmico selecionado

O usuário pode estimar os parâmetros para um binário presente no banco de dados, bastando para isto fazer a seleção ao lado do mesmo. Quando isto for necessário, deve-se selecionar o modelo a ser utilizado na predição. As possibilidades são: UNIFAC, UNIFAC-LL (Líquido-Líquido), UNIFAC-Dortmunt e UNIFAC-Lyngby, que são as opções disponíveis pelo Aspen Plus. Após feita a seleção, deve-se clicar em “OK”, o próprio programa se encarrega de chamar o Aspen e predizer os parâmetros necessários. Se o usuário desejar ver os resultados, basta ir ao menu *View Result* (Ver resultados) como será mostrado posteriormente.

6.1.2. Submenu *Old Mixture* (Mistura Existente)

Quando este submenu é selecionado, uma tela (como a ilustrada na Figura 6.3.) solicitando o nome do arquivo é aberta. Basta selecionar qual arquivo com a extensão “.mis” deseja-se abrir e clicar com o mouse no botão “Ok”. Novamente, a tela que mostra os parâmetros binários disponíveis é aberta (Figura 6.5) e seguem-se as etapas comentadas no item anterior.

6.1.3. Submenu *Components Characteristics* (Características dos Componentes)

Depois da predição dos parâmetros, quando necessária, o próximo passo é fornecer informações sobre a composição e as características dos componentes da mistura inicial. Para isto, deve-se selecionar o submenu *Components Characteristics*. A janela correspondente que se abre está ilustrada na Figura 6.6. Os componentes são colocados em ordem de ponto de ebulição e os que apresentam ponto de ebulição maior que a temperatura ambiente (20 °C) são ditos condensáveis. As especificações a serem feitas são:

- Para cada componente:
 - composição inicial (fração molar);
 - pureza desejada (em %). Esta pureza só é liberada para o usuário quando o item “components” foi selecionado no submenu “Settings”. Está será a pureza especificada para os produtos (componentes puros), quando se considera a separação completa;
 - se o componente é sensível a altas temperaturas;
 - se este é poluente;
 - se o componente é corrosivo. Neste caso, são necessárias as especificações para material de construção dos equipamentos. O usuário escolhe entre: aço carbono, aço inox 304, aço inox 316, Níquel, Monel, Hastelloy e Alumínio. A seleção padrão é aço carbono (*Carbon steel*).
- Para a mistura inicial:
 - Pressão em bar

- Temperatura em Kelvin
- Vazão em kg-mol/h

Na janela ainda existe um botão que desfaz as modificações realizadas nas especificações (tecla *Undo*). Clicando em “OK”, a janela se fecha e o programa verifica se existe alguma especificação errada, como por exemplo, somatório das frações molares maior ou menor que um. Neste caso, o programa corrige e pede para o usuário confirmar a correção.

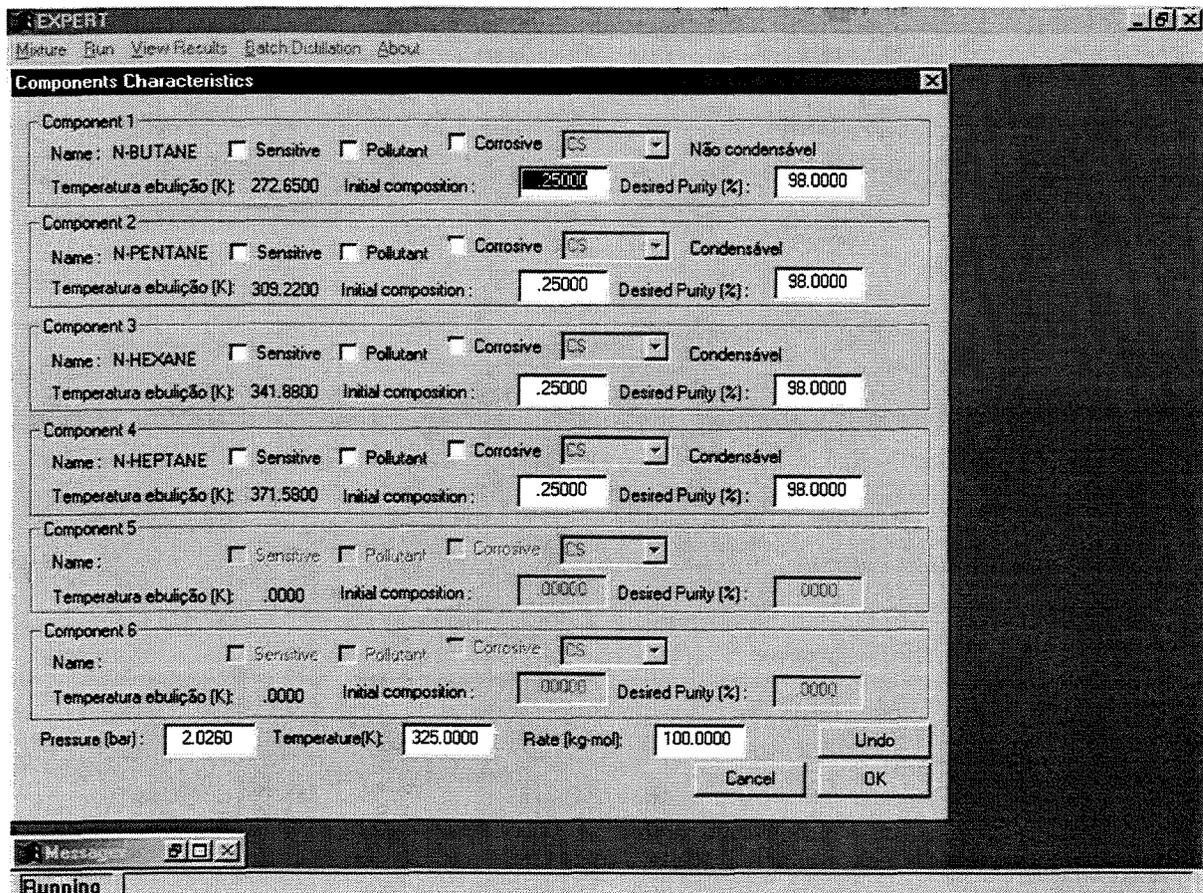


Figura 6.6. Janela onde são introduzidas as informações sobre os componentes.

Se um ou mais componentes tem um baixo ponto de ebulição (pressão de 1 atm), o programa recomendará a realização de algumas simulações considerando a vaporização parcial da mistura inicial (ver submenu *Flash of the initial mixture*).

6.1.4. Submenu *Products Characteristics* (Características dos produtos)

Definidas as condições da mistura inicial, se faz necessário a especificação dos produtos desejados, isto é feito usando o submenu *Products Characteristics*, como ilustrado na Figura 6.7. Pode-se ter no mínimo dois produtos e no máximo 6 produtos. O usuário adiciona ou exclui os produtos como desejar, bastando usar os botões Adicionar (*add*) e Excluir (*delete*), respectivamente. Existem três opções para informar as especificações para os produtos, a saber:

- recuperação dos componentes
- vazão molar dos componentes
- composição dos componentes

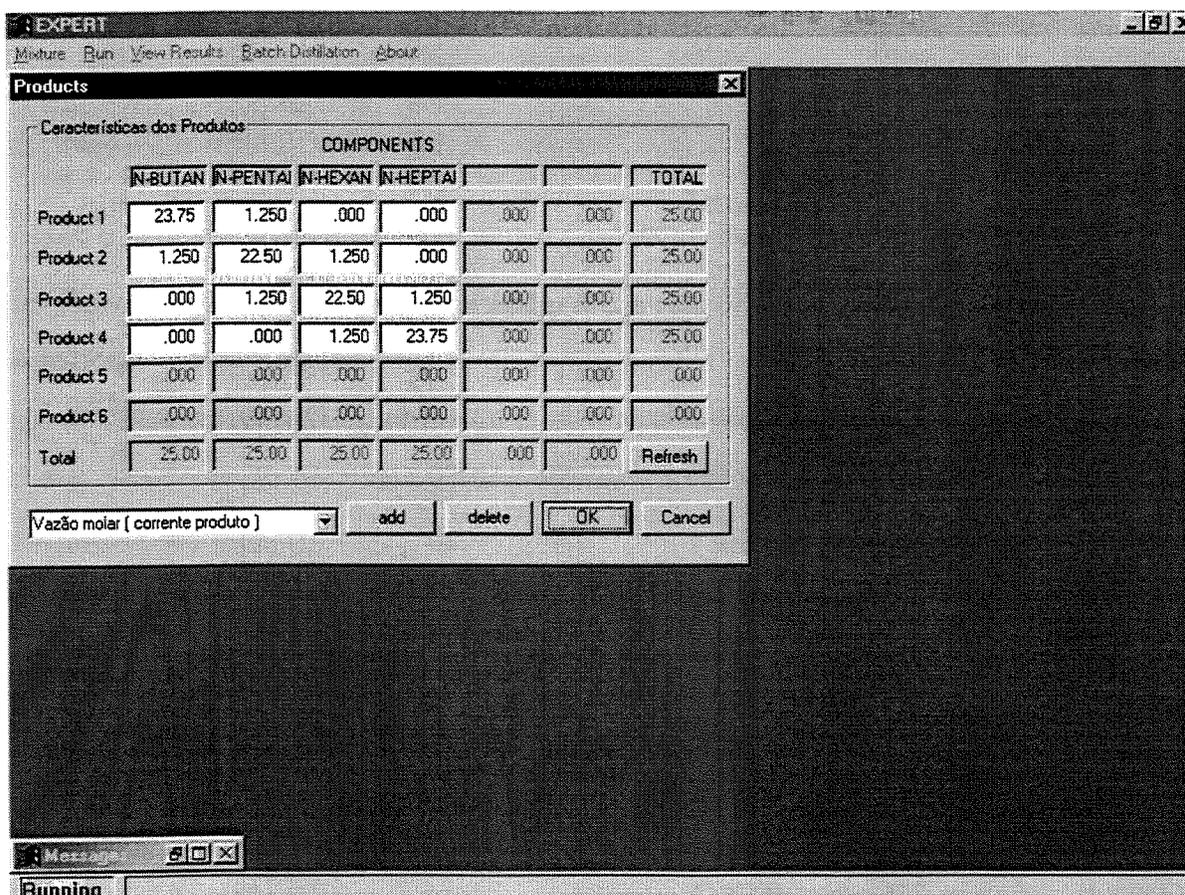


Figura 6.7. Janela para informar as especificações dos produtos desejados

Quando se especifica a recuperação dos componentes, a soma das recuperações do componente em todos os produtos deve ser igual a um, se o usuário não especificar desta

- *Nmin/Nstage*. Especificação da relação entre o número de estágios especificado e o número mínimo de estágios. Pode-se admitir qualquer valor maior que 0 (zero) e menor que 1 (um).
- *Parameter 'a'*. Valor do parâmetro 'a' na expressão do coeficiente de facilidade da separação. Este pode variar de 0,5 a 2,0.
- *Feasibility*. Faixa em percentagem permitida para o produto fora de especificação durante o teste para verificar se uma separação é possível.
- *Costs*. Os custos por quilo de vapor de baixa pressão e média pressão, de água de resfriamento e de água de refrigeração.
- "HTML" *Browser*. Escolha do navegador a ser empregado para a visualização dos arquivos de dados e resultados.

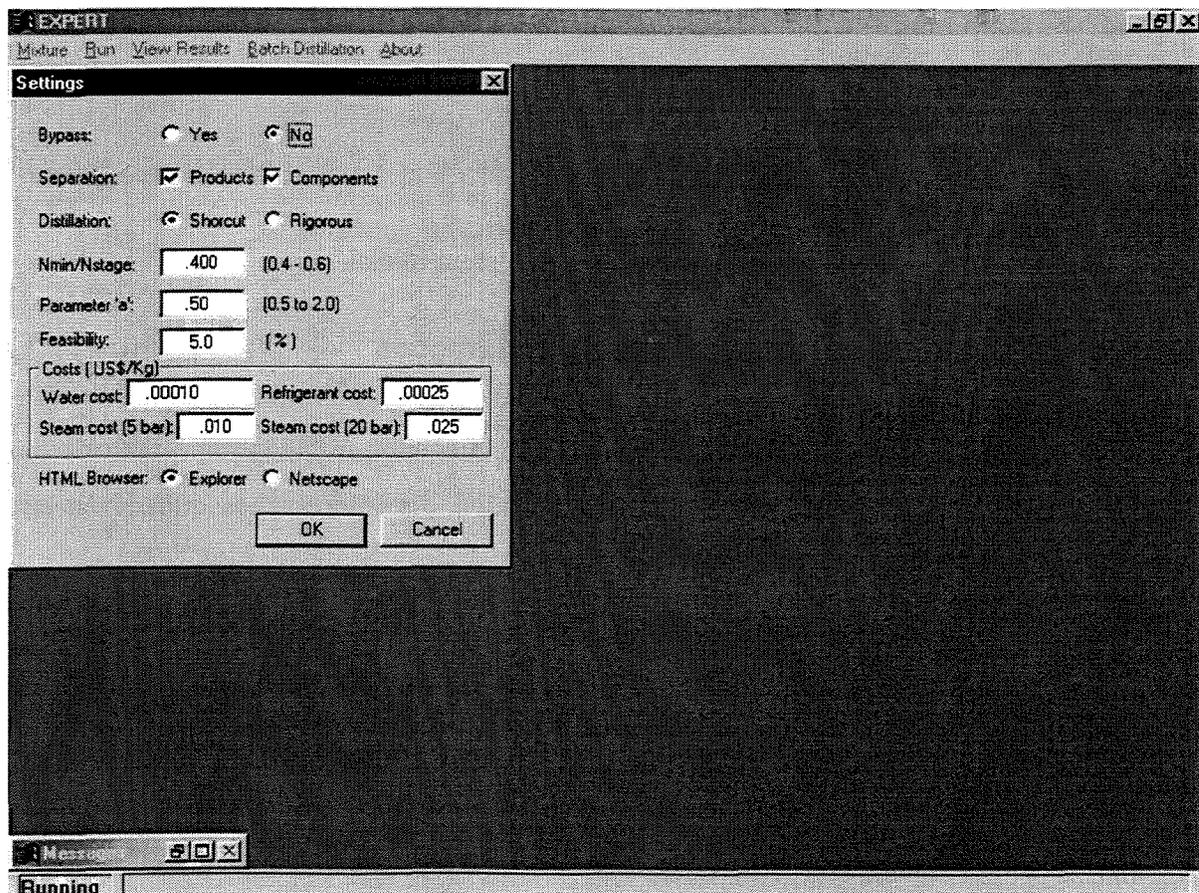


Figura 6.9. Janela para configurações gerais do programa

Agora o programa já tem as informações necessárias para dar continuidade do estudo da separação da mistura inicial.

6.2. MENU *RUN* (EXECUTAR)

Na Figura 6.10, podem ser observadas as opções para o menu *Run*. Neste menu são executadas rotinas que estão diretamente ligadas ao estudo da separação da mistura inicial, como será mostrado nos itens a seguir. Deve-se notar que somente as quatro (4) primeiras opções estão disponíveis no início do processamento. Conforme as etapas vão sendo cumpridas, o programa libera uma outra etapa.

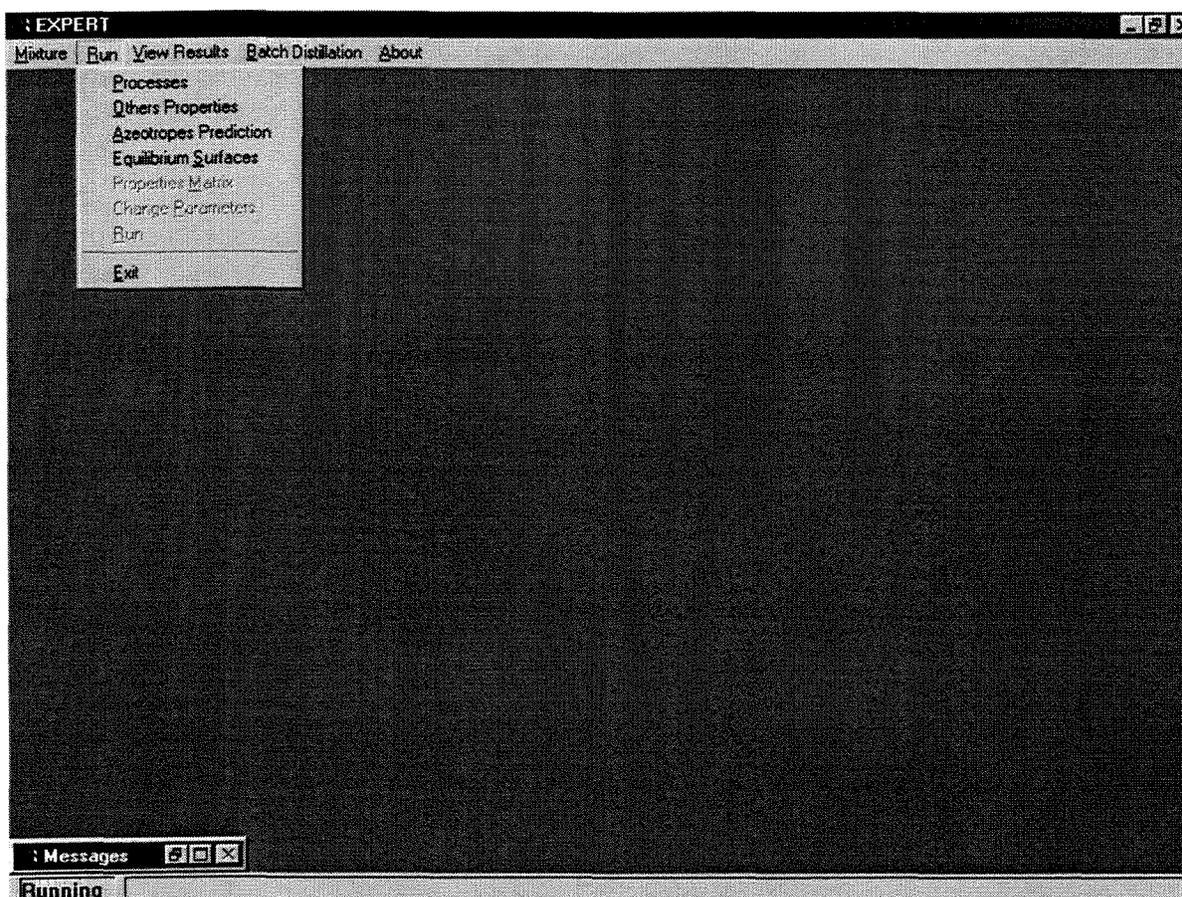


Figura 6.10. Opções disponíveis no Menu *Run*. Submenu *Other properties* (Outras propriedades)

6.2.1. Submenu *Processes* (Processos)

Nesta janela (Figura 6.11), o usuário deve escolher quais os processos que devem ser considerados durante a montagem da matriz de propriedades de componentes puros.

Conforme o processo escolhido, as propriedades relacionadas a este processo físico-químico são automaticamente selecionadas. Os processos que podem ser analisados são observados na Figura 6.11. A seleção é realizada colocando-se o cursor sobre a operação unitária e clicando o botão esquerdo do mouse e depois sobre o botão → para completar a escolha. Podem ser selecionados até oito (8) processos de separação. Após a escolha dos processos, o item *Property Matrix* fica liberado; desta forma os três próximos ítems não precisam ser executados se o usuário assim o desejar.

Além das propriedades selecionadas automaticamente pelo programa, o usuário pode selecionar para visualizar no relatório outras propriedades (conforme Figura 6.12) ou as constantes da equação que estima uma determinada propriedade do componente puro. Desta forma, as propriedades disponíveis no banco de dados do simulador Aspen Plus serão transportadas para a matriz de componentes puros.

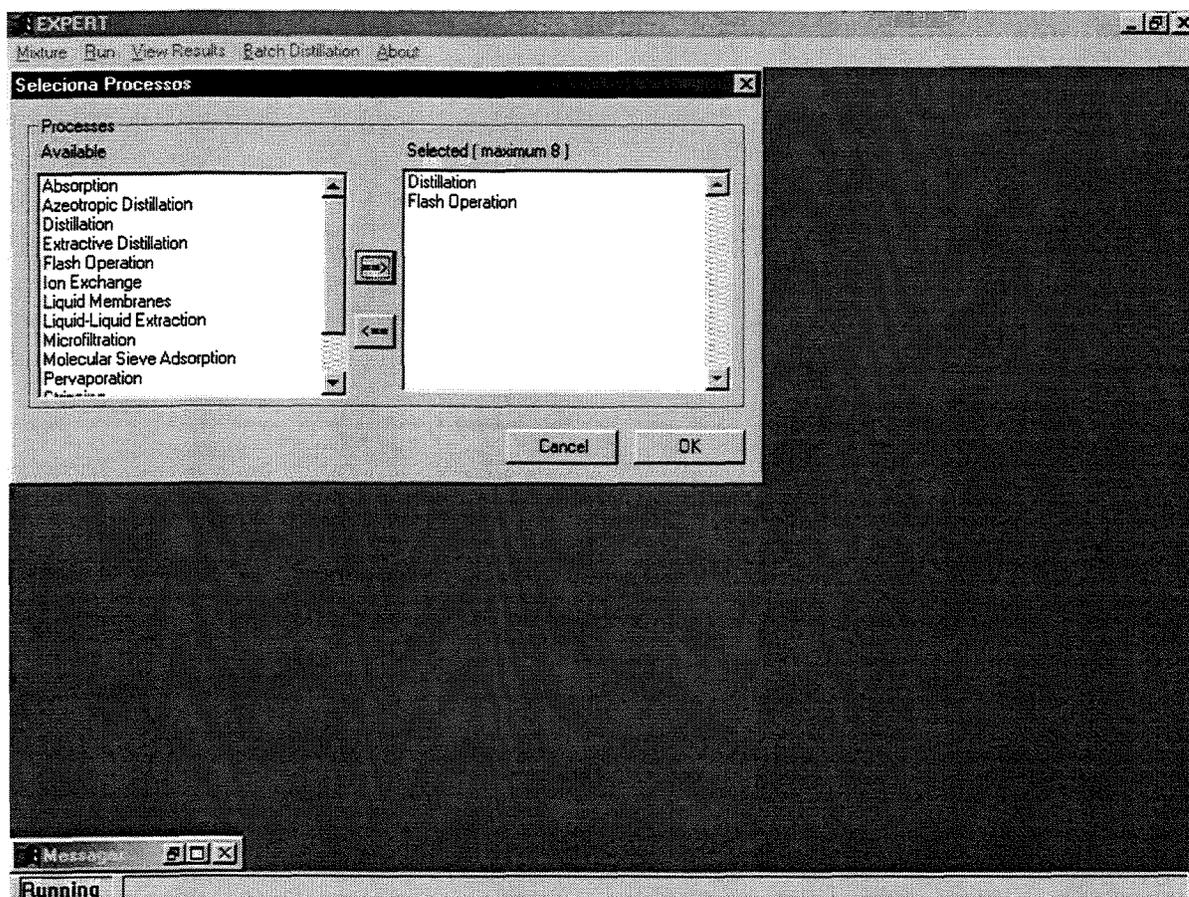


Figura 6.11. Seleção dos processos a serem considerados na matriz de propriedades de componentes puros.

6.2.2. Submenu *Azeotropes Prediction* – Predição de azeótropos binários e ternários.

No estudo da separação de misturas líquidas é muito importante saber se alguns dos binários e/ou ternários presentes na mistura formam ou não azeótropos. A rotina desenvolvida prediz a existência ou não de azeótropos. Se estes existirem, o programa avalia se estes são homogêneos ou heterogêneos (Líquido-Líquido-Vapor).

O objetivo desta tarefa no programa é verificar o efeito da pressão no ponto de azeotropia. Como se observa na Figura 6.13, o usuário pode especificar três níveis de pressão que ele deseja avaliar. Os valores padrão são 0,5; 1.013 e 5 bar. Todos os binários e todos os ternários são avaliados para os três níveis de pressão. Os resultados são escritos em um arquivo “HTML” que pode ser visualizado por qualquer navegador de internet ou qualquer outro programa que leia arquivos com esta extensão.

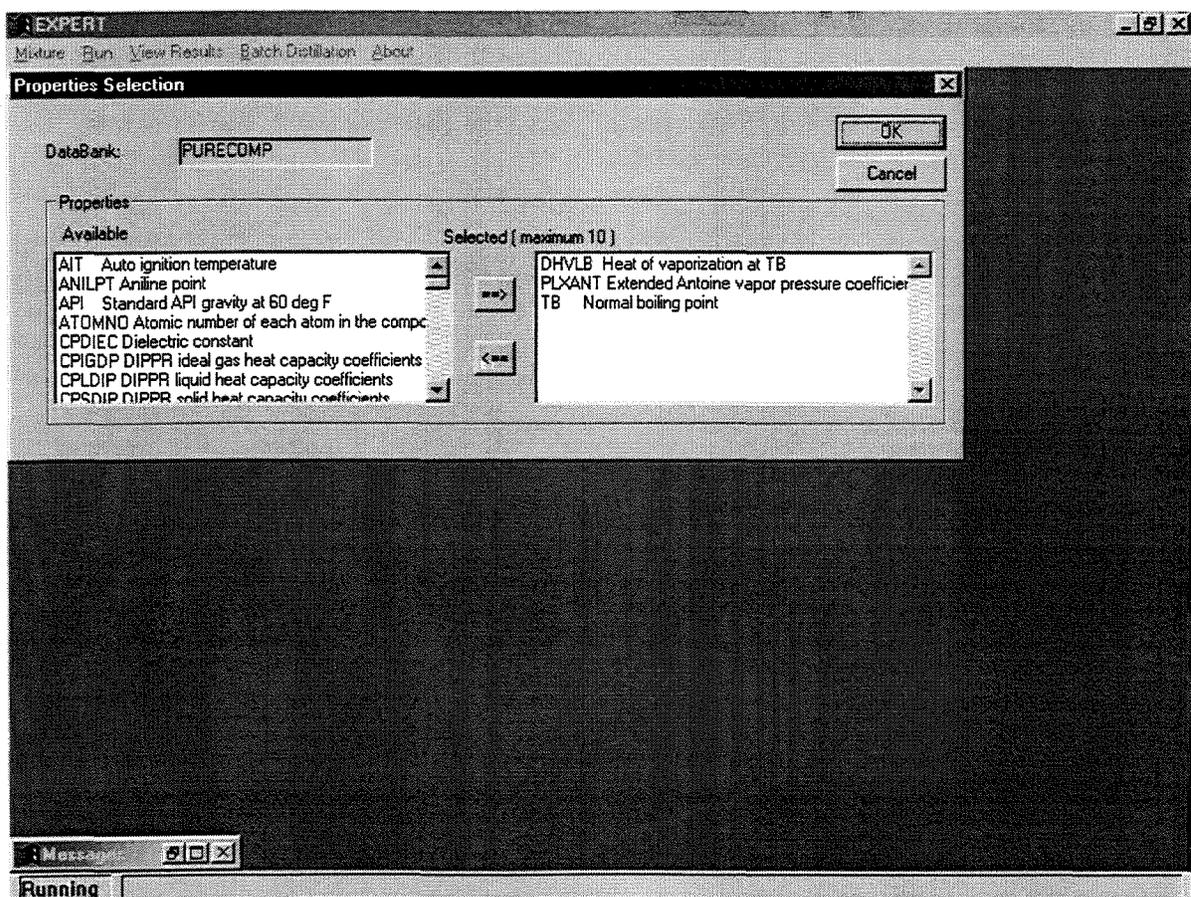


Figura 6.12. Seleção de propriedades de componentes puros.

6.2.3. Submenu *Equilibrium Surfaces* – Superfícies de Equilíbrio

O conceito das Superfícies de Equilíbrio foi proposto por Maciel em 1989 e é de extrema utilidade para a seleção de solventes para destilação extrativa, destilação azeotrópica e extração líquido-líquido, além de essencial para a caracterização de sistemas ternários, os mais comumente trabalhados nas colunas de separação. Na janela mostrada na Figura 6.14, pode-se selecionar os três componentes que serão avaliados. Estes componentes são escolhidos entre os componentes da mistura inicial, portanto, se for necessário avaliar um certo solvente, ele deve ser introduzido na etapa inicial quando os componentes são informados.

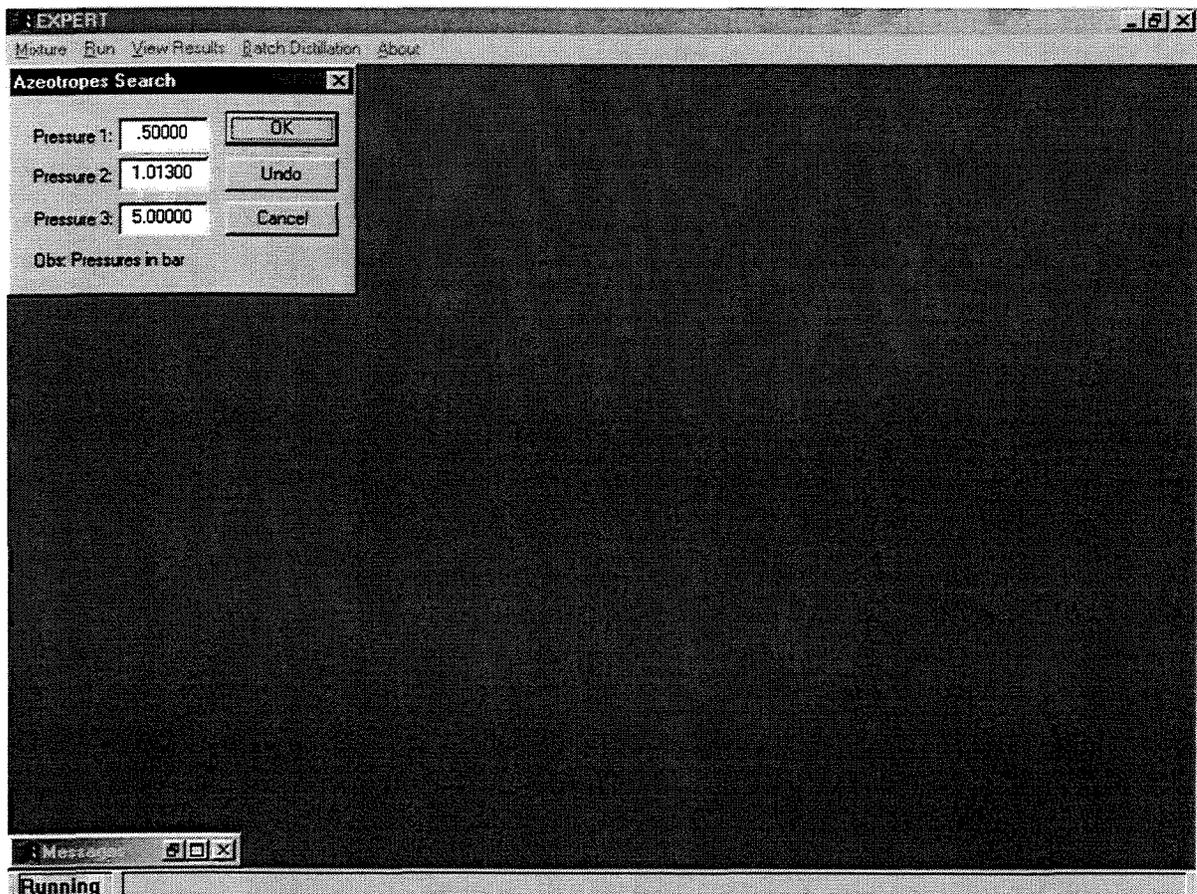


Figura 6.13 – Janela para especificação das pressões onde se deve verificar a existência de azeótropos.

Como se observa na Figura 6.14, deve-se especificar a pressão (em bar), com isto pode se fazer uma análise da influência desta no comportamento das misturas utilizando o conceito de superfícies de equilíbrio.

As superfícies geradas são mostradas através do *software* “Grapher”. Se o usuário quiser guardá-las, é necessário que ele utilize o *software* gráfico (“Grapher”) e salve os gráficos e os dados (planilha de dados) com outros nomes; de outra forma, os dados serão perdidos quando outras superfícies vierem a ser geradas.

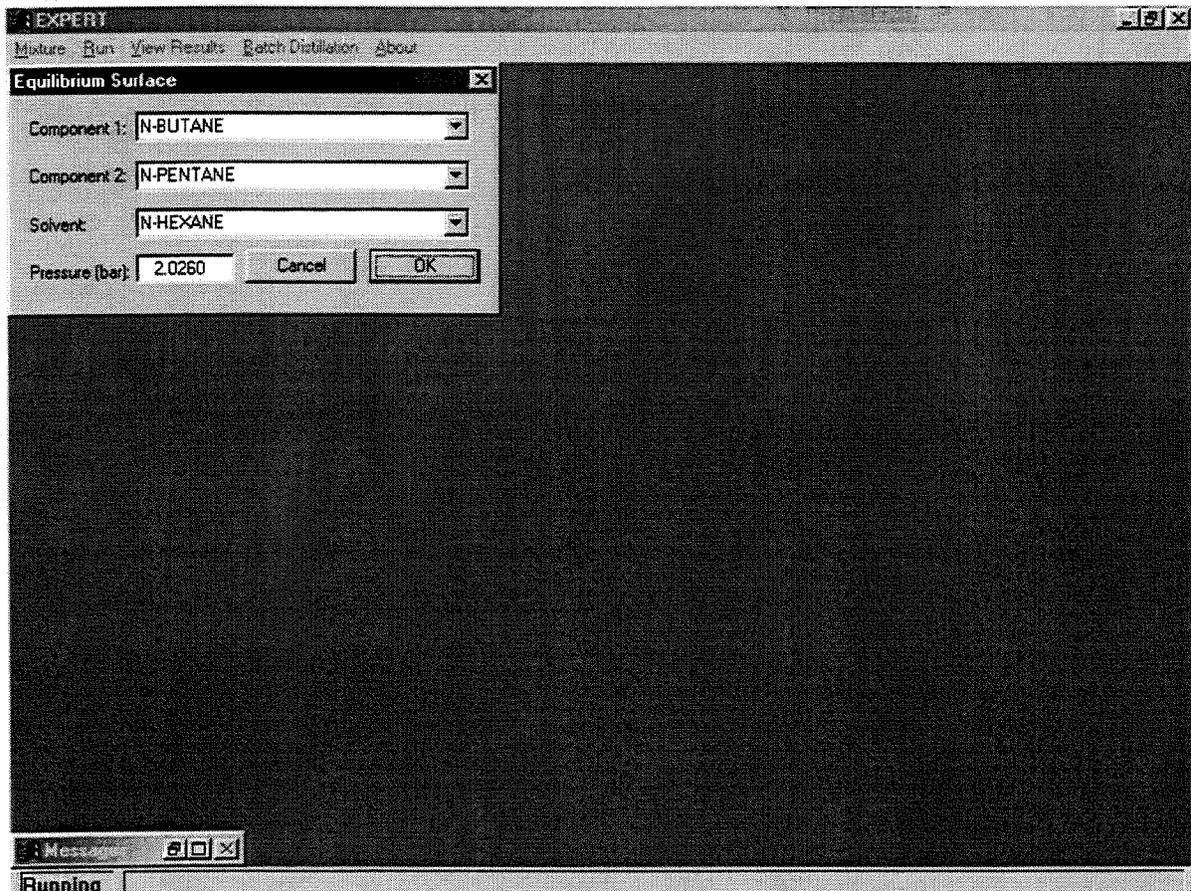


Figura 6.14. Janela para escolher os componentes e a pressão para a geração de superfícies de equilíbrio.

6.2.4. Submenu *Property Matrix* – Matriz das propriedades

Neste item do menu *Run*, nenhuma informação adicional é solicitada. O programa irá retirar as propriedades de componente puro dos bancos de dados do Aspen Plus. Para cada binário e para cada ternário, é gerado um arquivo de entrada para o Aspen Plus, desta forma avalia-se o comportamento da variável volatilidade relativa numa faixa ampla de

temperatura e composições, conforme explicado no capítulo 4 deste trabalho de tese. Após a execução de todas as corridas, o programa emite um relatório em arquivo com extensão “.html” que pode ser visualizado através do menu *View Results*, como será mostrado mais a frente. Neste relatório, estão colocadas todas as relações entre os valores de cada componente para as propriedades escolhidas e no final uma tabela com os valores máximos, mínimos e médios da volatilidade relativa.

6.2.5. Submenu *Run*- Executar o sequenciamento de colunas de destilação

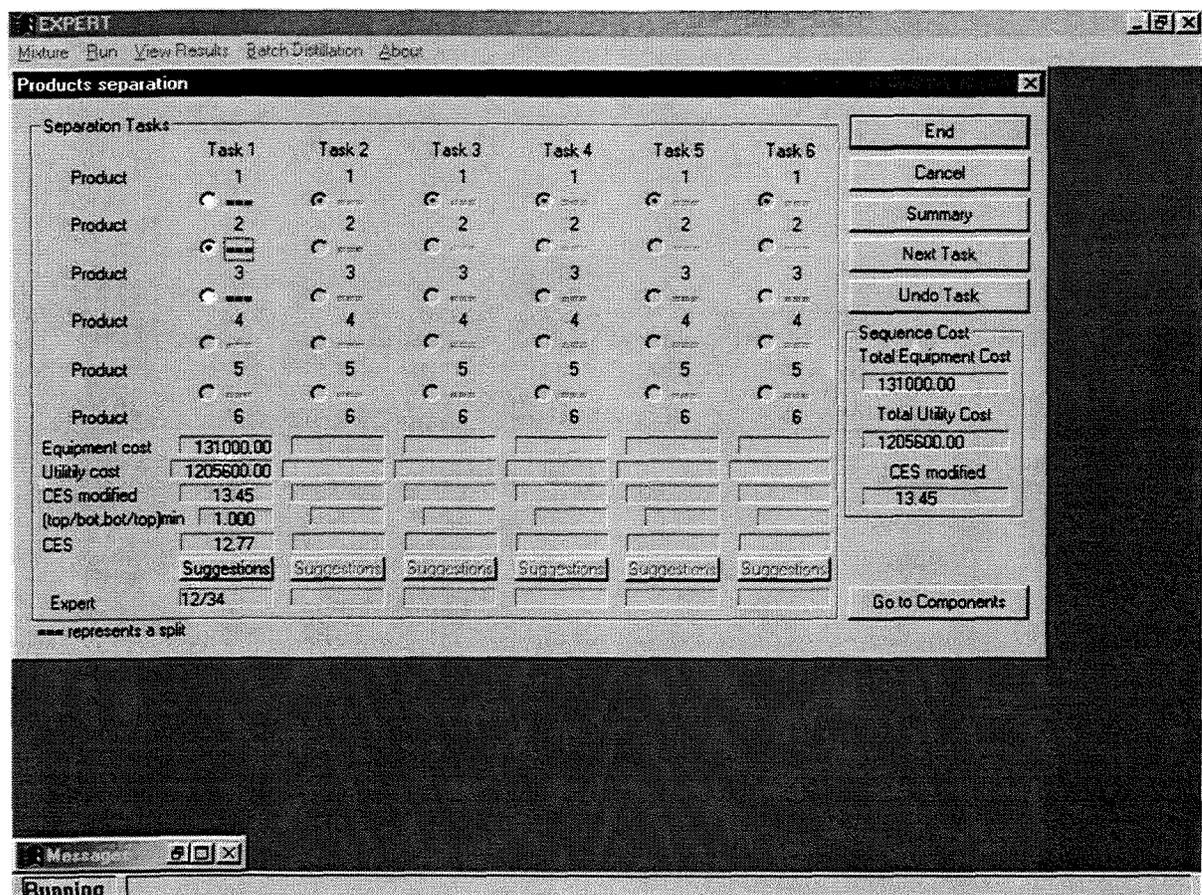


Figura 6.15. Sequenciamento de colunas de destilação; primeira etapa de separação em produtos.

Na Figura 6.15, mostra-se a janela com informações sobre as diferentes tarefas de separação. Pode-se dizer que esta janela é a interface com o usuário durante a síntese propriamente dita do sequenciamento das colunas de destilação. O programa começa estudando a separação da mistura inicial nos produtos especificados conforme

especificação nas configurações (submenu *settings*). O número de colunas de destilação necessário para a realização da separação desejada é igual ao número de produtos menos 1 (um) e este será o número de tarefas de separação. Nota-se na Figura 6.15, que somente uma coluna está liberada para mudanças. Nesta coluna (*TASK 1*), observa-se que a separação 12/34 foi a sugerida pelo programa baseando-se no valor do **CESmodificado**. A barra ,“/”, significa que o ponto de corte corresponde à separação da mistura inicial em dois produtos intermediários, um composto pelo produtos 1 e 2 e outros pelos produtos 3 e 4. As informações disponíveis na janela a respeito desta separação são:

- ponto de corte dos produtos;
- custo do equipamento;
- custo de utilidades (vapor de água, água de resfriamento e/ou água de refrigeração);
- **CESmodificado**;
- Razão entre as vazões de topo e fundo ou vazões de fundo e topo (valor mínimo desta relação);
- CES proposto por Quantrille e Liu, (1991);
- Recomendação da separação pelo programa.

O usuário pode alterar a opção sugerida pelo programa no momento que ele quiser, para isto basta selecionar, com auxílio do mouse, a separação que julgar a mais viável. Ele pode basear sua tomada de decisão nas informações disponíveis na janela. Quando o usuário modifica a separação, todos os valores das informações acima citadas são modificados, isto é, são mostrados os valores correspondentes à seleção feita pelo usuário.

Quando o usuário define qual separação deve ser considerada, deve clicar com auxílio do mouse o botão *Next Task* (Próxima Tarefa). Com isso, o programa analisa a separação proposta e mostra para o usuário o resultado da etapa de separação. Vale a pena ressaltar que conforme a escolha feita, uma ou duas etapas de separação ficam amarradas. Por exemplo, na Figura 6.15, a separação escolhida foi a 12 / 34 (*Task 1*), portanto, as duas tarefas seguintes serão 1/2 (*Task 2*) e 3/4 (*Task 3*), tendo o usuário que clicar sobre o botão *Next Task* duas vezes. Se a opção tivesse sido 1 / 234, então só uma etapa foi definida a próxima precisará ser determinada, isto é, o programa mostra os resultados para as

separações 2/34 e 23/4, faz a indicação pelo **CESmodificado** e aguarda o usuário clicar sobre o botão *Next Task*.

No caso do usuário desejar retornar às etapas anteriores, não é necessário sair do programa e refazer todas os procedimentos já relatados, basta apertar o botão *Undo Task*. Cada vez que este botão é apertado, retorna-se à etapa de separação anterior. No caso onde duas tarefas são da mesma etapa de separação, o retorno se dá para a etapa anterior. Exemplificando, na Figura 6.16 está colocada a seqüência final da separação da mistura em quatro produtos, a saber, 12 / 34 , 1/2 e 3/4 (*Task 1, 2 e 3, respectivamente*). Se o botão *Undo Task* for apertado, o programa retorna à posição da etapa 12 / 34, isto é, retorna duas tarefas de separação. Se a seqüência final fosse 1 / 234, 2 / 34 e 3/4, apertando-se o botão *Undo Task*, volta-se somente uma tarefa, no caso *Task 2* (separação 2 / 34 ou 23 / 4).

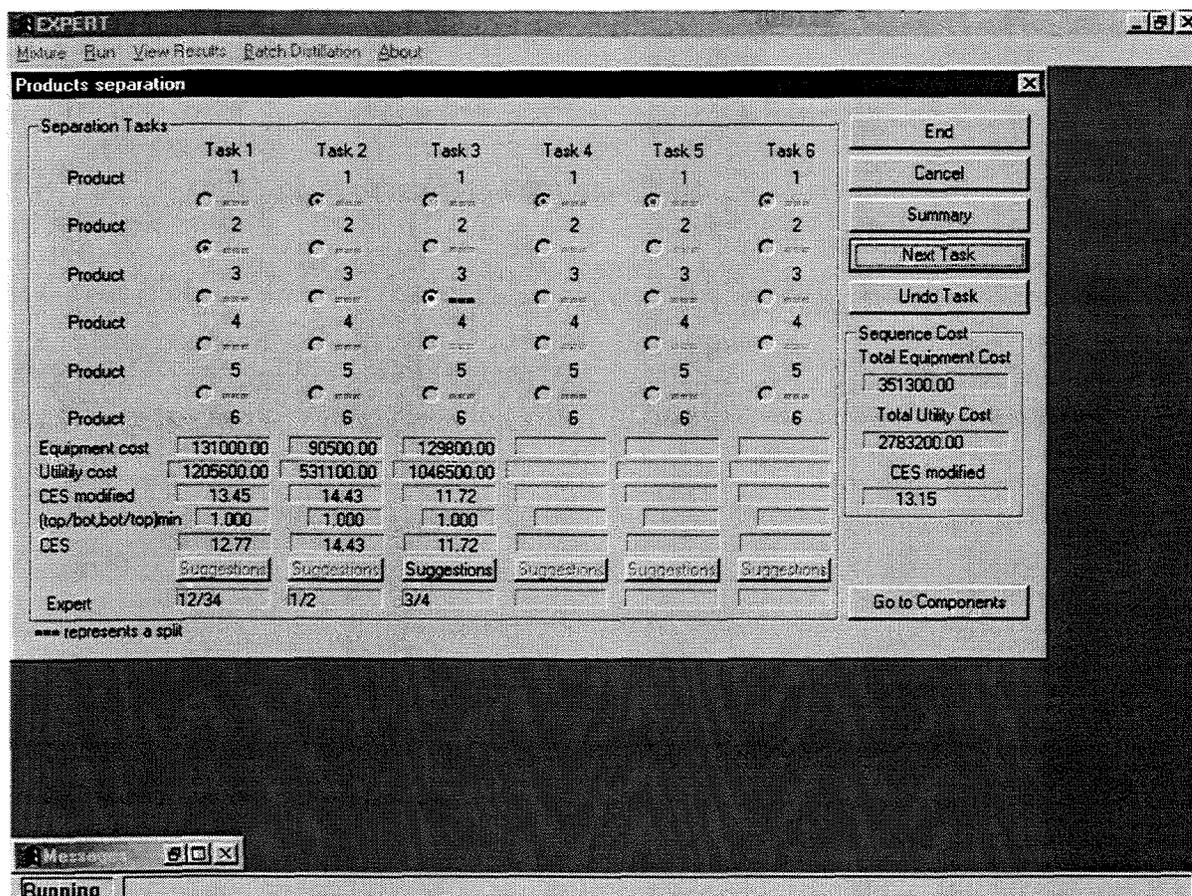


Figura 6.16 - Seqüência final selecionada de colunas de destilação para a separação em produtos.

A cada nova etapa no canto direito da janela (como se observa na Figura 15 ou na Figura 16), os valores totais dos custos fixos dos equipamentos e das utilidades são atualizados. A soma dos valores do **CESmodificado** também é atualizada.

Todos os resultados das simulações realizadas pelo software Aspen Plus através do programa podem ser visualizadas usando o botão *Summary*. Quando se aperta este botão um arquivo de dados com extensão “.html” é aberto usando o navegador de internet especificado no submenu *Settings*. Neste arquivo estão todas as informações sobre a separação estudada, a saber:

- Matriz com as relações entre propriedades de componentes puros;
- Tabela com as volatilidades relativas máxima, mínima e média para cada binário;
- Volatilidade considerando a presença de três componentes da mistura inicial;
- Recomendações para os processos de separação que podem ser empregados na separação de cada binário;
- *Link* para o arquivo com os resultados da predição de azeótropos binários e ternários;
- Resultados sumarizados para todas as simulações realizadas durante o sequenciamento das colunas de destilação;
- *Link* para o arquivo com resultados completos das simulações realizadas.

No apêndice A, são mostrados todos os arquivos gerados pelo programa para um mistura com quatro componentes.

Depois de estabelecida a seqüência para a separação da mistura inicial nos produtos especificados, clica-se com auxílio do mouse sobre o botão *End* para fechar a janela. Em seguida, o programa começa a executar a separação da mistura em componentes, caso esta especificação tenha sido feita no submenu *Settings*. Os procedimentos são os mesmos que foram mostrados para a separação em produtos. Esta opção só deve ser utilizada para quando as especificações para os produtos sejam muito diferentes da obtenção de componentes puros. Neste caso, os componentes são chamados

de A, B, C, D, E e F. Nas Figuras 6.17 e 6.18 podem ser observados os resultados para a seqüência de colunas de destilação para a separação em componentes puros.

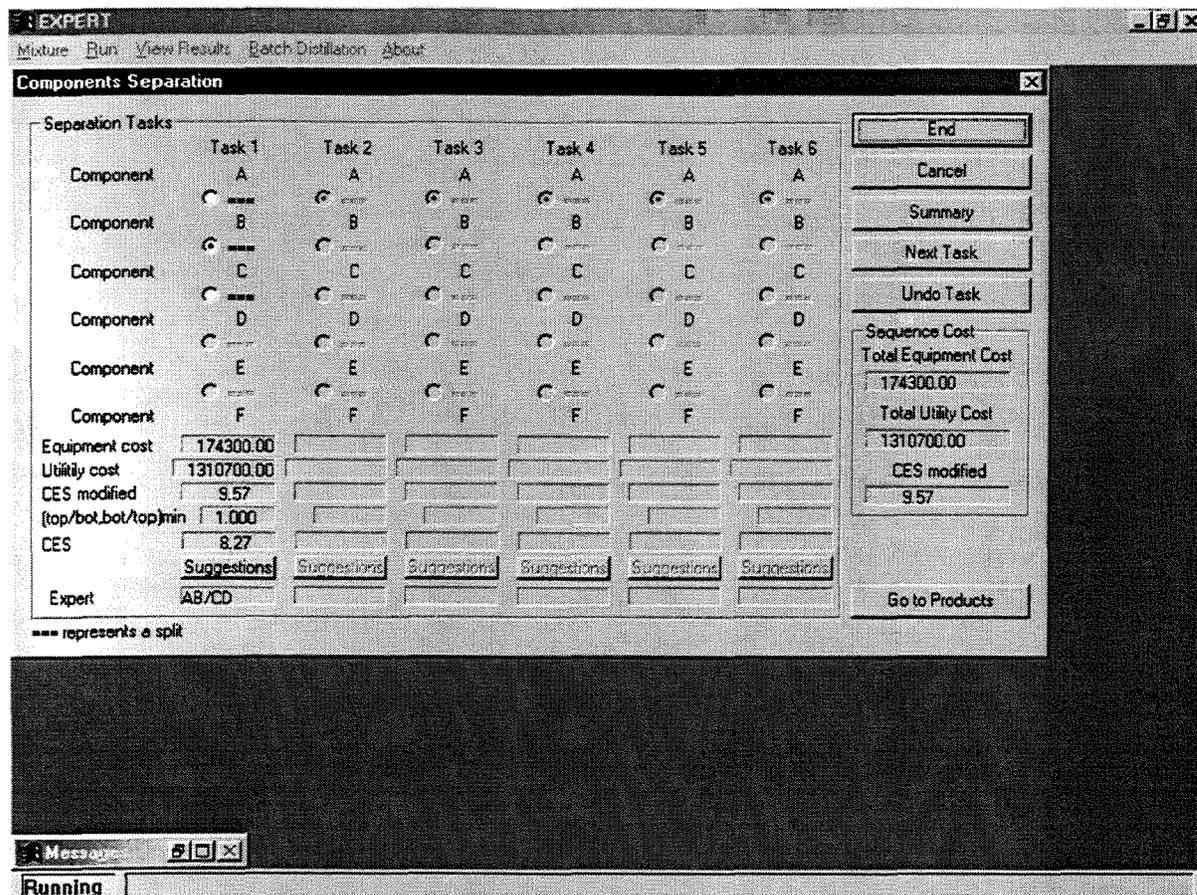


Figura 6.17 - Sequenciamento de colunas de destilação, primeira etapa da separação em componentes puros.

No apêndice A são apresentados os resultados para a separação de uma mistura com 4 componentes em componentes puros.

6.3. MENU *VIEW RESULTS* (VISUALIZAR RESULTADOS)

No caso do usuário desejar revisar dados ou resultados referentes às etapas anteriores da execução do programa, existe o menu *View Results*. Como ilustrado na Figura 6.19, a interface UNIEXPERT abrirá uma janela com o navegador de internet padrão contendo as informações relativas aos dados iniciais (opção *Initial Data*), dos resultados do *flash* da mistura inicial (opção *Flash of the Initial Mixture*), da existência de azeótropos (opção *Azeotropes*) ou ainda com o relatório completo da separação selecionada (opção

Separation Report). É possível também visualizar a qualquer momento as superfícies de equilíbrio (opção *Equilibrium Surface*), sendo neste caso, chamado o programa de visualização gráfica (*GRAPHER*).

No apêndice A, os arquivos que são visualizados pelo navegador de internet são mostrados e também são apresentados os arquivos visualizados via o *software* *GRAPHER*.

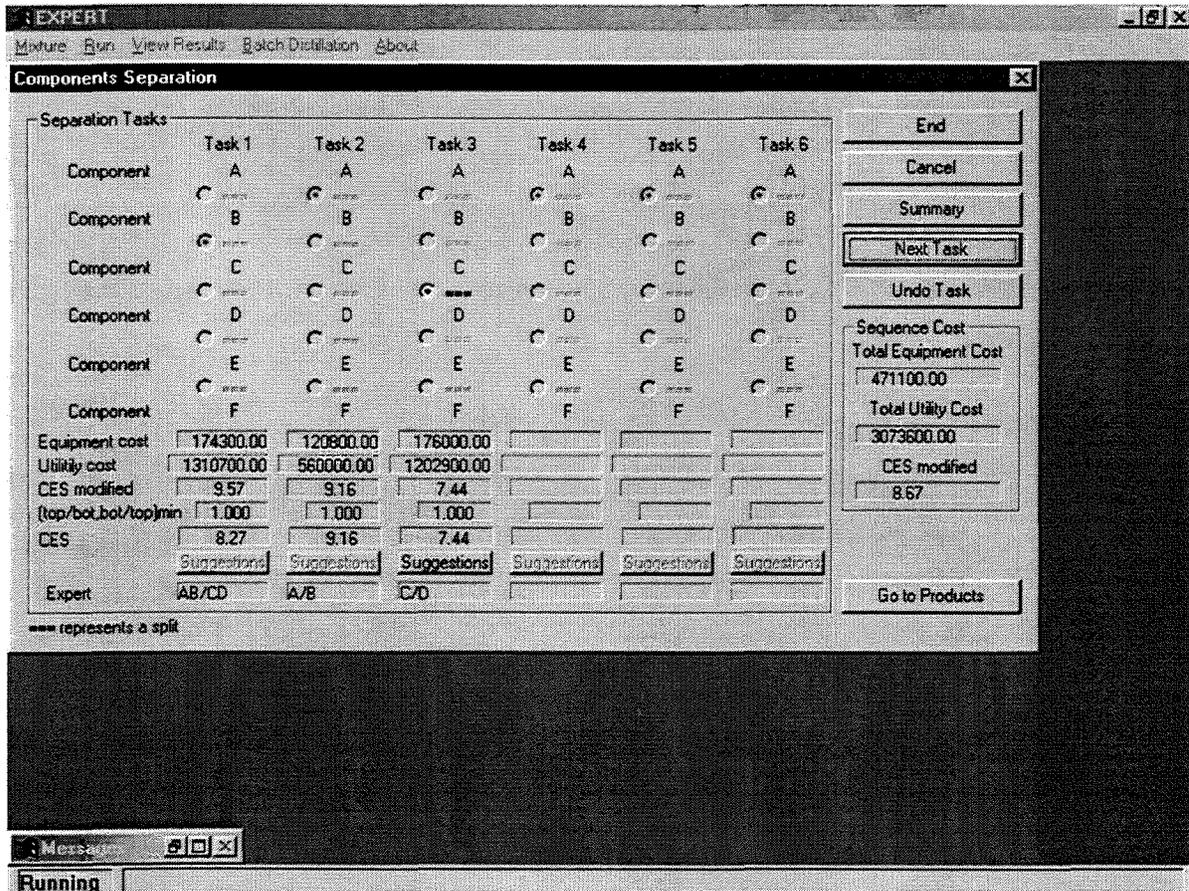


Figura 6.18 - seqüência final selecionada de colunas de destilação para a separação em componentes puros.

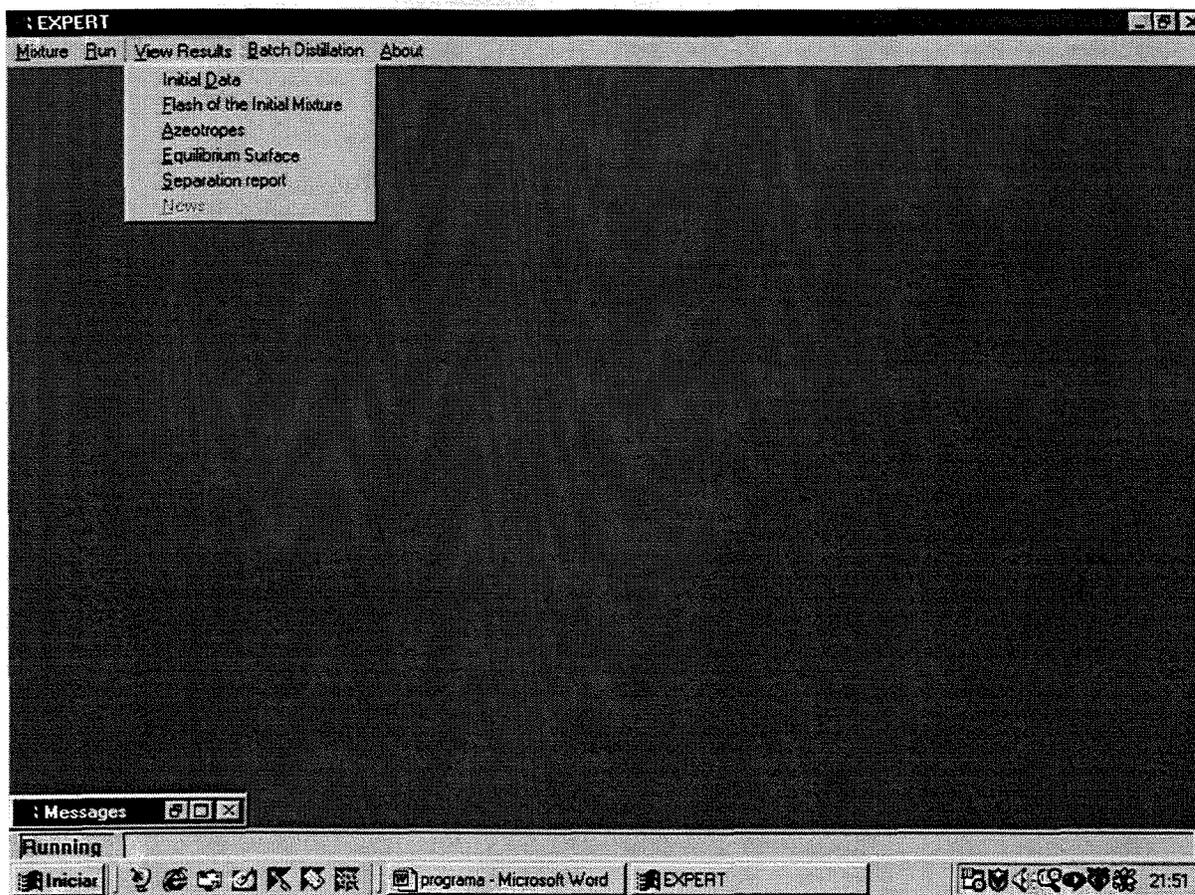


Figura 6.19. Opções disponíveis no Menu *View Results*.

6.4. CONCLUSÕES

Neste capítulo foi apresentado o *software* desenvolvido como base para o sistema especialista para a síntese de processos de separação. Nota-se pela estrutura aqui mostrada que muitas das decisões são compartilhadas com o usuário. Este pode modificar vários dos parâmetros trabalhados pelo programa.

Pode-se citar alguns dos parâmetros que podem ser trabalhados pelo usuário, a saber:

- O parâmetro N_{min}/N - que se recomenda que esteja entre 0,4 e 0,6, mas o usuário pode alterá-lo para trabalhar com outros valores se assim o desejar;
- O parâmetro ajustável “a”, que pondera a influência das cargas térmicas nos refeedores no parâmetro **CESmodificado**;

- O parâmetro *Feasibility* que indica os limites para a viabilidade do uso de uma coluna de destilação utilizando determinados componentes como componente chave leve e chave pesado.

Outras condições podem ser trabalhadas pelo usuário com extrema facilidade, a saber: vazões, temperatura e pressão da alimentação (condições iniciais da mistura) e especificações de produtos.

Como pode ser observado o programa desenvolvido é bastante versátil e pode ser continuamente adaptado. Outra característica importante mostrada pelo *software* é a facilidade de visualização das informações e dos resultados através de um navegador de internet, porém acredita-se que a melhor característica e contribuição do mesmo, é a continua interatividade com o usuário. O usuário tem papel importante nos resultados a serem obtidos durante a síntese do processo de separação.

CAPÍTULO 7.

AVALIAÇÃO DO PARÂMETRO CES MODIFICADO APLICADO AOS CASOS ESTUDOS

7.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão discutidos alguns exemplos utilizando o sistema especialista mostrando como este recomenda uma seqüência de colunas para uma determinada separação. Paralelamente, é feita também uma avaliação do desempenho do uso dos parâmetros **CES** e **CESmodificado** para auxílio na decisão durante a síntese da separação usando colunas de destilação. São mostrados três casos estudos englobando situações diferenciadas para que com isto se tenha uma análise mais generalizada do desempenho do software desenvolvido.

7.2. CASO ESTUDO A – SEPARAÇÃO DO 1-BUTENO

A primeira separação a ser analisada é a purificação do 1-buteno por destilação convencional e por destilação extrativa da mistura (Hendry e Hughes, 1972), mostrada na Tabela 7.1.

Tabela 7.1 Condições da mistura para a purificação do 1-buteno

Componente	% molar
Propano (A)	1,47
1-Buteno (B)	14,75
n-Butano (C)	50,29
trans-2-Buteno (D)	15,62
Cis-2-Buteno (E)	11,96
n-Pentano (F)	5,90
Temperatura = 65,6 °C	
Pressão = 1 Mpa	
Nmin/N = 0,4	

Considerando-se somente a separação usando colunas de destilação, nota-se na Tabela 7.2, onde as volatilidades dos binários presentes são mostradas, que três componentes (n-butano, trans-2-buteno e cis-2-buteno) têm comportamentos bastante similares e que as volatilidades relativas entre eles são muito próximas de um. Desta maneira a separação destes três componentes não é recomendada usando a destilação convencional; convém salientar que a volatilidade relativa foi analisada em toda a faixa de composição, diferentemente do que normalmente se pratica nos textos publicados, mesmo nas situações simples, únicas, e não de busca como a que é representada aqui.

Tabela 7.2. Volatilidades relativas máximas, mínimas e médias dos binários presentes

Componente 1	Componente 2	Volatilidade Relativa Valor máximo	Volatilidade Relativa Valor mínimo	Volatilidade Relativa Valor médio
PROPANO	1-BUTENO	2,984	2,871	2,946
PROPANO	N-BUTANO	3,882	3,096	3,420
PROPANO	TRANS-2-BUTENO	3,797	3,291	3,553
PROPANO	CIS-2-BUTENO	4,163	3,460	3,800
PROPANO	N-PENTANO	13,971	6,722	9,125
1-BUTENO	N-BUTANO	1,216	1,140	1,185
1-BUTENO	TRANS-2-BUTENO	1,213	1,188	1,203
1-BUTENO	CIS-2-BUTENO	1,285	1,281	1,284
1-BUTENO	N-PENTANO	3,154	2,986	3,091
N-BUTANO	TRANS-2-BUTENO	1,088	0,966	1,014
N-BUTANO	CIS-2-BUTENO	1,196	1,015	1,085
N-BUTANO	N-PENTANO	2,976	2,494	2,645
TRANS-2-BUTENO	CIS-2-BUTENO	1,078	1,056	1,069
TRANS-2-BUTENO	N-PENTANO	2,597	2,558	2,584
CIS-2-BUTENO	N-PENTANO	2,448	2,345	2,402

O estudo da separação envolvendo esta mistura, então, leva a se ter uma especificação de produtos na qual estes três componentes devam estar juntos em um único produto. Na Tabela 7.3, as especificações dos produtos a serem obtidos durante a separação são mostradas. Estas são apresentadas de 3 formas distintas, a saber: recuperação de cada componente em cada um dos produtos; vazão molar de cada componente em cada dos produtos e, por último, a composição (em fração molar) de cada um dos produtos. O produto que contém os três componentes que devem ser agrupados é o produto 3.

Tabela 7.3. Especificação para os produtos a serem obtidos

Recuperação dos componentes nos produtos

Componentes	C3H8 (A)	C4H8-1 (B)	C4H10-1 (C)	C4H8-3 (D)	C4H8-2 (E)	C5H12-1 (F)
Produto 1	0,9900	0,0050	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 2	0,0100	0,9899	0,0050	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 3	0,0000	0,0050	0,9900	0,9950	0,9950	0,0050
Produto 4	0,0000	0,0000	0,0050	0,0050	0,0050	0,9950

Vazão molar dos componentes nos produtos (kg-mol/h)

	C3H8 (A)	C4H8-1 (B)	C4H10-1 (C)	C4H8-3 (D)	C4H8-2 (E)	C5H12-1 (F)	Total
Produto 1	1,4553	0,0738	0,000	0,000	0,000	0,000	1,5291
Produto 2	0,0147	14,6034	0,2515	0,000	0,000	0,000	14,8696
Produto 3	0,0000	0,0738	49,7920	15,5439	11,9012	0,02950	77,3404
Produto 4	0,0000	0,0000	0,2515	0,0781	0,0598	5,8715	6,2609
Total	1,4700	14,7510	50,2950	15,6220	11,9610	5,9010	100,0000

Concentração dos componentes nos produtos

Componentes	C3H8 (A)	C4H8-1 (B)	C4H10-1 (C)	C4H8-3 (D)	C4H8-2 (E)	C5H12-1 (F)
Produto 1	0,95174	0,048260	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
Produto 2	0,00099	0,98210	0,01691	0,00000	0,00000	0,00000
Produto 3	0,00000	0,00095	0,64380	0,20098	0,15388	0,00038
Produto 4	0,00000	0,00000	0,040170	0,01247	0,00955	0,93780

Na Tabela 7.4. são apresentados os resultados para a separação da mistura em estudo. As informações disponíveis são os valores dos coeficientes de facilidade da separação (**CES**), dos coeficientes modificados (**CESmodificado**), dos custos fixos, dos custos das utilidades e dos custos totais anualizados para as cinco rotas possíveis. Estes resultados foram obtidos usando o método aproximado para a simulação das colunas.

Se fossem empregadas algumas das regras heurísticas já citadas neste trabalho juntamente com o **CES** original ter-se-ia:

- Execute a separação mais difícil por último – nota-se na Tabela 7.3 onde são colocadas as volatilidades relativas dos binários presentes que a etapa mais difícil é com certeza a que separa o n-butano, do 2-cis-buteno e do 2-trans-buteno. As volatilidades relativas são muito próximas de um. Os componentes C, D e E serão separados juntos. Esta etapa é realizada usando uma coluna extrativa e será a última a ser executada.

Seguindo esta regra as separações possíveis são:

Usando produtos: **1/234** ou **12/34** ou **123/4**

Usando componentes:**A/BCDEF** ou **AB/CDEF** ou **ABCDE/F**

- Remova primeiro o produto em maior quantidade – Como o n-butano está em maior quantidade, ele deveria ser o primeiro a ser removido, mas como já foi descrito anteriormente ele será retirado juntamente com o 2-cis-buteno e com 2-trans-buteno e separado posteriormente.
- Favorecer separações 50/50 – para separar os componentes usando esta regra, novamente se teria que realizar um corte no n-butano (**ABC/DEF**). Este corte será realizado por último.

Analisando as regras heurísticas discutidas, estas não mudam as rotas já definidas. Se o **CES** for utilizado, a primeira separação é **ABCDE/F** ou em termos dos produtos **123/4**. As etapas posteriores possíveis são: **A/BCDE** e **AB/CDE** ou **1/23** ou **12/3**. Usando o **CES** novamente escolhe-se a separação **AB/CDE** e se tem a primeira seqüência (rota a) mostrada na Tabela 7.5. Depois, escolhe-se a segunda possibilidade (etapa **A/BCDE**) e assim, obtém-se a segunda rota (rota b). As etapas podem ser, então, geradas da mesma forma que já foi mostrado.

Tabela 7.4. Resultados para as simulações da seqüência de colunas para a separação utilizando um modelo aproximado.

Rota	CES	CES modificado	Custo	Custo	TAC
			Fixo (US\$)	Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado
1/234	0,064	0,007	140800,00	441200,00	488133,33
2/34	0,281	0,098	546900,00	1745900,00	1928200,00
3/4	0,564	0,048	218800,00	1327900,00	1400833,33
Total	10,211	0,032	906500,00	3515000,00	3817166,67
1/234	0,064	0,007	140800,00	441200,00	488133,33
23/4	0,442	0,066	230300,00	1550200,00	1626966,67
2/3	0,312	0,127	516600,00	1370000,00	1542200,00
Total	8,879	0,058	887700,00	3361400,00	3657300,00
12/34	0,306	0,160	479500,00	815300,00	975133,33
1/2	0,858	0,088	109000,00	92100,00	128433,33
3/4	0,564	0,048	218800,00	1327900,00	1400833,33
Total	147,969	0,673	807300,00	2235300,00	2504400,00
123/4	0,449	0,058	230500,00	1563800,00	1640633,33
1/23	0,060	0,014	123400,00	427900,00	469033,33
2/3	0,312	0,127	516600,00	1370000,00	1542200,00
Total	8,454	0,104	870500,00	3361700,00	3651866,67
123/4	0,449	0,058	230500,00	1563800,00	1640633,33
12/3	0,394	0,056	1234500,00	9534600,00	9946100,00
1/2	0,858	0,088	109000,00	92100,00	128433,33
Total	151,644	0,289	1574000,00	11190500,00	11715166,67

A próxima etapa “inicial” proposta é a **AB/CDEF** usando o **CES** e a partir de etapa inicia-se um novo seqüenciamento (terceira rota - c). As outras rotas aparecem com a consideração de um novo ponto de partida (**A/BCDEF**) (rotas **d** e **e**).

Tabela 7.5 – Seqüências utilizando o CES

Etapa	1	2	3	4
Rota				
A	ABCDE/F 123/4	AB/CDE 12/3	A/B 1/2	C/DE
B	ABCDE/F 123/4	A/BCDE 1/23	B/CDE 2/3	C/DE
C	AB/CDEF 12/34	A/B 1/2	CDE/F 3/4	C/DE
D	A/BCDEF 1/234	BCDE/F 23/4	B/CDE 2/3	C/DE
E	A/BCDEF 1/234	B/CDEF 2/34	CDE/F 3/4	C/DE

Usando o **CESmodificado**, a rota escolhida é a 12/34; 1/2 e 3/4. Neste caso, o **CESmodificado** levou diretamente para a melhor rota, com o menor custo total anualizado.

Nota-se na Tabela 7.4 que a etapa “inicial” de separação com custo intermediário, que envolve a separação dos produtos 2 e 3 (12/34), apesar de ter um custo da etapa inicial mais alto, levou a uma rota com custo total anualizado menor. As seqüências diretas (1/234; 2/34 e 3/4 ou 1/234, 23/4 e 2/3) que apesar de, inicialmente, apresentarem o menor custo, no final mostraram-se piores que a rota apontada pelo **CESmodificado**.

Quando se utilizou o modelo rigoroso para simular as colunas de destilação, os resultados não foram diferentes dos obtidos pelo modelo aproximado, porém não se pode generalizar este tipo de procedimento, isto é, utilizar sempre o modelo aproximado, pois pode-se obter erros significativos na determinação da melhor seqüência. Os resultados são apresentados na Tabela 7.6.

7.3. CASO ESTUDO B – MISTURA COM 6 COMPONENTES

Como segundo caso estudo, apresenta-se a separação de uma mistura com 6 componentes, que no momento é a capacidade máxima de componentes permitida no

programa desenvolvido. Os componentes presentes nesta mistura e as condições da alimentação são colocados na Tabela 7.7. As recuperações dos componentes, vazões molares de cada componente e a composição dos produtos finais são mostrados na Tabela 7.8.

Tabela 7.6. Resultados para as simulações da seqüência de colunas para a separação utilizando modelo rigoroso.

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)
1/234	0,064	0,013	115000,00	220800,00	259133,33
2/34	0,281	0,098	1013100,00	5599100,00	5936800,00
3/4	0,564	0,046	217900,00	1864600,00	1937233,33
Total	10,211	0,060	1346000,00	7684500,00	8133166,67
1/234	0,064	0,013	115000,00	220800,00	259133,33
23/4	0,442	0,066	244600,00	2177500,00	2259033,33
2/3	0,260	0,046	977100,00	5753500,00	6079200,00
Total	7,399	0,041	1336700,00	8151800,00	8597366,67
12/34	0,306	0,088	682100,00	3210400,00	3437766,67
1/2	0,858	0,088	114500,00	135600,00	173766,67
3/4	0,564	0,046	217900,00	1864600,00	1937233,33
Total	147,969	0,356	1014500,00	5210600,00	5548766,67
123/4	0,449	0,058	244700,00	2192400,00	2273966,67
1/23	0,060	0,014	108400,00	238300,00	274433,33
2/3	0,260	0,046	977100,00	5753500,00	6079200,00
Total	7,045	0,038	1330200,00	8184200,00	8627600,00
123/4	0,449	0,058	244700,00	2192400,00	2273966,67
12/3	0,394	0,056	1190900,00	9149000,00	9545966,67
1/2	0,858	0,088	114500,00	135600,00	173766,67
Total	151,644	0,267	1550100,00	11477000,00	11993700,00

Fazendo-se uma análise das volatilidades dos binários presentes na mistura (Tabela 7.9), verifica-se que os binários propileno-propano e 1-buteno-n-butano são os que apresentam as menores volatilidades, sendo assim, os binários mais difíceis de se separar.

Tabela 7.7 : Componentes presentes na mistura do caso-estudo B

Componente	Identificação	Vazão molar (kg-mol/h)
Etano	C2H6	20,00
Propileno	C3H6-2	15,00
n-propano	C3H8	20,00
1-buteno	C4H8-1	15,00
n-butano	C4H10-1	15,00
n-pentano	C5H12-1	15,00
Temperatura = 310,95 K		
Pressão = 10 bar		
Nmin/N = 0,4		

A análise da separação desta mistura de 6 componentes envolve dois aspectos. Primeiramente, se avalia como o modelo para cálculo das colunas interfere na determinação da seqüência de etapas de separação. Viu-se no caso estudo anterior, que o modelo não modificou a seqüência com menor custo total.

Empregando o programa desenvolvido foram executadas todas as seqüências de separação possíveis. Utilizou-se para o cálculo das colunas de destilação o modelo aproximado de Wing-Underwood-Gilliland (disponível no Aspen Plus). Como o número de seqüências possíveis é alto, são apresentados na Tabela 7.10 apenas os melhores casos considerando o **CESmodificado** e o custo total. As rotas que apresentaram diferenças de custo total relativas, em relação à melhor seqüência, menores que 10 % também são mostradas na Tabela 7.10.

A melhor rota considerando o **CESmodificado** foi a 123/456; 1/23; 2/3; 45/6; 4/5, que também é a melhor considerando o **CES**. Analisando-se as seqüências que iniciam com a etapa 123/456, a separação com menores custos foi a 123/456; 12/3; 1/2; 45/6 e 4/5.

Então, se forem usados o CES e o CESmodificado, a rota recomendada tem uma diferença relativa de 27,66 %.

Tabela 7.8. Especificação para os produtos a serem obtidos – Caso Estudo B

Recuperação dos componentes nos produtos						
Componentes	C2H6 (A)	C4H10-2 (B)	C3H8 (C)	C4H8-1 (D)	C4H10-1 (E)	C5H12-1 (F)
Produto 1	0,9950	0,0050	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 2	0,0050	0,9950	0,0050	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 3	0,0000	0,0000	0,9950	0,0050	0,0000	0,0000
Produto 4	0,0000	0,0000	0,0000	0,9950	0,0050	0,0000
Produto 5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,9950	0,0050
Produto 6	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,9950

Vazão molar dos componentes nos produtos (kg-mol/h)							
Componentes	C2H6 (A)	C4H10-2 (B)	C3H8 (C)	C4H8-1 (D)	C4H10-1 (E)	C5H12-1 (F)	Total
Produto 1	19,900	0,075	0,000	0,000	0,000	0,000	19,975
Produto 2	0,100	14,925	0,100	0,000	0,000	0,000	15,125
Produto 3	0,000	0,000	19,900	0,075	0,000	0,000	19,975
Produto 4	0,000	0,000	0,000	14,925	0,075	0,000	15,000
Produto 5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	14,925	0,075	15,000
Produto 6	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	14,925	14,925
Total	20,000	15,000	20,000	15,000	15,000	15,000	100,000

Concentração dos componentes nos produtos						
Componentes	C2H6 (A)	C4H10-2 (B)	C3H8 (C)	C4H8-1 (D)	C4H10-1 (E)	C5H12-1 (F)
Produto 1	0,99625	0,00375	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000
Produto 2	0,00661	0,98678	0,00661	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 3	0,0000	0,0000	0,99625	0,00375	0,0000	0,0000
Produto 4	0,0000	0,0000	0,0000	0,9950	0,0050	0,0000
Produto 5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,9950	0,0050
Produto 6	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000

Tabela 7.9. Volatilidades relativas máximas, mínimas e médias dos binários presentes – Caso Estudo B

Componente 1	Componente 2	Volatilidade Relativa Valor máximo	Volatilidade Relativa Valor mínimo	Volatilidade Relativa Valor médio
ETANO	PROPILENO	4,615	4,013	4,368
ETANO	PROPANO	6,748	4,255	5,149
ETANO	1-BUTENO	29,637	10,060	16,559
ETANO	N-BUTANO	46,044	10,932	19,846
ETANO	N-PENTANO	99,000	21,296	74,986
PROPILENO	PROPANO	1,338	1,117	1,229
PROPILENO	1-BUTENO	4,073	3,199	3,559
PROPILENO	N-BUTANO	4,551	3,961	4,292
PROPILENO	N-PENTANO	17,253	8,052	11,521
PROPANO	1-BUTENO	2,984	2,871	2,946
PROPANO	N-BUTANO	3,882	3,096	3,420
PROPANO	N-PENTANO	13,971	6,722	9,125
1-BUTENO	N-BUTANO	1,216	1,140	1,185
1-BUTENO	N-PENTANO	3,154	2,986	3,091
N-BUTANO	N-PENTANO	2,976	2,494	2,645

Se, na continuidade do estudo, forem empregados os segundos melhores CES's ou **CES's modificado**, as rotas obtidas continuam a ter custos elevados, porém se o terceiro melhor **CESmodificado** for considerado, a seqüência com o menor custo é obtida (12/3456; 1/2; 34/56; 3/4 e 5/6). O mesmo não ocorre quando se usa o terceiro melhor CES, mas se deve observar um fato importante, que se forem tomados os valores dos produtórios (linhas Total da Tabela 7.10) dos CES de cada etapa (CES da 1ª. etapa, multiplicado pelo CES da segunda etapa e assim até a última etapa), a rota ótima é aquela que neste caso apresenta o maior valor deste produtório. No caso do **CESmodificado** a rota ótima tem o terceiro maior produtório.

Nota-se na Tabela 7.11 que algumas rotas chegam a apresentar diferenças relativas entre custos totais de até 60 %. Desta forma, para se evitar rotas com custos elevados, pode-se recomendar que se use os dois coeficientes combinados, obtendo, assim, a definição da melhor rota rapidamente. Outro fato que deve ser observado é que nem sempre um produtório de CES pequeno leva a uma rota com custo total mais elevado.

Tabela 7.10 . Classificação das primeiras etapas usando os parâmetros

Classificação	CESmodificado	CES
1 ^a .	123/456	123/456
2 ^a .	1/23456	1/23456
3 ^a .	12/3456	12345/6
4 ^a .	12345/6	12/3456
5 ^a .	1234/56	1234/56

Os resultados utilizando o modelo rigoroso são significativamente diferentes do caso anterior, sob a mesma pressão de 10 bar. Na Tabela 7.12, são apresentados os custos para estas simulações. O uso de qualquer um dos dois parâmetros leva à melhor rota. As diferenças entre os custos das diversas seqüências são bem menores que quando se usou o modelo aproximado.

Novamente o **CESmodificado** levou a uma ordem diferente entre as primeiras etapas de cada seqüência. Na Tabela 7.12 são mostradas as classificações das primeiras etapas de separação considerando o **CESmodificado** e o **CES**.

Observa-se que ocorre uma inversão na 3^a posição e que o uso do **CESmodificado** mostrou-se ligeiramente melhor. Comparando-se novamente os produtórios dos valores de **CES**, a melhor seqüência tem o maior valor do produtório.

Outra análise elaborada, foi verificar se a mudança da pressão modificaria o comportamento da separação. As melhores seqüências obtidas usando o modelo rigoroso foram as mesmas do caso onde a pressão era de 10 bar. Os resultados podem ser vistos na Tabela 7.13. As seqüências começando com as separações 123/456 ou 1/23456 apresentam

diferenças entre os custos totais bem pequenas, menores que 2,5 %. Qualquer uma das quatro rotas mostradas teriam um bom desempenho na obtenção dos produtos desejados.

O uso conjunto dos dois parâmetros mostrou-se bastante eficiente, então o uso de ambos na decisão de qual rota seguir deve ser sempre empregado.

Tabela 7.11 Melhores rotas usando **CESmodificado**; P =10 bar ; Modelo Aproximado

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	TAC Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* melhor rota (%)
123/456	6,926	7,399	155400,00	715800,00	767600,00	
1/23	5,061	4,982	90600,00	271000,00	301200,00	
2/3	1,006	0,762	507500,00	1637000,00	1806166,67	
45/6	4,281	4,763	163700,00	542600,00	597166,67	
4/5	1,340	1,339	580000,00	1960400,00	2153733,33	
Total	202,307	179,090	1497200,00	5126800,00	5625866,67	48,58
123/456	6,926	7,399	155400,00	715800,00	767600,00	
12/3	0,756	0,430	469300,00	904600,00	1061033,33	
1/2	6,735	5,102	92900,00	223200,00	254166,67	
45/6	4,281	4,763	163700,00	542600,00	597166,67	
4/5	1,340	1,339	580000,00	1960400,00	2153733,33	
Total	202,362	103,580	1461300,00	4346600,00	4833700,00	27,66
1/23456	2,203	1,033	100100,00	313100,00	346466,67	
23/456	6,630	12,187	144100,00	582300,00	630333,33	
2/3	1,006	0,762	507500,00	1637000,00	1806166,67	
45/6	4,281	4,763	163700,00	542600,00	597166,67	
4/5	1,340	1,339	580000,00	1960400,00	2153733,33	
Total	84,314	61,165	1495400,00	5035400,00	5533866,67	46,15
1/23456	2,203	1,033	100100,00	313100,00	346466,67	
234/56	0,820	0,690	611400,00	1818300,00	2022100,00	
23/4	3,627	5,222	129300,00	492600,00	535700,00	
2/3	1,006	0,762	507500,00	1637000,00	1806166,67	
5/6	8,473	8,431	135700,00	328200,00	373433,33	
Total	55,882	23,904	1484000,00	4589200,00	5083866,67	34,27
12/3456	0,721	0,441	495100,00	1062300,00	1227333,33	
1/2	6,735	5,102	92900,00	223200,00	254166,67	
3/456	3,711	2,741	126400,00	450900,00	493033,33	
45/6	4,281	4,763	163700,00	542600,00	597166,67	
4/5	1,340	1,339	580000,00	1960400,00	2153733,33	
Total	103,405	39,331	1458100,00	4239400,00	4725433,33	24,80

continuação da Tabela 7.11

12/3456	0,721	0,441	495100,00	1062300,00	1227333,33	
1/2	6,735	5,102	92900,00	223200,00	254166,67	
345/6	2,578	1,050	165800,00	709600,00	764866,67	
34/5	0,499	0,249	537600,00	1192700,00	1371900,00	
3/4	6,259	4,700	120600,00	342100,00	382300,00	
Total	39,090	2,760	1412000,00	3529900,00	4000566,67	5,66
12/3456	0,721	0,441	495100,00	1062300,00	1227333,33	
1/2	6,735	5,102	92900,00	223200,00	254166,67	
34/56	1,157	0,990	547700,00	1366600,00	1549166,67	
3/4	6,259	4,700	120600,00	342100,00	382300,00	
5/6	8,473	8,431	135700,00	328200,00	373433,33	
Total	297,973	88,231	1392000,00	3322400,00	3786400,00	0,00
1234/56	0,585	0,251	591700,00	1413900,00	1611133,33	
5/6	8,473	8,431	135700,00	328200,00	373433,33	
1/234	3,536	2,706	90700,00	275200,00	305433,33	
23/4	3,486	5,222	129300,00	492600,00	535700,00	
2/3	1,006	0,762	507500,00	1637000,00	1806166,67	
Total	61,519	22,770	1454900,00	4146900,00	4631866,67	22,33
1234/56	0,585	0,251	591700,00	1413900,00	1611133,33	
5/6	8,473	8,431	135700,00	328200,00	373433,33	
12/34	1,325	1,319	497600,00	1200700,00	1366566,67	
1/2	6,735	5,102	92900,00	223200,00	254166,67	
3/4	6,259	4,700	120600,00	342100,00	382300,00	
Total	277,001	66,900	1438500,00	3508100,00	3987600,00	5,31
12345/6	1,539	0,323	187400,00	988800,00	1051266,67	
123/45	4,626	3,268	154800,00	689400,00	741000,00	
1/23	5,061	4,982	90600,00	271000,00	301200,00	
2/3	1,006	0,762	507500,00	1637000,00	1806166,67	
4/5	1,340	1,339	580000,00	1960400,00	2153733,33	
Total	48,574	5,356	1520300,00	5546600,00	6053366,67	59,87
12345/6	1,539	0,323	187400,00	988800,00	1051266,67	
1/2345	2,738	1,542	94200,00	297400,00	328800,00	
234/5	0,401	0,182	565500,00	1534700,00	1723200,00	
23/4	3,627	5,222	129300,00	492600,00	535700,00	
2/3	6,259	4,700	120600,00	342100,00	382300,00	
Total	38,335	2,218	1097000,00	3655600,00	4021266,67	6,20

* diferença relativa à melhor rota

Tabela 7.12 Melhores rotas usando **CESmodificado**; P =10 bar ; Modelo Rigoroso

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	TAC Custo Total Anualizado	Diferença* melhor rota (%)
123/456	6,926	12,938	176200,00	743800,00	802533,33	
1/23	5,061	9,534	98500,00	285600,00	318433,33	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
45/6	4,281	4,065	155200,00	604700,00	656433,33	
4/5	1,339	1,339	629700,00	1937200,00	2147100,00	
Total	202,144	511,373	1670500,00	5637700,00	6194533,33	0,00
123/456	6,926	12,938	176200,00	743800,00	802533,33	
1/23	5,061	9,534	98500,00	285600,00	318433,33	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
4/56	0,671	0,336	756100,00	2315100,00	2567133,33	
5/6	8,472	8,430	132900,00	441000,00	485300,00	
Total	200,511	266,464	1774600,00	5851900,00	6443433,33	4,02
1/23456	2,203	1,453	132300,00	580400,00	624500,00	
23/456	6,630	11,385	148500,00	614000,00	663500,00	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
45/6	4,281	4,065	155200,00	604700,00	656433,33	
4/5	1,339	1,339	629700,00	1937200,00	2147100,00	
Total	84,246	68,596	1676600,00	5802700,00	6361566,67	2,70
1/23456	2,203	1,453	132300,00	580400,00	624500,00	
23/456	6,630	11,385	148500,00	614000,00	258600,00	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
4/56	0,671	0,336	756100,00	2315100,00	2567133,33	
5/6	8,472	8,430	132900,00	441000,00	485300,00	
Total	83,566	35,744	1780700,00	6016900,00	6610466,67	6,71
1/23456	2,203	1,453	132300,00	580400,00	624500,00	
234/56	0,820	0,606	627500,00	2167500,00	2376666,67	
23/4	3,627	3,462	121600,00	515400,00	555933,33	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
5/6	8,472	8,430	132900,00	441000,00	485300,00	
Total	55,878	19,586	1625200,00	5770700,00	6312433,33	1,90
12/3456	0,721	0,490	580400,00	2957000,00	3150466,67	
1/2	6,735	5,988	91500,00	228100,00	258600,00	
3/456	3,711	4,390	131600,00	471200,00	515066,67	
45/6	4,281	4,065	155200,00	604700,00	656433,33	
4/5	1,339	1,339	629700,00	1937200,00	2147100,00	
Total	103,322	70,105	1588400,00	6198200,00	6727666,67	8,61
1234/56	0,585	0,251	813800,00	4793800,00	5065066,67	
5/6	8,472	8,430	132900,00	441000,00	485300,00	
1/234	4,314	3,322	106900,00	393500,00	429133,33	
23/4	3,627	3,462	121600,00	515400,00	555933,33	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
Total	78,080	18,528	1786100,00	8210100,00	8805466,67	42,15

continuação da Tabela 7.12

12345/6	1,539	0,442	181000,00	1740700,00	1801033,33	
123/45	4,626	5,727	167000,00	719400,00	775066,67	
1/23	5,061	9,534	98500,00	285600,00	318433,33	
2/3	1,006	0,762	610900,00	2066400,00	2270033,33	
4/5	1,339	1,339	629700,00	1937200,00	2147100,00	
Total	48,535	24,626	1687100,00	6749300,00	7311666,67	18,03

* diferença relativa à melhor rota

7.4. CASO ESTUDO 3 – INFLUÊNCIA DA COMPOSIÇÃO INICIAL DA ALIMENTAÇÃO

Além de verificar a eficiência do uso do parâmetro CES modificado, é importante verificar como é o desempenho dele perante a modificação da composição inicial de mistura a ser separada. A mistura propano, isobutano, n-butano, 2,2-dimetil-propano e n-pentano foi utilizada para fazer esta análise. As condições da mistura inicial são apresentadas na Tabela 7.14.

Tabela 7.13 Melhores rotas usando CESmodificado; P =1 bar ; Modelo Rigoroso

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* melhor rota (%)
123/456	6,926	11,297	115000,00	746900,00	785233,33	
1/23	5,061	9,179	75000,00	261900,00	286900,00	
2/3	1,006	0,762	527100,00	2212200,00	2387900,00	
45/6	4,281	3,830	109500,00	607900,00	644400,00	
4/5	1,340	1,340	503300,00	1790000,00	1957766,67	
Total	202,307	405,389	1329900,00	5618900,00	6062200,00	0,00
123/456	6,926	11,297	115000,00	746900,00	785233,33	
1/23	5,061	9,179	75000,00	261900,00	286900,00	
2/3	1,006	0,762	527100,00	2212200,00	2387900,00	
4/56	0,671	0,336	551400,00	2015300,00	2199100,00	
5/6	8,473	8,431	109200,00	462000,00	498400,00	
Total	200,526	224,020	1377700,00	5698300,00	6157533,33	1,57
1/23456	2,203	1,382	92600,00	471400,00	502266,67	
23/456	6,630	10,596	108400,00	582000,00	618133,33	
2/3	1,006	0,762	527100,00	2212200,00	2387900,00	
45/6	4,281	3,830	109500,00	607900,00	644400,00	
4/5	1,340	1,340	503300,00	1790000,00	1957766,67	
Total	84,314	57,258	1340900,00	5663500,00	6110466,67	0,80

continuação da Tabela 7.13

1/23456	2,203	1,382	92600,00	471400,00	502266,67	
23/456	6,630	10,596	108400,00	582000,00	618133,33	
2/3	1,006	0,762	527100,00	2212200,00	2387900,00	
4/56	0,671	0,336	551400,00	2015300,00	2199100,00	
5/6	8,473	8,431	109200,00	462000,00	498400,00	
Total	83,572	31,641	1388700,00	5742900,00	6205800,00	2,37
12345/6	1,539	0,411	119800,00	1476300,00	1516233,33	
123/45	4,626	5,266	112600,00	730700,00	768233,33	
1/23	5,061	9,179	75000,00	261900,00	286900,00	
2/3	1,006	0,762	527100,00	2212200,00	2387900,00	
4/5	1,340	1,340	503300,00	1790000,00	1957766,67	
Total	48,574	20,292	1337800,00	6471100,00	6917033,33	14,10
12345/6	1,539	0,411	119800,00	1476300,00	1516233,33	
1/2345	2,738	2,380	76700,00	363000,00	388566,67	
23/45	7,254	13,602	106100,00	557000,00	592366,67	
2/3	1,006	0,762	527100,00	2212200,00	2387900,00	
4/5	1,340	1,340	503300,00	1790000,00	1957766,67	
Total	41,201	13,591	1333000,00	6398500,00	6842833,33	12,88
12/3456	0,721	0,389	482100,00	3457900,00	3618600,00	
1/2	6,735	5,102	69100,00	218700,00	241733,33	
3/456	3,711	5,012	93200,00	427200,00	458266,67	
45/6	4,281	3,830	109500,00	607900,00	644400,00	
4/5	1,340	1,340	503300,00	1790000,00	1957766,67	
Total	103,405	51,000	1257200,00	6501700,00	6920766,67	14,16

Tabela 7.14 . Condições da mistura inicial – Caso Estudo 3

Componentes	Vazões molares em kg-mol/h					
	Caso base	Caso a	Caso b	Caso c	Caso d	Caso e
Propano	20,00	30,00	20,00	20,00	15,00	15,00
Isobutano	20,00	15,00	30,00	20,00	20,00	15,00
n-Butano	20,00	15,00	15,00	30,00	20,00	20,00
2,2-Dimetil-propano	20,00	20,00	15,00	15,00	30,00	20,00
n-Pentano	20,00	20,00	20,00	15,00	15,00	30,00

Temperatura= 70° C e Pressão = 5 bar

Analisando-se a Tabela 7.15, onde as volatilidades máximas, médias e mínimas da mistura do caso C são mostradas, nota-se que os binários isobutano-n-butano e n-butano-2,2-dimetil-propano são os que apresentam as menores volatilidades relativas. Estas são,

com certeza, as separações mais difíceis, ou melhor, ponto de corte das separações mais difíceis.

As especificações para os produtos para o caso base e para todos os outros são as mesmas em termos de recuperação, variando as vazões e composições dos produtos finais. Na Tabela 7.16 mostram-se as recuperações, vazões molares e as composições para o caso base.

Tabela 7.15. Volatilidades relativas máximas, mínimas e médias dos binários presentes – Caso Estudo C

Componente 1	Componente 2	Volatilidade Relativa Valor máximo	Volatilidade Relativa Valor mínimo	Volatilidade Relativa Valor médio
PROPANO	ISOBUTANO	3,035	2,567	2,762
PROPANO	N-BUTANO	4,573	3,439	3,902
PROPANO	2,2-DIMETIL-PROPANO	7,124	4,412	5,314
PROPANO	N-PENTANO	19,792	7,873	11,666
ISOBUTANO	N-BUTANO	1,407	1,382	1,396
ISOBUTANO	2,2-DIMETIL-PROPANO	2,003	1,871	1,929
ISOBUTANO	N-PENTANO	4,629	3,484	3,964
N-BUTANO	2,2-DIMETIL-PROPANO	1,413	1,378	1,393
N-BUTANO	N-PENTANO	3,269	2,791	2,935
2,2-DIMETIL-PROPANO	N-PENTANO	2,035	2,011	2,023

Analisam-se, primeiramente, resultados para o caso base, cujas melhores rotas são colocadas na Tabela 7.17, utilizando o modelo aproximado para cálculo das colunas. As informações que podem ser vistas na Tabela 7.17 são as rotas, os **CES's**, os **CESmodificados**, os custos fixos, os custos das utilidades e os custos totais anualizados. Somente as rotas com diferenças de no máximo 10 % em relação ao custo total da melhor rota (menor custo total) são apresentados. Se o **CES** fosse empregado para a escolha da melhor rota, a rota indicada seria a 1/2345; 23/45; 2/3 e 4/5 que não é a rota com menor

custo. Com o **CESmodificado** também não se obtém a melhor rota, porém esta seria a segunda rota recomendada seguindo o **CESmodificado**. Na Tabela 7.17, as rotas são colocadas na seqüência obtida pelo **CESmodificado**. Se fosse utilizado o **CES** a rota ótima seria a 4ª na tabela. Não se pode afirmar que ocorreram diferenças nas indicações fornecidas pelos dois parâmetros **CES** e **CESmodificado**.

Tabela 7.16 Especificação para os produtos a serem obtidos – Caso Estudo 3 – Caso base

Recuperação dos componentes nos produtos

Componentes	C3H8 (A)	C4H10-2 (B)	C4H10-1 (C)	C5H12-3 (D)	C5H12-1 (E)
Produto 1	0,9800	0,0100	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 2	0,0200	0,9800	0,0100	0,0000	0,0000
Produto 3	0,0000	0,0100	0,9800	0,0100	0,0000
Produto 4	0,0000	0,0000	0,0100	0,9800	0,0200
Produto 5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0100	0,9800

Vazão molar dos componentes nos produtos (kg-mol/h)

Componentes	C3H8 (A)	C4H10-2 (B)	C4H10-1 (C)	C5H12-3 (D)	C5H12-1 (E)	Total
Produto 1	19,600	0,200	0,000	0,000	0,000	19,800
Produto 2	0,400	19,600	0,200	0,000	0,000	20,200
Produto 3	0,000	0,200	19,600	0,200	0,000	20,000
Produto 4	0,000	0,000	0,200	19,600	0,400	20,200
Produto 5	0,000	0,000	0,000	0,200	19,600	19,800
Total	20,000	20,000	20,000	20,000	20,000	100,000

Concentração dos componentes nos produtos

Componentes	C3H8 (A)	C4H10-2 (B)	C4H10-1 (C)	C5H12-3 (D)	C5H12-1 (E)
Produto 1	0,9899	0,0101	0,0000	0,0000	0,0000
Produto 2	0,0198	0,9703	0,0999	0,0000	0,0000
Produto 3	0,0000	0,0100	0,9800	0,0100	0,0000
Produto 4	0,0000	0,0000	0,0999	0,9703	0,0198
Produto 5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0101	0,9899

Tabela 7.17 – Resultados para o caso base – modelo aproximado

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* Melhor rota (%)
12/345	1,890	1,310	424000,00	1644200,00	1785533,33	
34/5	3,630	2,080	183900,00	975100,00	1036400,00	
3/4	2,490	2,460	409800,00	1369800,00	1506400,00	
1/2	8,070	7,910	115000,00	410400,00	448733,33	
Total	137,861	53,021	1132700,00	4399500,00	4777066,67	7,80
12/345	1,890	1,310	424000,00	1644200,00	1785533,33	
3/45	1,260	0,630	410700,00	1332200,00	1469100,00	
4/5	7,070	6,930	175000,00	669600,00	727933,33	
1/2	8,070	7,910	115000,00	410400,00	448733,33	
Total	135,871	45,240	1124700,00	4056400,00	4431300,00	0,00
123/45	1,700	1,140	439900,00	1762500,00	1909133,33	
1/23	4,050	3,300	122000,00	471500,00	512166,67	
2/3	2,790	2,760	396300,00	1300200,00	1432300,00	
4/5	7,070	6,930	175000,00	669600,00	727933,33	
Total	135,809	71,955	1133200,00	4203800,00	4581533,33	3,39
123/45	1,700	1,140	439900,00	1762500,00	1909133,33	
12/3	1,420	0,710	399500,00	1361800,00	1494966,67	
1/2	8,070	7,910	115000,00	410400,00	448733,33	
4/5	7,070	6,930	175000,00	669600,00	727933,33	
Total	137,731	44,368	1129400,00	4204300,00	4580766,67	3,37
1/2345	2,030	0,870	138200,00	537300,00	583366,67	
23/45	2,540	2,530	417000,00	1640800,00	1779800,00	
2/3	2,790	2,760	396300,00	1300200,00	1432300,00	
4/5	7,070	6,930	175000,00	669600,00	727933,33	
Total	101,708	42,100	1126500,00	4147900,00	4523400,00	2,08
1/2345	2,030	0,870	138200,00	537300,00	583366,67	
2/345	0,950	0,320	419100,00	1654600,00	1794300,00	
3/45	1,260	0,630	410700,00	1332200,00	1469100,00	
4/5	7,070	6,930	175000,00	669600,00	727933,33	
Total	17,179	1,215	1143000,00	4193700,00	4574700,00	3,24
1234/5	1,840	0,510	216000,00	1386600,00	1458600,00	
12/34	2,830	3,060	420500,00	1511700,00	1651866,67	
1/2	8,070	7,910	115000,00	410400,00	448733,33	
3/4	2,490	2,460	409800,00	1369800,00	1506400,00	
Total	104,635	30,367	1161300,00	4678500,00	5065600,00	14,31

* diferença relativa à melhor rota

Na Tabela 7.18, os resultados usando o modelo rigoroso para o cálculo das colunas são mostrados. Os resultados foram praticamente os mesmos considerando a classificação das rotas. Uma modificação substancial ocorreu nos valores das diferenças entre os custos totais com relação à melhor rota. A melhor rota considerando o **CES** tem diferença de 9,42% usando o modelo rigoroso e quando se utilizou o modelo aproximado a diferença foi de 2,08%. As diferenças também aumentaram nas outras rotas com exceção da melhor rota usando o **CESmodificado** que diminuiu.

Precisa-se determinar se o uso do parâmetro **CESmodificado** é eficiente em outras condições da alimentação. A composição de alimentação foi modificada 5 vezes conforme mostra a Tabela 7.14.

Analisando o caso “a” as melhores rotas são apresentadas na Tabela 7.19. Para esta composição houve concordância usando os **CES’s** e os **CES’s modificados** e ambos apontaram diretamente a melhor rota considerando os custos totais. As rotas para o caso “b” são mostradas na Tabela 7.20 e novamente houve concordância entre as rotas usando **CES** e **CESmodificado** e ambos apontaram diretamente a segunda melhor rota e facilmente poderia se obter a melhor modificando a segunda etapa de separação, ao invés de usar a etapa 34/5, usa-se a etapa 3/45.

Para o caso “c” (vide Tabela 7.21), as diferenças aparecem novamente. O parâmetro **CESmodificado** levou diretamente à melhor rota e se o parâmetro **CES** fosse utilizado a rota ótima seria a terceira (3^a) entre as que apresentam diferença entre custos totais menores que 10% e a sexta (6^a) se fossem consideradas todas as rotas (não mostradas na tabela).

Para o caso “d” o desempenho dos dois parâmetros é equivalente, porém nota-se na Tabela 7.22 que existem pelo menos 3 rotas equivalentes em termos do custo total (diferenças menores que 1,3 %). A rota ótima é a segunda rota em termos de **CESmodificado** e **CES**, porém a primeira apresenta uma diferença de custo total menor que 0,8% .

Finalizando esta análise com o caso “e”, cujos resultados estão colocados na Tabela 7.23. A rota é novamente obtida quase que diretamente usando o **CESmodificado**, mas quando se considera o **CES** original obtém-se uma rota não satisfatória com mais de 10 % de diferença entre os custos totais analisados.

Tabela 7.18 – Resultados para o caso base – modelo rigoroso

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* Melhor rota (%)
12/345	1,890	1,360	432100,00	1762900,00	1906933,33	
34/5	3,630	2,157	402800,00	1042500,00	1176766,67	
3/4	2,490	2,462	407500,00	1399200,00	1535033,33	
1/2	8,070	7,913	119800,00	433800,00	473733,33	
Total	137,861	57,126	1362200,00	4638400,00	5092466,67	7,34
12/345	1,890	1,360	432100,00	1762900,00	1906933,33	
3/45	1,250	0,627	188700,00	1529800,00	1592700,00	
4/5	7,070	6,934	175100,00	712300,00	770666,67	
1/2	8,070	7,913	119800,00	433800,00	473733,33	
Total	134,792	46,794	915700,00	4438800,00	4744033,33	0,00
123/45	1,700	1,140	424600,00	2067800,00	2209333,33	
1/23	4,050	3,325	125900,00	523200,00	565166,67	
2/3	2,790	2,762	395600,00	1329700,00	1461566,67	
4/5	7,070	6,934	175100,00	712300,00	770666,67	
Total	135,809	72,594	1121200,00	4633000,00	5006733,33	5,54
123/45	1,700	1,140	424600,00	2067800,00	2209333,33	
12/3	1,420	0,711	401300,00	1523900,00	1657666,67	
1/2	8,070	7,913	119800,00	433800,00	473733,33	
4/5	7,070	6,934	175100,00	712300,00	770666,67	
Total	137,731	44,477	1120800,00	4737800,00	5111400,00	7,74
1/2345	2,030	0,740	156400,00	895400,00	947533,33	
23/45	2,540	2,531	421000,00	1870700,00	2011033,33	
2/3	2,790	2,762	395600,00	1329700,00	1461566,67	
4/5	7,070	6,934	175100,00	712300,00	770666,67	
Total	101,708	35,875	1148100,00	4808100,00	5190800,00	9,42
1/2345	2,030	0,740	156400,00	895400,00	947533,33	
2/345	0,950	0,338	424700,00	1684100,00	1825666,67	
3/45	1,250	0,627	188700,00	1529800,00	1592700,00	
4/5	7,070	6,934	175100,00	712300,00	770666,67	
Total	17,043	1,086	944900,00	4821600,00	5136566,67	8,27
1234/5	1,840	0,530	198000,00	1528000,00	1594000,00	
12/34	2,830	3,002	420600,00	1696700,00	1836900,00	
1/2	8,070	7,913	119800,00	433800,00	473733,33	
3/4	2,490	2,462	407500,00	1399200,00	1535033,33	
Total	104,635	30,993	1145900,00	5057700,00	5439666,67	14,66

* diferença relativa à melhor rota

Tabela 7.19 – Resultados para o caso “a”

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* melhor rota (%)
1/2345	3,450	2,144	137600,00	634600,00	680466,67	
23/45	1,950	1,490	407400,00	1357900,00	1493700,00	
2/3	2,740	2,673	369400,00	973600,00	1096733,33	
4/5	7,090	6,969	175000,00	668800,00	727133,33	
Total	130,692	59,527	1089400,00	3634900,00	3998033,33	0,00
1/2345	3,450	2,144	137600,00	634600,00	680466,67	
2/345	0,790	0,227	413800,00	1313400,00	1451333,33	
34/5	4,140	2,634	182700,00	897500,00	958400,00	
3/4	1,880	1,401	387700,00	1171000,00	1300233,33	
Total	21,213	1,796	1121800,00	4016500,00	4390433,33	9,81
1/2345	3,450	2,144	137600,00	634600,00	680466,67	
2/345	0,790	0,227	413800,00	1313400,00	1451333,33	
3/45	0,940	0,356	392100,00	1155100,00	1285800,00	
4/5	7,090	6,969	175000,00	668800,00	727133,33	
Total	18,164	1,208	1118500,00	3771900,00	4144733,33	3,67
12/345	2,320	1,982	421600,00	1390800,00	1531333,33	
34/5	4,140	2,634	182700,00	897500,00	958400,00	
3/4	1,880	1,401	387700,00	1171000,00	1300233,33	
1/2	4,310	2,251	125900,00	531400,00	573366,67	
Total	77,826	16,465	1117900,00	3990700,00	4363333,33	9,14
12/345	2,320	1,982	421600,00	1390800,00	1531333,33	
3/45	0,940	0,356	392100,00	1155100,00	1285800,00	
4/5	7,090	6,969	175000,00	668800,00	727133,33	
1/2	4,310	2,251	125900,00	531400,00	573366,67	
Total	66,641	11,068	1114600,00	3746100,00	4117633,33	2,99
123/45	1,700	1,132	416500,00	1523000,00	1661833,33	
1/23	7,970	10,750	141100,00	573200,00	620233,33	
2/3	2,740	2,673	369400,00	973600,00	1096733,33	
4/5	7,090	6,969	175000,00	668800,00	727133,33	
Total	263,211	226,631	1102000,00	3738600,00	4105933,33	2,70
123/45	1,700	1,132	416500,00	1523000,00	1661833,33	
12/3	0,940	0,315	398800,00	1155700,00	1288633,33	
1/2	4,310	2,251	125900,00	531400,00	573366,67	
4/5	7,090	6,969	175000,00	668800,00	727133,33	
Total	48,832	5,589	1116200,00	3878900,00	4250966,67	6,33

continuação da Tabela 7.19

1234/5	1,840	0,491	208700,00	1322000,00	1391566,67	
1/234	4,800	4,308	141400,00	608100,00	655233,33	
23/4	1,690	1,117	406300,00	1379000,00	1514433,33	
2/3	2,740	2,673	369400,00	973600,00	1096733,33	
Total	40,897	6,318	1125800,00	4282700,00	4657966,67	16,51
1234/5	1,840	0,491	208700,00	1322000,00	1391566,67	
1/234	4,800	4,308	141400,00	608100,00	655233,33	
2/34	1,240	0,589	391600,00	1167100,00	1297633,33	
3/4	1,880	1,401	387700,00	1171000,00	1300233,33	
Total	20,589	1,747	1129400,00	4268200,00	4644666,67	16,17

* diferença relativa à melhor rota

Com esta análise foi mostrado que o **CESmodificado** é capaz de indicar as melhores rotas mesmo mudando a composição de inicial da mistura a separar, diferentemente do parâmetro **CES** que várias vezes indicou rotas diferentes da ótima, apesar de que algumas vezes estas rotas apresentassem pequenas diferenças entre os custos totais.

O fato é que este parâmetro proposto torna-se bastante útil para o sequenciamento das colunas de destilação, pois se pode utilizá-lo com certa segurança para definir as rotas a serem utilizadas.

Com a facilidade de operação do software desenvolvido fica muito fácil selecionar a rota ótima. A evolução da rota inicial a rota ótima é relativamente simples, ao invés de se utilizar o melhor **CESmodificado** da etapa, emprega-se o segundo melhor e assim por diante, evoluindo até a melhor rota.

Tabela 7.20 – Resultados para o caso “b”

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	TAC Custo Total Anualizado	Diferença* melhor rota (%)
12/345	2,820	2,807	447400,00	1925600,00	2074733,33	
3/45	1,090	0,470	387800,00	1001800,00	1131066,67	
4/5	5,570	4,303	172200,00	558800,00	616200,00	
1/2	5,470	3,636	123100,00	465800,00	506833,33	
Total	93,652	20,640	1130500,00	3952000,00	4328833,33	0,00

continuação da Tabela 7.20

12/345	2,820	2,807	447400,00	1925600,00	2074733,33	
34/5	4,790	3,507	176900,00	780300,00	839266,67	
3/4	2,490	2,478	366600,00	1028500,00	1150700,00	
1/2	5,470	3,636	123100,00	465800,00	506833,33	
Total	183,980	88,705	1114000,00	4200200,00	4571533,33	5,61
1/2345	2,040	0,895	138600,00	572200,00	618400,00	
23/45	1,980	1,100	413800,00	1519300,00	1657233,33	
2/3	1,430	0,721	403900,00	1541800,00	1676433,33	
4/5	5,570	4,303	172200,00	558800,00	616200,00	
Total	32,173	3,053	1128500,00	4192100,00	4568266,67	5,53
1/2345	2,040	0,895	138600,00	572200,00	618400,00	
2/345	1,680	1,004	443400,00	1866500,00	2014300,00	
34/5	4,790	3,507	176900,00	780300,00	839266,67	
3/4	2,490	2,478	366600,00	1028500,00	1150700,00	
Total	40,877	7,805	1125500,00	4247500,00	4622666,67	6,79
1/2345	2,040	0,895	138600,00	572200,00	618400,00	
2/345	1,680	1,004	443400,00	1866500,00	2014300,00	
3/45	1,090	0,470	387800,00	1001800,00	1131066,67	
4/5	5,570	4,303	172200,00	558800,00	616200,00	
Total	20,808	1,816	1142000,00	3999300,00	4379966,67	1,18
123/45	1,380	0,790	439500,00	1682500,00	1829000,00	
1/23	3,630	2,791	138000,00	515500,00	561500,00	
2/3	1,430	0,721	403900,00	1541800,00	1676433,33	
4/5	5,570	4,303	172200,00	558800,00	616200,00	
Total	39,900	6,837	1153600,00	4298600,00	4683133,33	8,18
123/45	1,380	0,790	439500,00	1682500,00	1829000,00	
12/3	0,860	0,263	422000,00	1647700,00	1788366,67	
1/2	5,470	3,636	123100,00	465800,00	506833,33	
4/5	5,570	4,303	172200,00	558800,00	616200,00	
Total	36,159	3,245	1156800,00	4354800,00	4740400,00	9,51
1234/5	1,830	0,542	207000,00	1324800,00	1393800,00	
1/234	2,710	1,554	138400,00	545600,00	591733,33	
2/34	2,770	2,732	419800,00	1675600,00	1815533,33	
3/4	2,490	2,478	366600,00	1028500,00	1150700,00	
Total	34,206	5,699	1131800,00	4574500,00	4951766,67	14,39
1234/5	1,830	0,542	207000,00	1324800,00	1393800,00	
12/34	1,730	1,057	424100,00	1753800,00	1895166,67	
1/2	5,470	3,636	123100,00	465800,00	506833,33	
3/4	2,490	2,478	366600,00	1028500,00	1150700,00	
Total	43,121	5,156	1120800,00	4572900,00	4946500,00	14,27

* diferença relativa à melhor rota

Tabela 7.21 – Resultados para o caso “c”

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* melhor rota (%)
12/345	1,900	1,353	444000,00	1804400,00	1952400,00	
3/45	2,470	2,442	414800,00	1538600,00	1676866,67	
4/5	7,010	6,799	153900,00	504400,00	555700,00	
1/2	8,030	7,835	115000,00	410800,00	449133,33	
Total	264,170	176,024	1127700,00	4258200,00	4634100,00	0,00
1/2345	2,030	0,922	138500,00	553900,00	600066,67	
23/45	1,540	0,928	437600,00	1901500,00	2047366,67	
2/3	1,920	1,312	417700,00	1571400,00	1710633,33	
4/5	7,010	6,799	153900,00	504400,00	555700,00	
Total	42,076	7,632	1147700,00	4531200,00	4913766,67	6,03
1/2345	2,030	0,922	138500,00	553900,00	600066,67	
2/345	0,950	0,328	439400,00	1857500,00	2003966,67	
3/45	2,470	2,442	414800,00	1538600,00	1676866,67	
4/5	7,010	6,799	153900,00	504400,00	555700,00	
Total	33,391	5,030	1146600,00	4454400,00	4836600,00	4,37
123/45	1,100	0,476	443000,00	2050300,00	2197966,67	
1/23	3,250	2,217	138700,00	501400,00	547633,33	
2/3	1,920	1,312	417700,00	1571400,00	1710633,33	
4/5	7,010	6,799	153900,00	504400,00	555700,00	
Total	48,117	9,417	1153300,00	4627500,00	5011933,33	8,15
123/45	1,100	0,476	443000,00	2050300,00	2197966,67	
12/3	2,110	1,565	423300,00	1572800,00	1713900,00	
1/2	8,030	7,835	115000,00	410800,00	449133,33	
4/5	7,010	6,799	153900,00	504400,00	555700,00	
Total	130,650	39,724	1135200,00	4538300,00	4916700,00	6,10
1234/5	1,300	0,273	216000,00	1410300,00	1482300,00	
12/34	2,530	2,499	424100,00	1704900,00	1846266,67	
1/2	8,030	7,835	115000,00	410800,00	449133,33	
3/4	1,290	0,664	414700,00	1622500,00	1760733,33	
Total	34,070	3,550	1169800,00	5148500,00	5538433,33	19,51

* diferença relativa à melhor rota

Tabela 7.22 – Resultados para o caso “d”

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* melhor rota (%)
123/45	2,080	1,698	440700,00	1960600,00	2107500,00	
1/23	3,050	2,007	119300,00	399100,00	438866,67	
2/3	2,820	2,817	395500,00	1302100,00	1433933,33	
4/5	3,620	1,816	184100,00	833400,00	894766,67	
Total	64,762	17,434	1139600,00	4495200,00	4875066,67	0,78
123/45	2,080	1,698	440700,00	1960600,00	2107500,00	
12/3	1,630	0,938	398700,00	1329000,00	1461900,00	
1/2	6,110	4,526	111900,00	335700,00	373000,00	
4/5	3,620	1,816	184100,00	833400,00	894766,67	
Total	74,990	13,091	1135400,00	4458700,00	4837166,67	0,00
12/345	1,530	0,890	440600,00	1655800,00	1802666,67	
34/5	2,210	0,788	198300,00	1159900,00	1226000,00	
3/4	1,690	1,135	414000,00	1657900,00	1795900,00	
1/2	6,110	4,526	111900,00	335700,00	373000,00	
Total	34,915	3,602	1164800,00	4809300,00	5197566,67	7,45
12/345	1,530	0,890	440600,00	1655800,00	1802666,67	
3/45	1,120	0,503	414200,00	1643000,00	1781066,67	
4/5	3,620	1,816	184100,00	833400,00	894766,67	
1/2	6,110	4,526	111900,00	335700,00	373000,00	
Total	37,902	3,678	1150800,00	4467900,00	4851500,00	0,30
1/2345	1,440	0,487	135700,00	479000,00	524233,33	
23/45	2,290	2,050	435700,00	1898700,00	2043933,33	
2/3	2,820	2,817	395500,00	1302100,00	1433933,33	
4/5	3,620	1,816	184100,00	833400,00	894766,67	
Total	33,663	5,106	1151000,00	4513200,00	4896866,67	1,23
1/2345	1,440	0,487	135700,00	479000,00	524233,33	
2/345	0,870	0,285	436800,00	1701400,00	1847000,00	
3/45	1,120	0,503	414200,00	1643000,00	1781066,67	
4/5	3,620	1,816	184100,00	833400,00	894766,67	
Total	5,079	0,127	1170800,00	4656800,00	5047066,67	4,34
1234/5	1,310	0,263	217900,00	1541000,00	1613633,33	
12/34	1,990	1,561	421100,00	1560400,00	1700766,67	
1/2	6,110	4,526	111900,00	335700,00	373000,00	
3/4	1,690	1,135	414000,00	1657900,00	1795900,00	
Total	26,919	2,109	1164900,00	5095000,00	5483300,00	13,36

* diferença relativa à melhor rota

Tabela 7.23 – Resultados para o caso “e”

Rota	CES	CES modificado	Custo Fixo (US\$)	Custo Utilidades (US\$)	Custo Total Anualizado (US\$)	Diferença* melhor rota (%)
123/45	2,560	2,557	438100,00	1621400,00	1767433,33	
1/23	3,480	2,497	112300,00	368700,00	406133,33	
2/3	2,150	1,635	370100,00	1111600,00	1234966,67	
4/5	4,970	3,428	182900,00	783000,00	843966,67	
Total	95,195	35,788	1103400,00	3884700,00	4252500,00	1,09
123/45	2,560	2,557	438100,00	1621400,00	1767433,33	
12/3	1,890	1,254	374700,00	1126800,00	1251700,00	
1/2	8,050	7,861	106800,00	308000,00	343600,00	
4/5	4,970	3,428	182900,00	783000,00	843966,67	
Total	193,577	86,370	1102500,00	3839200,00	4206700,00	0,00
1234/5	3,130	1,449	206700,00	1339700,00	1408600,00	
12/34	2,120	1,782	397300,00	1289900,00	1422333,33	
1/2	8,050	7,861	106800,00	308000,00	343600,00	
3/4	2,460	2,401	409800,00	1368500,00	1505100,00	
Total	131,405	48,753	1120600,00	4306100,00	4679633,33	11,24
12/345	1,220	0,550	420500,00	1477000,00	1617166,67	
34/5	5,410	4,409	196900,00	1069800,00	1135433,33	
3/4	2,460	2,401	409800,00	1368500,00	1505100,00	
1/2	8,050	7,861	106800,00	308000,00	343600,00	
Total	130,704	45,754	1134000,00	4223300,00	4601300,00	9,38
12/345	1,220	0,550	420500,00	1477000,00	1617166,67	
3/45	1,000	0,399	410800,00	1336200,00	1473133,33	
4/5	4,970	3,428	182900,00	783000,00	843966,67	
1/2	8,050	7,861	106800,00	308000,00	343600,00	
Total	48,810	5,915	1121000,00	3904200,00	4277866,67	1,69
1/2345	1,430	0,452	135200,00	446400,00	491466,67	
234/5	3,970	2,358	202900,00	1237000,00	1304633,33	
2/34	1,060	0,438	395000,00	1321300,00	1452966,67	
3/4	2,460	2,401	409800,00	1368500,00	1505100,00	
Total	14,804	1,123	1142900,00	4373200,00	4754166,67	13,01
1/2345	1,430	0,452	135200,00	446400,00	491466,67	
23/45	1,800	1,364	416800,00	1551600,00	1690533,33	
2/3	2,150	1,635	370100,00	1111600,00	1234966,67	
4/5	4,970	3,428	182900,00	783000,00	843966,67	
Total	27,504	3,459	1105000,00	3892600,00	4260933,33	1,29
1/2345	1,430	0,452	135200,00	446400,00	491466,67	
2/345	0,610	0,134	417200,00	1541500,00	1680566,67	
3/45	1,000	0,399	410800,00	1336200,00	1473133,33	
4/5	4,970	3,428	182900,00	783000,00	843966,67	
Total	4,335	0,083	1146100,00	4107100,00	4489133,33	6,71

7.5. CONCLUSÕES

Neste capítulo foram analisados casos com diferentes misturas, diferentes composições da mistura inicial e diferentes modelos de cálculo das colunas de destilação. Todas estas variações foram realizadas para testar a eficácia do parâmetro proposto. Ainda que se tenha modificado o parâmetro CES original, este não foi descartado como mais uma informação para auxílio de tomada de decisão.

O parâmetro **CES modificado** se mostrou bastante eficiente na determinação da rota ótima nos 3 casos estudados apresentado neste capítulo. Este parâmetro juntamente com o produtório dos **CES** das diferentes etapas, conduziram, com segurança, à evolução da primeira rota (rota inicial) obtida via **CES modificado** até a melhor rota.

Em um dos casos estudados, os resultados utilizando o modelo aproximado para o cálculo das colunas apresentaram diferenças em relação aos resultados com modelo rigoroso, que não podem ser desconsideradas. Um estudo somente considerando o modelo aproximado deve ser evitado, pois apesar de que nos outros casos aqui mostrados as diferenças não foram significativas, se isto ocorreu para um caso, pode acontecer para outras misturas.

CAPÍTULO 8.

ALTERNATIVA: PROCESSO DE DESTILAÇÃO EM BATELADA - CONTROLE DO PROCESSO

8.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo, pretende-se mostrar como se pode utilizar uma coluna de destilação em batelada como alternativa a uma seqüência de colunas de destilação convencional. A destilação em batelada é um processo altamente flexível, pois com um único projeto de coluna, pode-se operá-la para separar uma mistura ideal ou até uma mistura que necessite de um agente de separação mássico para auxiliar a separação da mistura (Destilação Extrativa e Destilação Azeotrópica). Um extensivo trabalho compreendendo a modelagem e simulação da coluna de destilação multicomponente convencional em batelada foi realizado por Luz Jr (1993). Uma adaptação deste programa foi realizada para simular a destilação extrativa em batelada por Cirne (1998). Com base nos resultados de Luz Jr e Maciel (1995), procurou-se mostrar como seria a separação de uma mistura quaternária usando somente uma coluna de destilação em batelada. Outra contribuição deste capítulo é a implementação do controle da coluna de destilação em batelada. Uma vez que o projeto da coluna é o mesmo para uma grande variedade de aplicações, o grande problema da coluna de destilação em batelada se torna a sua operação, ou melhor, a política de operação da coluna durante a obtenção dos diferentes produtos. Como alternativa para se resolver este problema três técnicas de controle foram implementadas: o PID clássico, o controle usando uma matriz dinâmica (DMC - *Dynamic Matrix Control*) e ainda o controle adaptativo (STR - *Self Tunning Regulator*). O processo de destilação em batelada faz parte da interface interativa do sistema especialista e é considerado quando se trabalha com pequenas quantidades de produtos ou quando se tem interesse na recuperação de componentes durante o processo.

8.2. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

A destilação em batelada é uma importante operação unitária na qual uma mistura líquida é separada em dois ou mais produtos com diferentes composições. Um esquema básico do processo pode ser visto na Figura 8.1. A destilação em batelada é um processo bastante flexível, quando comparada com a destilação convencional, pois a coluna em batelada pode trabalhar com diferentes composições iniciais, volatilidades relativas (componentes) e especificações de produtos. A mesma coluna em batelada pode ser usada para um diferente número de separações.

Em uma coluna em batelada convencional, a alimentação é feita no refeedor no fundo da coluna e os produtos são retirados no topo da mesma, com exceção do último que é retirado do fundo. Alternativamente, a alimentação pode ser feita no topo da coluna (tambor de refluxo) e os produtos retirados no fundo, este processo é chamado de destilação em batelada invertida.

Embora a destilação seja um dos processos mais estudado e melhor conhecido nas indústrias químicas, a destilação em batelada ainda é um interessante campo para a pesquisa acadêmica e industrial, especialmente relacionada à determinação de políticas ótimas de controle, desenvolvimento de estratégias de controle, entre outras. Nas indústrias, o processo de destilação em batelada é muito utilizado para a separação de produtos com alto valor agregado (química fina e biotecnologia) e notadamente na recuperação de solventes industriais e estas características são consideradas pelo sistema especialista.

A destilação em batelada é um processo inerentemente dinâmico, pois as composições, temperaturas e outras variáveis variam ao longo do tempo de operação. Pode dizer que este é um processo que é constantemente perturbado. Muitos modelos matemáticos são apresentados na literatura para a destilação em batelada, tanto simples como rigorosos. Inicialmente avaliou-se a possibilidade de modificar o programa para a simulação da destilação em batelada desenvolvido por Luz Jr. (1993), para que este considerasse o controle da composição do destilado. O modelo utilizado neste trabalho é tão rigoroso quanto os modelos aplicados por Boston *et al.* (1980) e por Cuille e Reklaitis, 1986. Em Luz Jr (1993) é apresentada uma detalhada descrição da operação da coluna, bem como do sistema de equações do modelo que a representam. Este sistema é composto por equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem e por equações algébricas e, normalmente, é

um sistema rígido (Luz Jr e Maciel, 1995) e devido a isto a integração numérica usando métodos de Runge-Kutta não é recomendada. A rotina LSODAR foi utilizada com o objetivo de minimizar os tempos computacionais para a integração numérica. A vantagem desta rotina é que ela faz internamente uma análise da rigidez do sistema de equações ordinárias a ser resolvido. Uma comparação usando diferentes métodos de integração numérica para a simulação de colunas de destilação em batelada é apresentada em Luz Jr e Maciel (1995), onde se mostrou a grande redução no tempo computacional quando se usa a rotina LSODAR.

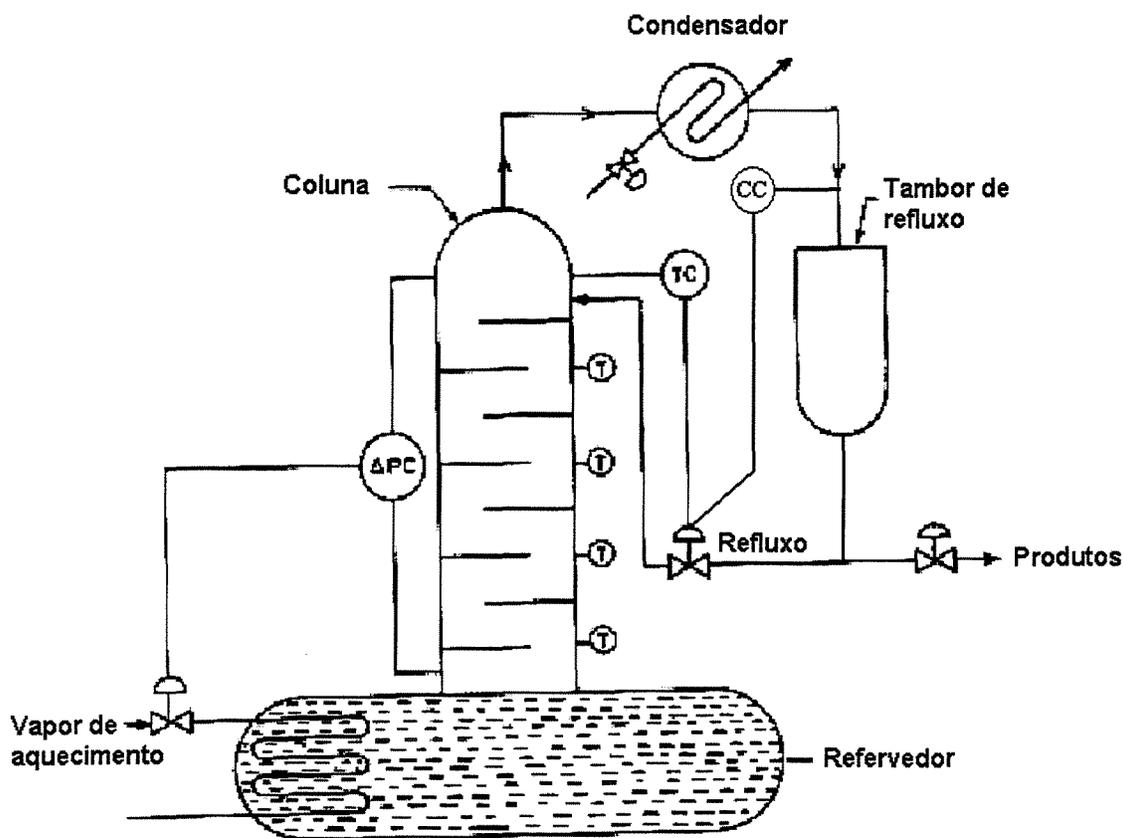


Figura 8.1 Esquema da coluna de destilação em batelada

8.3. SEPARAÇÃO DE UMA MISTURA QUATERNÁRIA

Como caso estudo para ilustrar o desempenho de uma coluna de destilação em batelada como alternativa a uma seqüência de colunas, utilizou-se a mistura quaternária: n-

butano, n-pentano, n-hexano e n-heptano. Na Tabela 8.1 mostram-se as condições iniciais da mistura a ser separada.

Tabela 8.1. Condições iniciais para a separação da mistura 1

Componentes	n-butano/n-pentano/n-hexano/n-heptano
Composição inicial	0,250/0,250/0,250/0,250
Especificações dos produtos	Produto 1: 96% de n-butano
	Produto 2: 92 % de n-pentano
	Produto 3: 92 % de n-hexano
	Produto 4: 96 % de n-heptano
Carga Inicial (kg-mol)	100,00
Número de estágios	20, 25, 30 e 35
Acúmulo líquido nos pratos	0,1
Acúmulo líquido no condensador	0,5
Acúmulo total de líquido na coluna	2 a 2,5%
Vazão de vapor de aquecimento	200 kg/h
Razão de refluxo	2; 2,5; 3; 4; 5; 6; 7; 8.
Pressão no topo da coluna	2,026 bar
Pressão no fundo da coluna	2,126 bar

Foram realizadas simulações para todas as combinações de número de estágios e razão de refluxo mostradas na Tabela 8.1. A intenção é mostrar que a substituição de uma seqüência de colunas por uma coluna de destilação em batelada não é uma tarefa simples como muitas vezes se pensa, principalmente pelas perdas de componentes envolvidas nos cortes fora de especificação. A seqüência de obtenção de produtos em uma coluna de destilação em batelada segue usualmente a seguinte ordem, considerando a mistura em estudo:

- 1- Retirada do produto 1 (96 % de n-butano)
- 2- Retirada do primeiro corte fora de especificação (mistura de n-butano e n-pentano)

- 3- Retirada do produto 2 (92% de n-pentano)
- 4- Retirada do segundo corte fora de especificação (mistura de n-pentano e n-hexano)
- 5- Retirada do produto 3 (92% de n-hexano)
- 6- Retirada do terceiro corte fora de especificação (mistura de n-hexano e n-heptano)
- 7- No fundo da coluna resta o produto 4 (96% de n-heptano)

Tabela 8.2. Resultados para a coluna com 20 pratos

Número de Estágios = 20						
Razão de refluxo	Produto 1		1º corte fora de especificação	Produto 2		2º corte fora de especificação
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)
2,0	0,800	6.268,1	15.031,9	0,091	5.661,7	44.237,3
2,5	0,861	5.368,9	11.617,8	0,283	4.794,9	38.838,0
3,0	0,897	4.691,3	9.327,5	0,417	4.167,3	20.522,4
4,0	0,936	3.742,2	6.424,5	0,587	3.304,6	15.092,3
5,0	0,957	2.856,5	4.669,3	0,688	2.737,7	11.595,8
6,0	0,969	2.661,4	3.500,6	0,754	2.337,0	9.203,4
Razão de refluxo	Produto 3		3º corte fora de especificação	Produto 4		Quant. total de produtos (gmol) ¹
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	
2,0	-	-	-	0,650	1.099,5	40.230,8
2,5	-	-	-	0,727	1.086,7	49.044,2
3,0	0,191	3.747,1	9.296,4	0,787	1.052,2	60.353,7
4,0	0,399	2.964,5	4.206,4	0,868	959,2	73.776,7
5,0	0,523	2.455,1	1.489,0	0,919	863,7	81.746,0
6,0	0,603	2.097,6	-	0,952	777,2	86.796,0

(1) soma dos 4 produtos dentro de especificação

Nas Tabelas 8.2, 8.3, 8.4, mostram-se as recuperações dos componentes e as produtividades (vazões - mol/h) para as diferentes situações estudadas, considerando-se as especificações de produtos fornecidas na Tabela 8.1. Na Tabela 8.5, estão os resultados para a separação da mistura considerando que os produtos a serem obtidos tem concentração de 99 % (praticamente puros). Os produtos dentro das especificações serão obtidos por posterior mistura dos componentes puros obtidos na destilação em batelada, ou até mesmo com os cortes fora de especificação.

Tabela 8.3. Resultados para a coluna com 25 pratos

Número de Estágios = 25						
Razão de refluxo	Produto 1		1º corte fora de especificação	Produto 2		2º corte fora de especificação
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)
2,0	0,822	6.282,6	14.068,6	0,161	5.659,3	42.302,8
2,5	0,877	5.379,3	10.821,3	0,335	4.801,0	22.946,4
3,0	0,910	4.699,3	8.617,5	0,460	4.173,0	19.353,1
4,0	0,945	3.747,3	5.813,0	0,621	3.308,5	14.193,1
5,0	0,964	3.114,5	4.112,7	0,717	2.740,7	10.822,4
6,0	0,974	2.664,1	2.979,7	0,780	2.339,4	8.502,3
Razão de refluxo	Produto 3		3º corte fora de especificação	Produto 4		Quant. Total de produtos (gmol) ¹
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	
2,0	-	-	-	0,666	1.137,6	43.128,6
2,5	0,586	0,093	4.324,1	0,744	1.121,1	53.839,5
3,0	1,772	0,244	3.746,2	0,803	1.083,5	63.729,5
4,0	3,966	0,433	2.966,6	0,884	985,7	76.268,9
5,0	6,082	0,550	2.457,0	0,935	886,4	83.858,3
6,0	7,716	0,616	2.108,0	0,967	796,4	88.018,0

(1) soma dos 4 produtos dentro de especificação

Observa-se nas Tabelas 8.2, 8.3 e 8.4 que só foram obtidas altas recuperações dos componentes (n-butano e n-heptano) com razões de refluxo elevadas (maiores que 4) e

por consequência produtividades menores. As recuperações dos outros componentes não foram boas, nem mesmo para as razões de refluxo mais altas. Nota-se contudo, que mesmo a altas razões de refluxo as perdas de componentes nos cortes fora de especificação foram sempre maiores que 10%.

Nota-se, também, nas Tabelas 8.2, 8.3 e 8.4 a grande influência das razões de refluxo na obtenção de produtos. Sua influência é maior, até mesmo, que o aumento do número de estágios para a separação desta mistura, principalmente para as razões de refluxo mais baixas.

Tabela 8.4. Resultados para a coluna com 30 pratos

Número de Estágios = 30						
Razão de refluxo	Produto 1		1° corte fora de especificação	Produto 2		2° corte fora de especificação
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)
2,0	0,841	6.296,1	13.213,5	0,214	5.662,7	40.785,2
2,5	0,891	5.389,2	10.090,7	0,379	4.806,9	21.718,3
3,0	0,921	4.706,7	7.960,9	0,498	4.178,0	18.328,5
4,0	0,953	3.752,1	5.240,8	0,651	3.312,1	13.371,4
5,0	0,969	3.117,9	3.587,6	0,743	2.743,4	10.103,0
6,0	0,979	2.666,6	2.487,8	0,804	2.341,4	7.843,2
Razão de refluxo	Produto 3		3° corte fora de especificação	Produto 4		Quant. Total de produtos (gmol) ¹
	Recuperação	Produtividade	Quantidade	Recuperação	Produtividade	
2,0	-	-	-	0,683	1.175,8	45.501,4
2,5	0,154	4.317,9	10.209,7	0,760	1.155,8	57.481,3
3,0	0,286	3.746,9	6.605,4	0,819	1.115,0	66.605,2
4,0	0,463	2.800,0	2.368,6	0,900	1.012,3	78.519,1
5,0	0,575	3.805,8	2,6	0,951	909,1	85.806,8
6,0	0,629	4.360,2	-	0,981	814,2	89.169,0

(1) soma dos 4 produtos dentro de especificação

A intenção de se simular a obtenção de componentes puros (ver a Tabela 8.5) usando a destilação em batelada era mostrar, que a coluna para realizar estas tarefas, deve

ser uma coluna com um elevado número de pratos e operar com razões de refluxo elevadas, de forma a evitar grandes perdas de componentes nos cortes fora de especificação. Deve-se salientar que as separações aqui mostradas ocorreram a razão de refluxo contaste, outras políticas de refluxo poderiam ser discutidas, porém optou-se manter a razão de refluxo constante devido esta ser a mais facilmente implementada na indústria.

Tabela 8.5 Resultados para a coluna com 35 pratos

Número de Estágios = 35						
Razão de refluxo	Produto 1		1° corte fora de especificação	Produto 2		2° corte fora de especificação
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)
2,0	0,819	6.351,4	66.173,9	-	-	-
2,5	0,873	5.435,2	62.796,7	-	-	-
3,0	0,905	4.746,0	16.140,0	0,178	4.277,4	39.667,3
4,0	0,940	3.782,2	12.338,6	0,375	3.382,2	23.371,7
5,0	0,958	3.142,1	9.834,1	0,503	2.796,3	20.313,0
6,0	0,969	2.686,7	8.054,9	0,593	2.383,3	17.848,5
7,0	0,975	2.346,4	6.727,2	0,660	2.076,5	15.794,0
8,0	0,981	2.085,0	5.700,9	0,711	1.839,8	14.086,2
Razão de refluxo	Produto 3		3° corte fora de especificação	Produto 4		Quant. Total de produtos (gmol) ¹
	Recuperação	Produtividade	Quantidade (gmol)	Recuperação	Produtividade	
2,0	-	-	-	0,501	779,1	33.326,1
2,5	-	-	-	0,581	795,8	36.703,3
3,0	-	-	-	0,647	794,1	43.692,8
4,0	0,125	3.021,6	8.518,7	0,748	761,5	55.271,0
5,0	0,239	2.499,5	5.722,8	0,820	713,4	63.630,2
6,0	0,328	2.131,2	3.884,3	0,871	662,4	69.712,3
7,0	0,402	1.857,2	2.584,5	0,909	613,7	74.394,3
8,0	0,463	1.645,6	1.640,9	0,938	568,6	78.102,0

(1) soma dos 4 produtos dentro de especificação

Como se observou os resultados para a separação da mistura não foram tão bons como se esperava. Novamente deve-se salientar que a aplicabilidade da destilação em batelada deve levar em conta as quantidades a serem destiladas, o valor dos produtos a serem obtidos e se a coluna vai ser utilizada para a separação de uma ou mais misturas.

Como continuidade deste trabalho, ao invés de se propor políticas de refluxo para a operação da coluna, optou-se por aplicar diferentes técnicas de controle, para tentar garantir a obtenção máxima de produtos dentro de especificação. Nos próximos itens se discute a aplicação de algumas técnicas de controle para a destilação em batelada

8.4. IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA DE CONTROLE

O software elaborado usou como base o programa para simulação de colunas de destilação multicomponente em batelada, UNIBAT. O novo software desenvolvido roda em uma plataforma PC e foi projetado de forma a se ter a maior interatividade com o usuário. Isto significa que a entrada de dados, cálculos e análise de resultados são feitas em um único programa. Gutermuth (1992) diz que é preciso que os simuladores sejam seqüenciais-modulares, de forma que se possa controlar a simulação, checar os resultados e mudar as especificações, sem parar a simulação. Assim, durante a simulação dinâmica realizada pelo software, o usuário pode acompanhar o comportamento das variáveis dependentes do tempo, tais como, composição dos produtos, temperatura no topo da coluna, vazão de destilado, vazão de refluxo, etc. e, ainda, mudar as especificações durante a corrida.

A otimização off-line da destilação em batelada tem recebido muita atenção nestes últimos anos, tanto em termos de perfis de refluxo, como em termos de política de reciclo. Estes resultados ótimos podem, sem dúvida, ser usados como *set-points* durante a operação on-line da coluna. O projeto de controladores e de estratégias de controle para seguir os *set-points* tem recebido pouca atenção. Um sumário de artigos considerando o controle em malha fechada da destilação em batelada é mostrado em Sorensen, 1994.

A partida da coluna em batelada sempre se dá a refluxo total, até que se atinja o estado estacionário ou a composição especificada para o componente mais volátil. Chama-se de TE o tempo necessário para se atingir este estado. Após a operação a refluxo total, inicia-se a operação a refluxo finito, este refluxo pode ser fixo, ou melhor, a razão de refluxo pode ser constante ou pode ter um valor calculado por um controlador.

Iniciou-se o estudo procurando avaliar quais malhas de controle seriam utilizadas no controle deste processo. Na Figura 8.1 são mostradas as malhas de controle consideradas no aprimoramento do software UNIBAT. Nota-se que foram propostas duas malhas de controle SISO (*single input - single output*), isto é, uma variável de entrada (manipulada) e uma variável de saída (controlada) para a coluna em batelada. Na primeira malha, a composição molar instantânea do destilado ou a temperatura de um determinado prato da coluna são as variáveis controladas e a vazão de refluxo, ou melhor, a razão de refluxo é a variável manipulada. Na segunda malha de controle, a variável controlada será a queda de pressão total na coluna e a variável manipulada será a vazão de vapor de aquecimento introduzida no refeedor, ou seja, a carga térmica do refeedor. A ação de controle baseada no desvio da temperatura de topo da coluna em relação ao *set-point* de temperatura é a mais comum e simples configuração usada industrialmente.

8.4.1. Controle PID - Proporcional-Integral-Derivativo

Para ambas as malhas considerou-se o uso de um controlador PID clássico, pois nesta fase do trabalho imaginou-se o desenvolvimento de um software para uso didático. O objetivo era ter em mãos um software onde o usuário (aluno de graduação ou operador de coluna em batelada) pudesse avaliar como seria a atuação do controle na operação da coluna.

O algoritmo do PID utilizado foi: (Stephanopoulos, 1984)

$$\Delta u(t) = u(t) - u(t-1) = K_c \left(1 + \frac{\Delta h}{\tau_I} + \frac{\tau_D}{\Delta h} \right) \varepsilon(t) - K_c \left(1 + \frac{2\tau_D}{\Delta h} \right) \varepsilon(t-1) + K_c \frac{\tau_D}{\Delta h} \varepsilon(t-2) \quad (8.1)$$

onde

u = variável manipulada

t = tempo

K_c = ganho proporcional

ε = erro da variável controlada (*set point* - valor medido)

τ_D = ganho derivativo

τ_I = ganho integral

Δh = tempo de amostragem, h

Antes de discutir a implementação e os resultados obtidos usando o controlador PID, descreve-se, com um pouco mais de detalhe, a adaptação do software e as características interativas do mesmo.

A tela principal de saída de resultados do software desenvolvido é mostrada na Figura 8.2. Observa-se na figura que as informações disponíveis são:

- tempo real da batelada (h)
- temperatura no topo da coluna (°C)
- temperatura no fundo da coluna (refeedor) - (°C)
- carga térmica do condensador (J/h)
- carga térmica do refeedor (J/h)
- razão de refluxo
- composição no refeedor (fração molar)
- composição do destilado (fração molar)
- composição do produto acumulado (fração molar)
- quantidade de mistura no refeedor (g-mol)
- quantidade de produto no acumulador (g-mol)
- vazão de destilado (g-mol/h)
- *set-points* das variáveis controladas e o valor atual destas variáveis
- taxa de vapor de aquecimento (kg de vapor d'água/h)
- vazão de destilado, quantidade de mistura no refeedor e taxa de refluxo (l/h)
- TE, tempo de operação a refluxo total durante a partida da coluna (h)

Todas estas informações são salvas em arquivos pré-determinados para análise posterior, por exemplo, geração de gráficos.

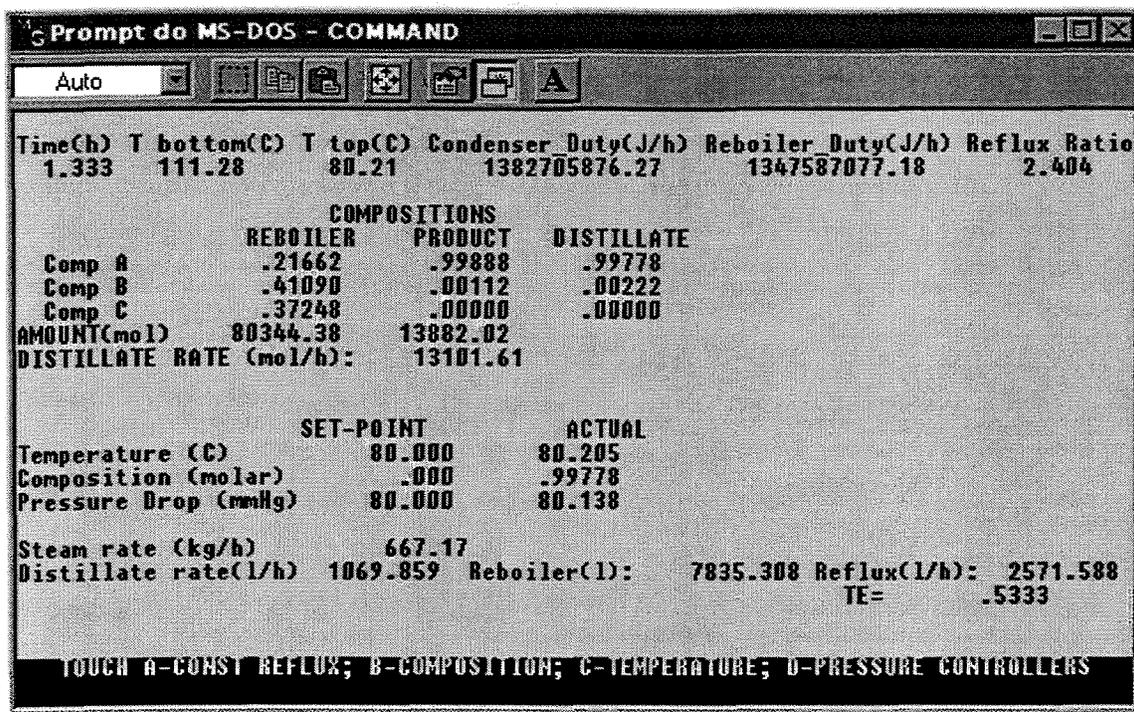


Figura 8.2. Tela de saída principal do programa UNIBATC

Observando a última linha da tela principal do programa, nela o usuário tem instruções de como escolher o controle e como operar a coluna em batelada. Se a tecla **A** for apertada, a operação ocorrerá a uma razão de refluxo especificada e constante. Se a tecla **B** for apertada (controle de composição) ou a tecla **C** for apertada (controle de temperatura) a operação ocorrerá com refluxo controlado usando com controlador PID. O usuário precisará especificar o *set-point*, os parâmetros do controlador e os limites da variável manipulada. O usuário pode escolher somente um destes controladores. Na Figura 8.3, é mostrada a janela para a seleção de controle de temperatura.

Se o usuário aperta a tecla **D**, o controlador de perda de pressão precisa ser ajustado. Se a tecla **D** não for pressionada, a operação da coluna ocorre com carga térmica do refeedor constante. Este é o caso padrão, de outra maneira, a perda de carga na coluna pode ser controlada usando um controlador PID. Neste caso a variável manipulada é a vazão de vapor de aquecimento. Quando o controlador de perda de carga é selecionado, além dos parâmetros do controlador (K_c , τ_I , τ_D), é necessário definir os valores da abertura da válvula de controle (%), da constante de projeto da válvula (C_v) e escolher o tipo de válvula (linear, raiz quadrada e igual percentagem são disponíveis). As equações

utilizadas para cálculo da taxa de vapor de aquecimento usando as características da válvula foram obtidas em Seborg *et al.* (1989). Posteriormente se o usuário desejar operar a coluna manualmente basta teclar A ou D e especificar zero para os valores do *set-point*.

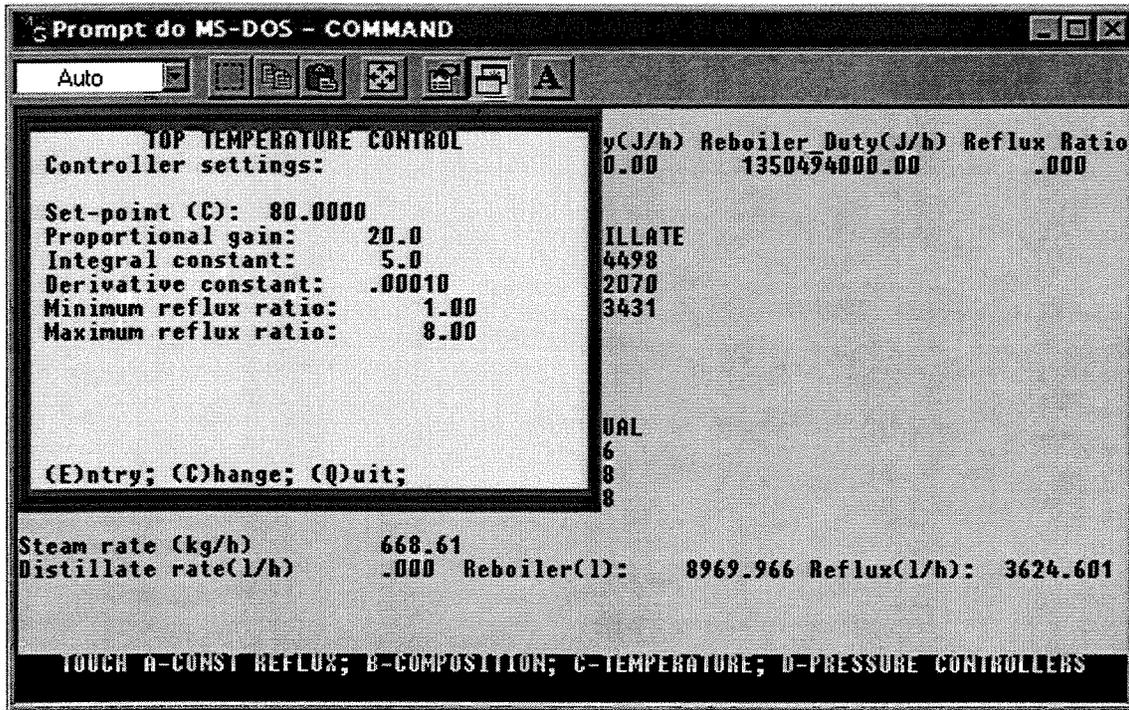


Figura 8.3. Menu interativo para controle da temperatura no topo da coluna

O controle de perda de carga está disponível para somente dois tipos de recheio de colunas, o MELLAPAK 250X e o MELLAPAK 250Y. MELLAPAK é um tipo de recheio estruturado da empresa SULZER™. No catálogo da Sulzer são apresentadas curvas para perda de carga na coluna em mbar por metro para diferentes pressões no topo da coluna (960, 100 e 25 mbar) como função do fator $F (m/s \sqrt{kg/m^3})$. O software foi desenvolvido para a destilação em batelada em multi-estágios, mas o número de estágios ideais pode ser convertido para altura de recheio usando o AEPT (altura equivalente a prato teórico). Desta forma a perda de carga na coluna empacotada pode ser calculada. O cálculo da perda de carga para colunas em estágios não está disponível no software.

Um caso estudo simples considerando uma mistura com três componentes é proposto para mostrar as potencialidades do software desenvolvido. As condições operacionais para esta mistura podem ser vistas na Tabela 8.6.

Tabela 8.6 Condições operacionais utilizadas no caso estudo para a mistura benzeno (A), tolueno (B), m-xileno (C) - especificação dos produtos em fração molar.

Número de pratos = 25	Calor fornecido no refeedor = 1350494 kJ/h
Composição inicial = [0,35; 0,35; 0,3]	Razão de refluxo = 2
Acúmulo nos pratos = 166,67 g-mol	Produto 1 = 95 % de benzeno
Acúmulo no condensador = 1666,67 g-mol	Produto 2 = 95 % de tolueno
Carga inicial = 100000 g-mol	Produto 3 = 95 % de m-xileno
Pressão no topo = 1,013 bar	Diâmetro da coluna = 0,4064 m
Recheio = Mellapak 250Y	Pressão do vapor d'água = 4 bar

Foram realizadas diversas simulações para a mistura em questão usando diferentes conjuntos de parâmetros para o controlador de temperatura de topo da coluna. Na Tabela 8.7 é apresentado um sumário com a recuperação do componente benzeno no produto 1 para dois tipos de operação. No primeiro tipo considerou-se a razão de refluxo constante (utilizou-se RR com valores de 1, 2, 3,..., 8), no segundo tipo a operação foi realizada com refluxo controlado usando o controlador de temperatura de topo. No segundo tipo os limites para a variável manipulada (razão de refluxo) foram: valor mínimo 1 e valor máximo 8. Como pode ser observado na Tabela 8.7, para recuperações similares do componente benzeno, o tempo da batelada foi sempre menor na política de operação a refluxo controlado, mesmo usando uma metodologia de tentativa e erro, para definir os parâmetros do controlador (Assis *et al.*, 1996). Este fato é muito importante, pois como a operação considerou a vazão de vapor no refeedor constante, quanto menor o tempo de operação menor é o consumo de vapor e portanto menor os gastos com utilidades.

Como o processo de destilação em batelada é continuamente perturbado, o conjunto de parâmetros, definido como ótimo para a retirada do produto, pode não ser o melhor para a retirada do segundo produto, e assim por diante. Então, de maneira a se evitar este problema, pode-se usar diferentes conjuntos de parâmetros para cada etapa da separação. Isto será discutido e mostrado posteriormente.

Na Figura 8.4 é mostrado o comportamento dinâmico da razão de refluxo e da temperatura de topo da coluna para condições de malha aberta e malha fechada.

Tabela 8.7 - Comparação entre políticas de operação a razão de refluxo constante e operação com refluxo controlado (PID).

Refluxo Constante	Tempo(h)	Recuperação (%)	Caso	Tempo(h)	Recuperação (%)
RR=1	1,88	42,01			
RR=2	4,12	73,89	$K_c = 1, \tau_I = 5, \tau_D = 1e-4$	4,23	75,30
RR=3	6,20	87,25	$K_c = 2, \tau_I = 2, \tau_D = 0,1$	6,31	89,46
RR=4	8,05	92,25	$K_c = 3, \tau_I = 0.1, \tau_D = 0,01$	6,91	92,09
RR=5	9,82	94,69	$K_c = 5, \tau_I = 5, \tau_D = 1e-4$	7,30	93,51
RR=6	11,55	96,12	$K_c = 10, \tau_I = 5, \tau_D = 1e-4$	7,57	94,27
RR=7	13,25	96,94	$K_c = 20, \tau_I = 5, \tau_D = 1e-4$	7,71	94,71
RR=8	14,95	97,56			

8.4.2. Controle DMC - *Dynamic Matrix Control*

Depois da implementação do controle PID nas duas malhas de controle já citadas, observou-se que o programa tornou-se bem versátil, e resolveu-se inovar aplicando outras estratégias de controle para a malha de controle de composição no topo da coluna. Pensou-se, então, na possibilidade de se usar técnicas de controle avançado para controlar a destilação em batelada. A primeira técnica a ser avaliada foi a de controle por matriz dinâmica (DMC - *Dynamic Matrix Control*).

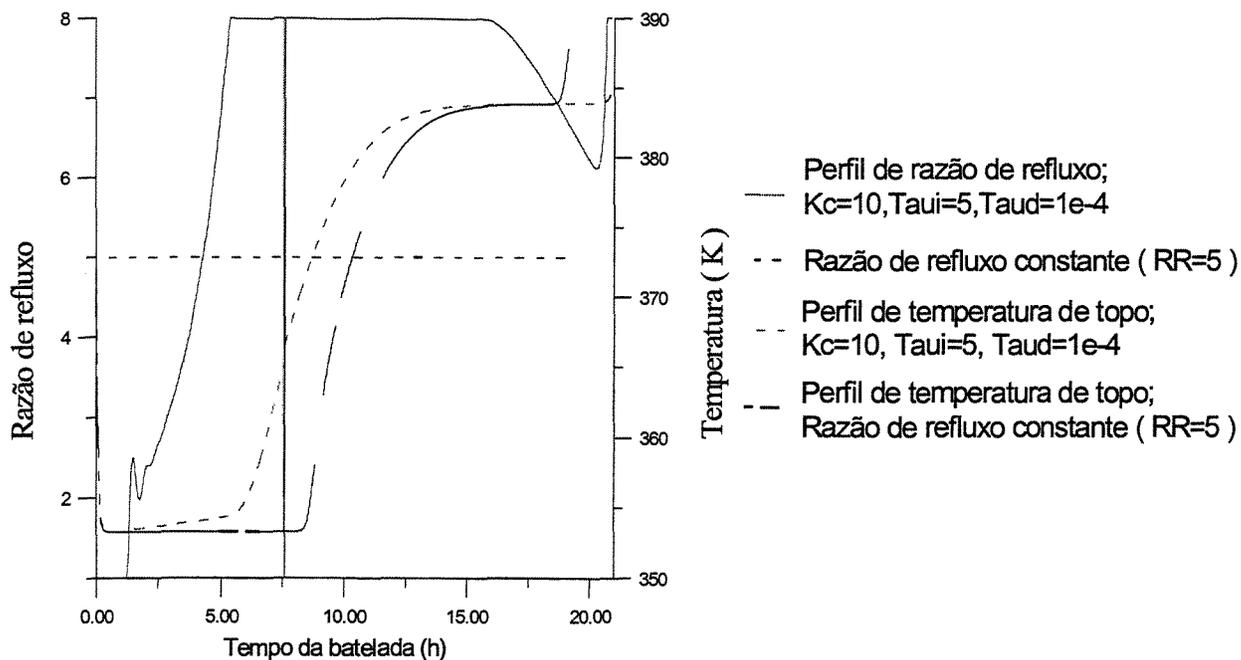


Figura 8.4. Comportamento da varáveis manipulada e controlada usando o controlador PID

O objetivo era verificar, como esta técnica de controle preditivo se adaptaria para ser usada na destilação em batelada. Primeiramente, descreve-se como funciona o controle DMC e, em seguida, compara-se o desempenho desta técnica com a do PID clássico (Assis *et al.*, 1997).

8.4.2.1. Modelo de convolução

No algoritmo de controle DMC, o modelo usado para prever o comportamento dinâmico do processo é um modelo de convolução linear baseado na resposta do sistema em malha aberta a uma variação degrau na variável manipulada. A vantagem do uso deste tipo de modelo é que os seus coeficientes podem ser obtidos diretamente da resposta experimental, sem que seja necessário se assumir previamente uma estrutura para o modelo. Considerando-se um sistema SISO (*Single Input Single Output*), ou seja, com apenas uma variável de entrada (manipulada) e uma variável de saída (controlada), a resposta (y) do processo a uma variação degrau unitária na entrada ($\Delta m_1=1$) feita no tempo zero pode ser descrita por valores de y em pontos discretos no tempo (os b_i 's mostrados na Figura 8. 5) . Em $t=nT_s$, o valor de y é b_{nT_s} . Se Δm_1 não fosse igual a 1, o valor de y em $t=nT_s$ seria $b_{nT_s}\Delta m_1$. A resposta completa pode ser descrita usando-se um número finito (NP) de

coeficientes b_i . O valor de NP é normalmente escolhido de forma que a resposta tenha atingido 90 a 95% do seu valor final.

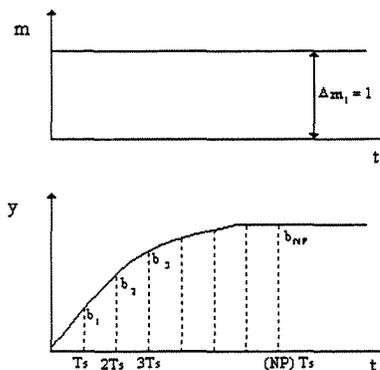


Figura 8.5- Resposta ao degrau.

Supondo que ocorram duas variações degrau na entrada, Δm_1 em $t=0$ e Δm_2 em $t=T_s$ e usando o princípio da superposição (a saída é a soma dos efeitos das entradas individuais), pode-se calcular y em cada ponto discreto de tempo:

$$\begin{aligned} t=0 & & y_0=0 \\ t=T_s & & y_1=b_1\Delta m_1 \\ t=2T_s & & y_2=b_2\Delta m_1+b_1\Delta m_2 \\ t=3T_s & & y_3=b_3\Delta m_1+b_2\Delta m_2 \end{aligned}$$

Se ocorrerem variações na entrada em quatro intervalos de tempo, a saída para os próximos seis passos é:

$$\begin{aligned} y_1 &= b_1\Delta m_1 \\ y_2 &= b_2\Delta m_1 + b_1\Delta m_2 \\ y_3 &= b_3\Delta m_1 + b_2\Delta m_2 + b_1\Delta m_3 \\ y_4 &= b_4\Delta m_1 + b_3\Delta m_2 + b_2\Delta m_3 + b_1\Delta m_4 \\ y_5 &= b_5\Delta m_1 + b_4\Delta m_2 + b_3\Delta m_3 + b_2\Delta m_4 \\ y_6 &= b_6\Delta m_1 + b_5\Delta m_2 + b_4\Delta m_3 + b_3\Delta m_4 \end{aligned}$$

Estas equações podem ser generalizadas para calcular os NP valores das saídas para NC variações nas entradas usando-se notação matricial

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{NP} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & \dots & 0 \\ b_2 & b_1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ b_{NP} & b_{NP-1} & \dots & b_{NP+1-NC} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta m_1 \\ \Delta m_2 \\ \vdots \\ \Delta m_{NC} \end{bmatrix} \quad (8.2)$$

$$\underline{y} = \underline{B} \underline{\Delta m} \quad (8.3)$$

onde B é a matriz definida na equação 6.2, que tem NP linhas e NC colunas.

Para facilitar as operações matemáticas, define-se a matriz A, de dimensão NP x NC.

$$\underline{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1,NC} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{NP,1} & a_{NP,2} & \dots & a_{NP,NC} \end{bmatrix} \quad (8.4)$$

onde os elementos da matriz A (a_{ik}) estão relacionados aos elementos de B (b_i) através da equação abaixo, onde $b_i=0$ para $i \leq 0$.

$$a_{ik} = b_{i+1-k} \quad (8.5)$$

Desta forma, o i-ésimo valor da saída pode ser escrito da seguinte forma:

$$y_i = \sum_{k=1}^{NC} b_{i+1-k} \Delta m_k = \sum_{k=1}^{NC} a_{ik} \Delta m_k \quad (8.6)$$

Do ponto de vista de controle, é interessante distinguir variações na variável manipulada no passado e no futuro. Se houver NP mudanças na variável manipulada durante os NP intervalos passados e se nenhuma outra mudança for feita, a saída mudará no futuro devido às 'velhas' mudanças na entrada. Chamando as mudanças passadas na variável de entrada de $(\Delta m)^{old}$, as respostas a essas mudanças passadas podem ser definidas

como respostas em malha aberta (y_{oi}). Usando o modelo de convolução para prever esta resposta em malha aberta, o valor predito da variável de saída no i -ésimo passo no futuro é dado por:

$$\hat{y}_{ol,i} = \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{i+1-k} (\Delta m_k)^{old} \quad (8.7)$$

Entretanto, no tempo de amostragem atual ($i=0$), pode-se medir a saída real do processo, y_0^{meas} . Se o modelo de convolução fosse perfeito e não houvesse nenhuma perturbação, os valores predito e medido seriam iguais. Entretanto, na maioria dos casos isso não é verdade. Assim, pode-se usar a diferença entre estes valores para melhorar a predição no futuro. O valor predito no tempo de amostragem atual é dado por:

$$\hat{y}_{ol,0} = \sum_{k=0}^{-NP+1} b_{1-k} (\Delta m_k)^{old} \quad (8.8)$$

A diferença entre o valores atuais medido (y_0^{meas}) e predito ($\hat{y}_{ol,0}$) é, então, adicionada ao valor predito no i -ésimo tempo de amostragem.

$$\hat{y}_{ol,i} = y_0^{meas} + \sum_{k=0}^{-NP+1} (b_{i+1-k} - b_{1-k}) (\Delta m_k)^{old} \quad (8.9)$$

A equação (8.9) descreve as predições da resposta em malha aberta que serão usadas nos cálculos do DMC.

Na realidade, a resposta total será a resposta em malha aberta mais os efeitos das futuras mudanças na variável manipulada $(\Delta m_k)^{new}$. A equação abaixo pode ser usada para prever a saída no i -ésimo tempo de amostragem quando NC mudanças forem feitas na variável manipulada no futuro.

$$\hat{y}_{cl,i} = \hat{y}_{ol,i} + \sum_{k=1}^{NC} a_{ik} (\Delta m_k)^{new} \quad (8.10)$$

8.4.2.2. *Mínimos quadrados*

No DMC deseja-se fazer com que NP respostas futuras da variável de saída sigam uma trajetória ótima, determinando-se os melhores valores das NC mudanças futuras na variável de entrada $(\Delta m_k)^{new}$. Este pode ser encarado como um problema de mínimos quadrados, onde se quer ajustar NP dados a uma equação com NC coeficientes. Este problema pode ser resolvido sempre que NP for maior do que NC.

A função objetivo a ser minimizada neste problema de mínimos quadrados é definida abaixo:

$$J = \sum_{i=1}^{NP} (y^{set \ point} - y_{cl,i})^2 + f^2 \sum_{i=1}^{NC} [(\Delta m_k)^{new}]^2 \quad (8.11)$$

Esta função objetivo é constituída basicamente de dois termos:

- o quadrado dos erros somados sobre NP intervalos de tempo (horizonte de predição)
- o quadrado das variações nas variáveis manipuladas somadas sobre NC intervalos de tempo (horizonte de controle)

A adição da variável manipulada à função objetivo multiplicada pelo fator f visa prevenir modificações muito bruscas nesta variável. O fator f é, então, definido como o fator de supressão para os movimentos calculados da variável manipulada.

A determinação do valor do fator f é feita durante o projeto do controlador. O menor valor para f é zero e nesta situação não há restrições aos movimentos da variável manipulada. Com o aumento do valor de f , o sistema torna-se amortecido.

Uma descrição completa da aplicação do método dos mínimos quadrados pode ser encontrada em Luyben (1989). A equação abaixo é obtida.

$$\underline{(\Delta m)}^{new} = [\underline{A}^T \underline{A} + f^2 \underline{I}]^{-1} \underline{A}^T \underline{y} \quad (8.12)$$

onde:

$$\underline{y} = y^{\text{set point}} - y_{ol} \quad (8.13)$$

8.4.2.3. *Algoritmo DMC*

O algoritmo DMC tem os seguintes passos a cada intervalo de tempo.

1- Calcule os NP valores de $y_{ol,i}$ usando a equação (6.9). Eles dependem somente dos valores passados da variável manipulada e do valor atual medido da variável controlada (y^{meas}).

2- Calcule os NC valores das mudanças futuras na variável manipulada usando a equação (6.12) e a matriz dinâmica \underline{A} dada na equação (6.4).

3- Implemente a primeira mudança $(\Delta m_1)^{\text{new}}$.

4- No próximo tempo de amostragem, obtenha um novo valor medido da variável controlada (y^{meas}) e repita os passos acima.

Deve-se notar que a matriz dinâmica (\underline{A}) utilizada na equação (6.9) apresenta elementos constantes, sendo calculada somente uma vez e não a cada tempo de amostragem.

8.4.2.4. *Ajuste dos parâmetros do controlador*

Os parâmetros que devem ser ajustados para um bom desempenho do controlador DMC são:

- NP - horizonte de predição
- NC - horizonte de controle
- f - fator de supressão
- Δt - intervalo de amostragem

O horizonte de predição (NP) é o número de predições usadas nos cálculos de otimização (minimização da função objetivo dada pela equação (6.11)). Um valor de NP

grande resulta em ações de controle mais conservativas, as quais têm um efeito estabilizante, mas em contrapartida aumenta-se o esforço computacional.

O horizonte de controle (NC) é o número de futuras ações de controle que são calculadas na etapa de otimização para reduzir o erro predito. Este parâmetro determina também a dimensão da matriz $[\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}} + f^2 \underline{\underline{I}}]$ da equação (6.12), que deve ser invertida. Desta forma, o esforço computacional aumenta quando se aumenta NC. No entanto, este aumento do esforço computacional somente precisa ser levado em conta quando se trabalha com controle adaptativo, já que, no algoritmo DMC não adaptativo, esta matriz somente será calculada e invertida uma vez 'off-line'.

Para a determinação dos parâmetros do controlador pode-se utilizar a metodologia sugerida por Maurath *et al.* (1988) e descrita por Seborg *et al.* (1989), válida para problemas SISO. Nesta metodologia, o primeiro passo é a determinação de NP. Fixa-se NC=1 e f=0, varia-se NP e analisa-se o valor da integral absoluta dos erros quadráticos entre os valores da variável controlada e o seu 'set-point'. O valor de NP é escolhido como aquele que minimiza esta integral.

Para a estimativa do parâmetro f, atribui-se ao horizonte de controle valor igual ao do horizonte de predição (NP=NC) e varia-se o valor de f, escolhendo-se aquele que minimiza a integral absoluta dos erros quadráticos, como descrito acima. Para a estimativa de NC, segundo Dechechi (1996), um bom valor inicial é 50% do valor de NP.

Após a estimativa inicial dos parâmetros NP, NC e f do controlador, passa-se a uma etapa de refino destes parâmetros. Nesta etapa são feitas diversas simulações variando-se os valores dos parâmetros de forma a localizar o melhor conjunto. O comportamento das variáveis controlada e manipulada é analisado qualitativamente (através da observação de gráficos) e quantitativamente (avaliação da integral absoluta dos erros quadráticos).

O valor do intervalo de amostragem está diretamente relacionado com a técnica usada para medir a variável controlada. É desejável que este valor seja pequeno o suficiente para que não se percam informações dinâmicas importantes.

8.4.3. Caso Estudo

A avaliação do desempenho do controlador DMC foi realizada usando a mesma mistura utilizada no caso estudo do PID. As condições operacionais da coluna e as condições iniciais da mistura são mostradas na Tabela 8.8. Estas condições valem para todas as simulações aqui discutidas.

Como citado anteriormente, os parâmetros de ajuste do controlador DMC são o NP (horizonte de predição), o NC (horizonte de controle) e o f (fator de supressão).

Tabela 8.8 - Condições operacionais do caso estudo.

Mistura : Benzeno(A)/Tolueno(B)/m-Xileno(C)		
Composição inicial: 0,350/0,350/0,300		
Carga inicial: 100000 g-moles		
Acúmulo líquido nos pratos: 166,67 g-mole		
Acúmulo líquido no condensador: 1666,7 g-moles		
Número de pratos: 25		
Carga térmica no refeedor : 1350494 KJ/h		
Especificação dos produtos: Produto 1: 95% de Benzeno		
Produto 2: 95% de Tolueno		
Produto 3: 95% de m-Xilene		
Faixa de variação da razão de refluxo: 2 a 8		
Set-points: (para duas etapas)		
	Temperatura (°C) - prato 20	Composição
1ª etapa	81.0	0.95
2ª etapa	108.5	0.95

Ajuste dos parâmetros do DMC para a Destilação em batelada

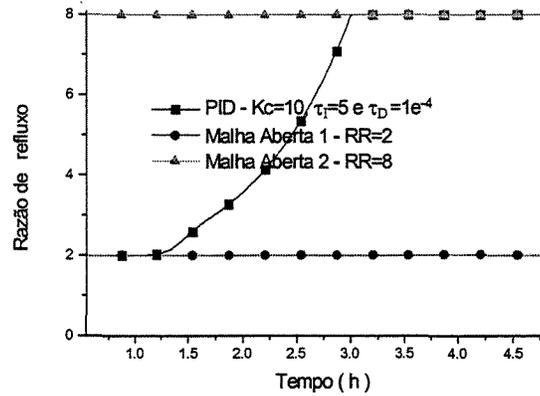
Primeiramente para a malha de controle de composição considerou-se NP=NC, variando estes parâmetros de 5 a 40 em intervalos de 5. Este procedimento foi repetido para f igual a 0, 0,1 e 0,01. A escolha dos melhores parâmetros foi realizada em duas etapas. Na primeira etapa foram consideradas a recuperação do componente mais volátil e a produtividade (mol/h) do produto rico neste componente. Somente casos onde a

recuperação do componente mais volátil foi maior que 95 % foram considerados como casos bons. Na segunda etapa foram definidos como os melhores parâmetros, aqueles que não levaram a variável manipulada a ter um comportamento oscilatório. Isto é devido ao fato de que a reprodutibilidade física do comportamento oscilatório desta variável seria difícil e imprópria. Os melhores valores destes parâmetros na faixa investigada foram $NP < 20$, $NC < 16$ e f próximo de 0,1. O mesmo procedimento foi utilizado para as duas variáveis controladas: temperatura e composição.

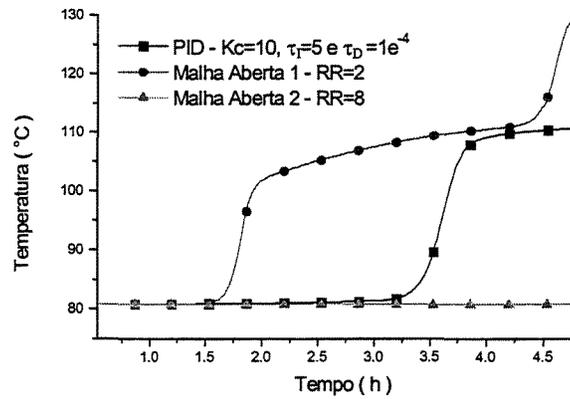
A seguir comparam-se os resultados do controlador PID, mostrado no item anterior com os resultados obtido usando o controlador DMC. Os resultados para a variável manipulada e controlada com o controlador PID de composição de topo usando o melhor conjunto de parâmetros (vide Tabela 8.7) são apresentados na Figura 8.6. Também são mostrados na Figura 8.6 os perfis de para malha aberta usando RR igual a 2 e RR igual a 8. Estes dois valores foram as restrições operacionais colocadas para a variável manipulada. Os resultados do controlador DMC usando os melhores parâmetros são apresentados nas Figuras 6.7 e 6.8. Pode-se observar que ambos os controladores PID e o DMC foram capazes de manter a composição dentro dos valores especificados durante pelo menos duas vezes mais tempo quando comparado com operação em malha aberta ($RR = 2$). Com a malha fechada (controle de composição), obtiveram as melhores recuperações apesar das menores produtividades. Deve-se notar que a maior recuperação foi atingida para razão de refluxo igual a 8, o que era esperado, mas usando o controlador de composição obtiveram-se recuperações equivalentes em menores tempos da batelada.

Também foi avaliado como a localização do sensor de temperatura na coluna de destilação em batelada interferiria no controle da coluna. As três posições do sensor simuladas foram : prato 20, prato 23 e prato de topo. Os pratos são numerados do fundo para o topo da coluna. Os conjuntos de parâmetros do controlador usados foram mantidos constantes e iguais a aqueles obtidos previamente para o DMC (correspondentes ao prato 20). Os resultados mostraram (Figura 8.9) que um comportamento oscilatório foi obtido para a variável manipulada para os pratos 23 e de topo. O motivo de se escolher a localização do sensor em um prato numa posição mais baixa na coluna é uma tentativa de se detectar mudanças de temperatura antes que estas mudanças atinjam o topo da coluna e assim mudando a composição do produto retirado no topo da coluna. Isto pode ser interpretado como uma ação antecipada do controlador. Embora os perfis da variável

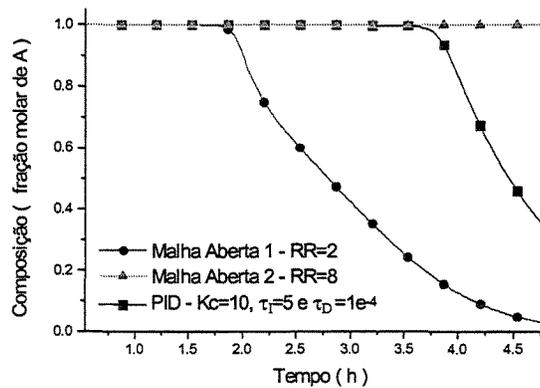
manipulada obtidos quando o sensor está no prato 23 ou no topo da coluna sejam indesejáveis, os perfis da variável controlada para as diferentes posições foram bastante similares como pode ser observado na Figura 8.9.



(a)

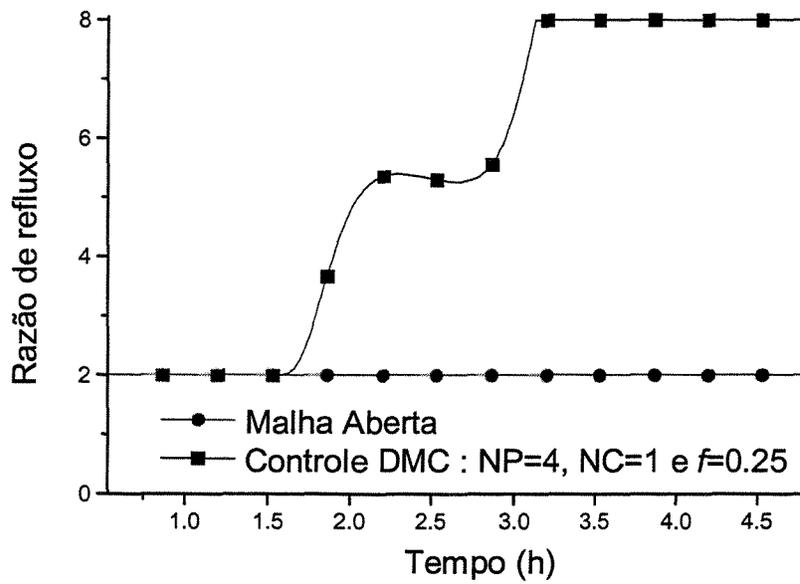


(b)

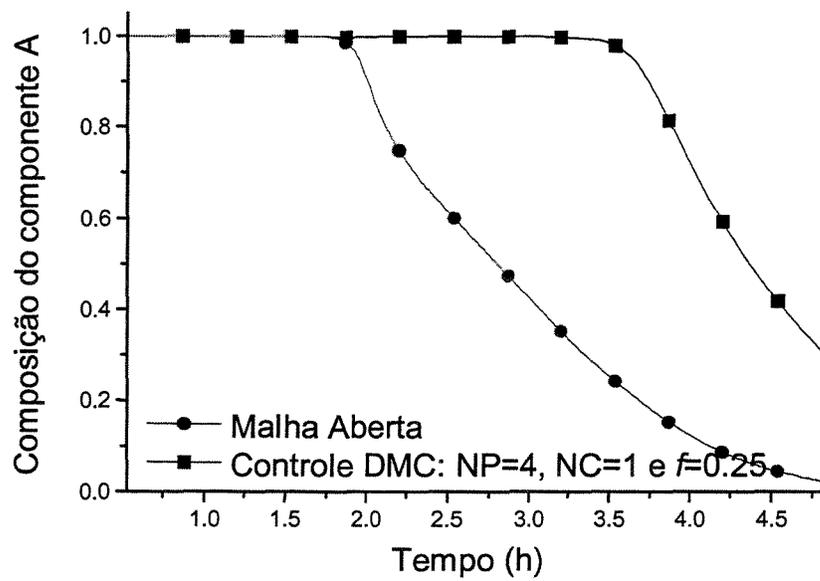


(c)

Figura 8.6 - Controle PID de composição usando a medida de temperatura: (a) variável manipulada; (b) variável medida; (c) variável controlada.

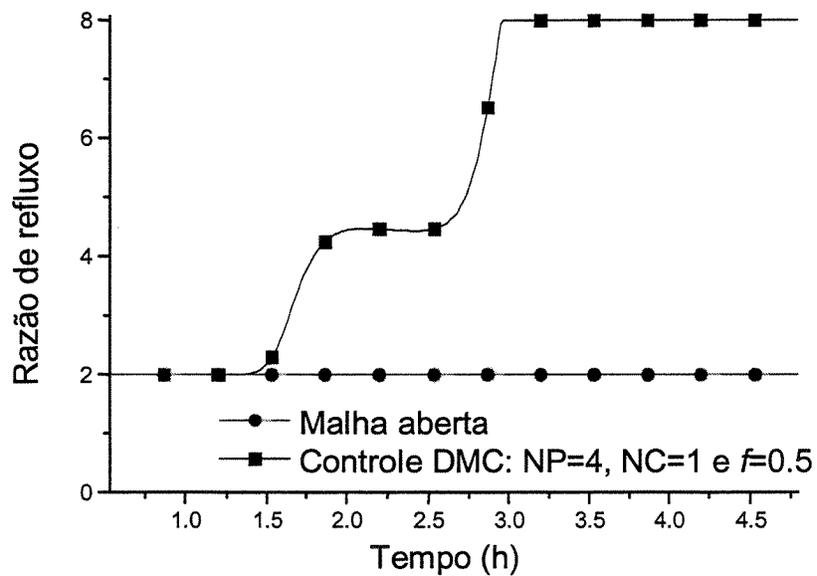


(a)

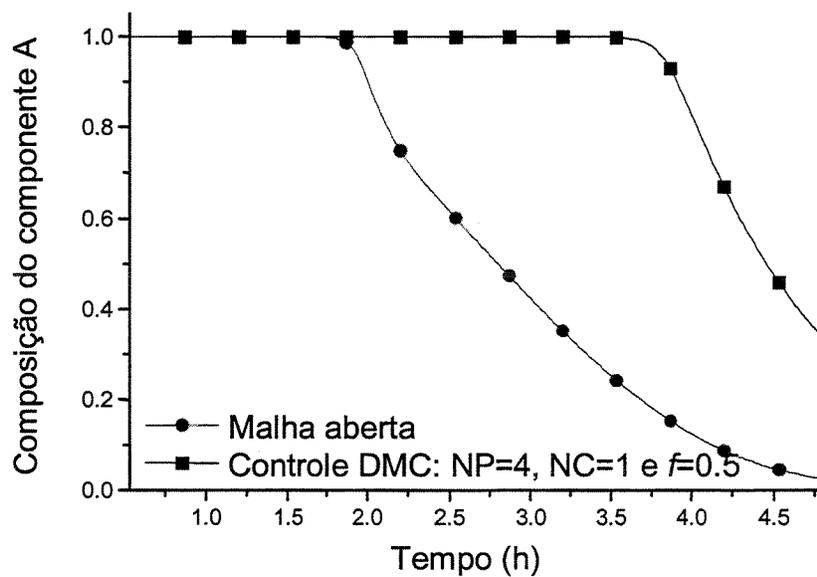


(b)

Figura 8.7. Controle de composição usando o DMC. (a) variável manipulada; (b) variável controlada

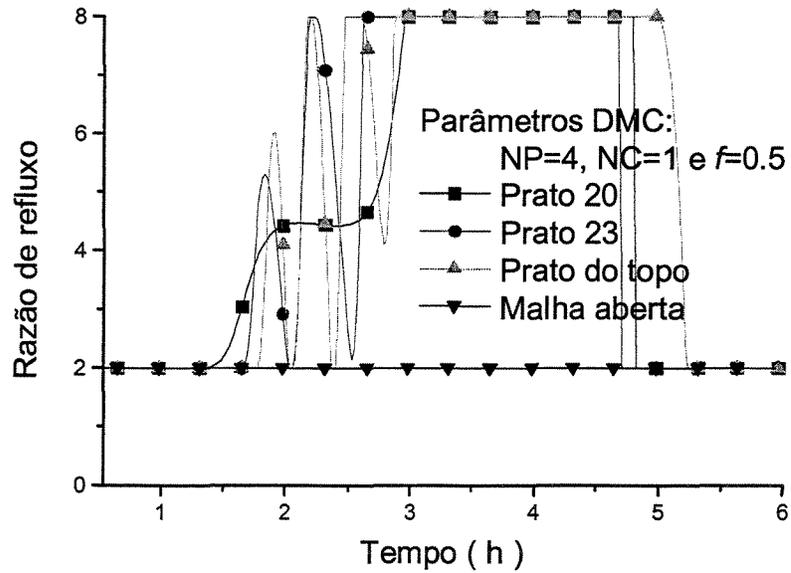


(a)

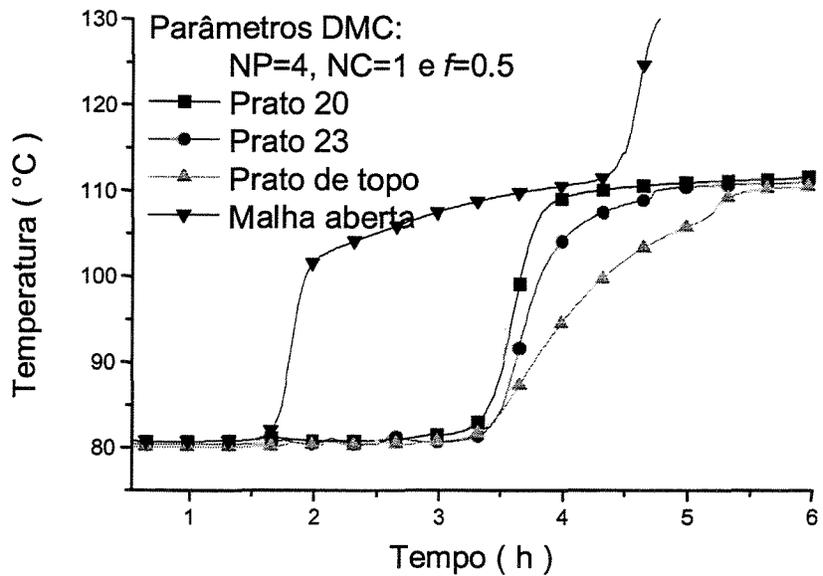


(b)

Figura 8.8. Controle de composição usando o DMC (medida de temperatura) (a) variável manipulada; (b) variável controlada.



(a)



(b)

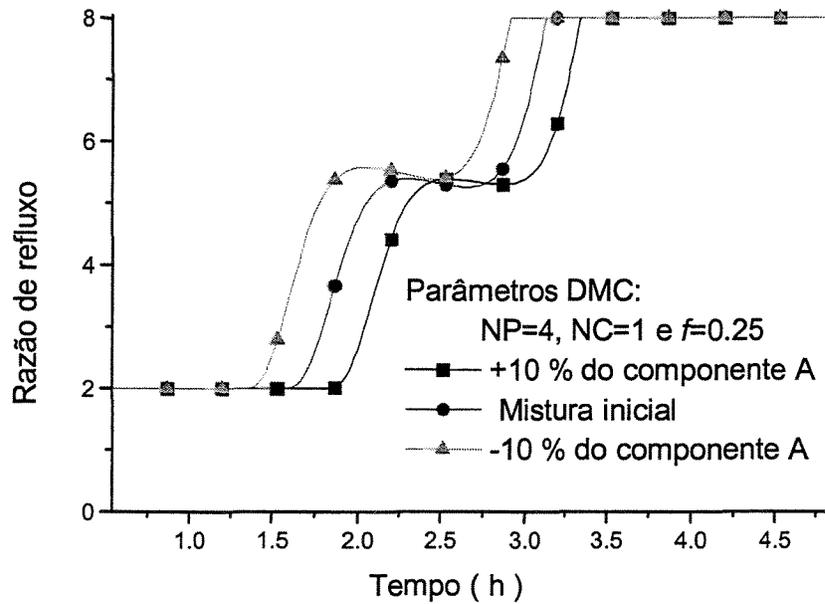
Figura 8.9. Controle de temperatura DMC - diferentes localizações do sensor de temperatura - (a) variável manipulada; (b) variável controlada.

Além da investigação da localização do sensor de temperatura, avaliou-se o desempenho do controlador após perturbações em variáveis dominantes no processo. As perturbações foram na composição de benzeno na carga inicial ($\pm 10\%$) e na carga térmica fornecida ao refeedor ($\pm 10\%$). Os resultados são mostrados nas Figuras 8.10 e 8.11. Pode-se observar que os perfis com e sem perturbações são qualitativamente similares. Pode-se dizer, que o controlador foi capaz de operar com sucesso sob estas perturbações. Uma perturbação positiva na composição inicial de benzeno levou a um atraso na ação do controlador e uma perturbação positiva na carga térmica fornecida no refeedor levou a uma antecipação na ação do controlador. Para as perturbações negativas o comportamento foi oposto ao observado para perturbações positivas.

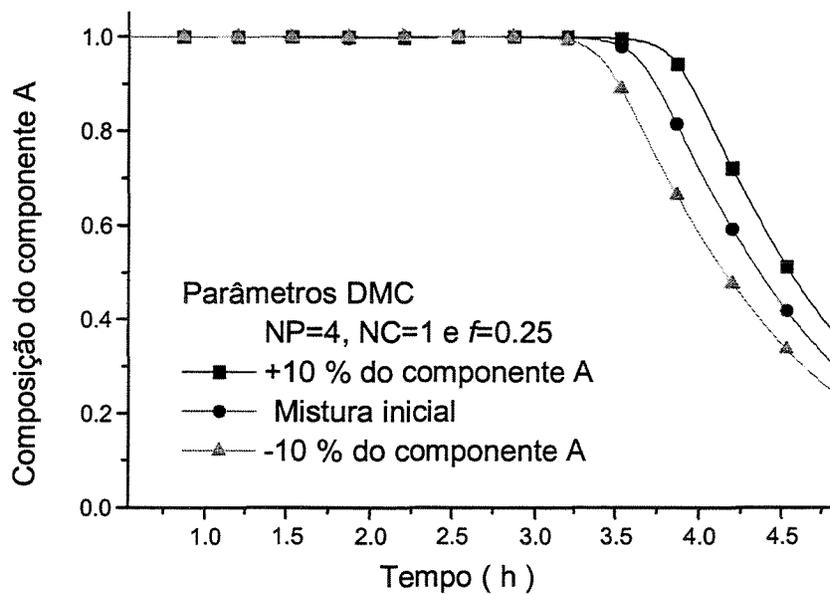
Nota-se na Figura 8.10 que quando a carga inicial é mais rica em benzeno, a coluna sobre a supervisão do controlador opera durante mais tempo no valor mínimo da razão de refluxo ($RR=2$) e menos tempo na condição máxima de razão de refluxo ($RR=8$). O inverso ocorre para uma alimentação menos rica em benzeno. Para uma taxa de vaporização maior (carga térmica maior) a coluna operou menos tempo com razão de refluxo no valor mínimo e mais tempo no valor máximo, O inverso ocorreu para a menor carga térmica (ver Figura 8.11).

Nos resultados apresentados até o momento, somente foram mostrados os referentes à retirada do primeiro componente. Os resultados das diversas simulações realizadas mostraram que os parâmetros utilizados na retirada do primeiro componente, nem sempre se mostraram apropriados para garantir a boa recuperação do segundo componente (Luz Jr *et al.*, 1998a). Portanto, para se evitar este tipo de problema, deve-se utilizar diferentes parâmetros do controlador para se obter os diversos produtos, durante a operação da coluna em batelada.

Avalia-se a seguir, além do uso de diferentes parâmetros para cada etapa do processo, outra situação que ocorre na prática. Foi considerada a presença de um tempo de amostragem Δt (controlador digital), quando se estava simulando a operação com malha fechada. Isto é necessário porque a composição do destilado só é conhecida quando os resultados de um equipamento de análise estão disponíveis, mesmo que a análise seja feita por um equipamento em linha. Os tempos de amostragem considerados neste trabalho foram 1, 5, 10 e 15 minutos.

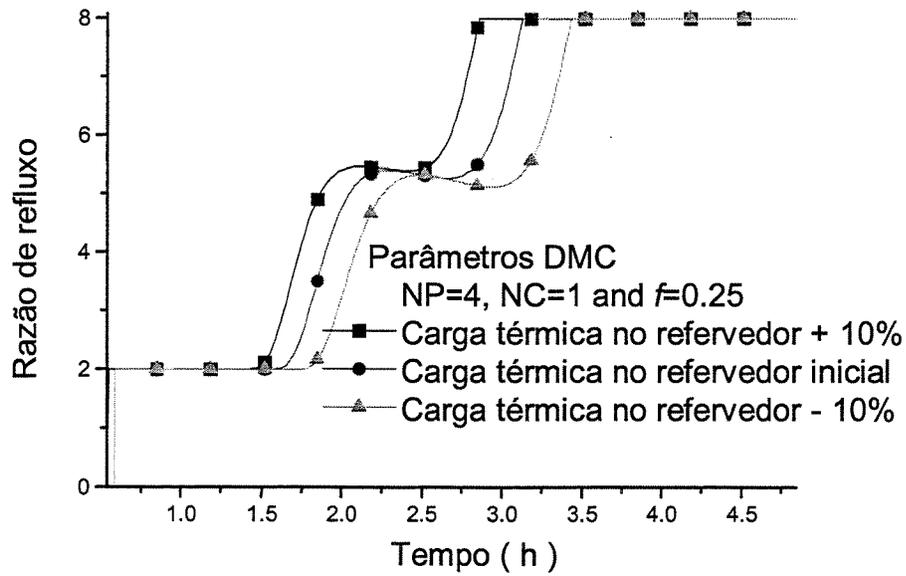


(a)

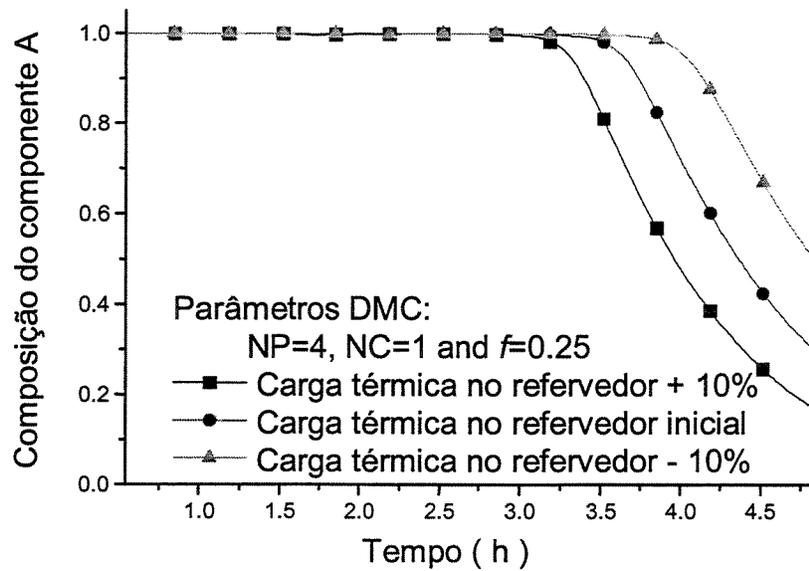


(b)

Figura 8.10. Controle de composição usando o DMC sob perturbações na composição inicial da carga - (a) variável manipulada ; (b) variável controlada.



(a)



(b)

Figura 8.11. Controle de composição usando o DMC sob perturbações na carga térmica fornecida no refeedor - (a) variável manipulada; (b) variável controlada.

Como pode ser observado na Tabela 8.9, foram obtidas recuperações similares quando foram usados conjuntos adequados de parâmetros para o controlador DMC, para os diferentes tempos de amostragem. Isto significa que ajustes nos parâmetros do controlador devem ser feitos dependendo do tempo de amostragem considerado. Em uma implementação prática desta estratégia de controle, o equipamento de análise disponível deve ser levado em conta durante a etapa de projeto do controlador (Luz Jr *et al.*, 1997).

Tabela 8.9. Produtividades e recuperações dos componentes usando o controlador DMC.

Componente mais volátil/ Controle de composição			
Δt (min.)	Parâmetros DMC [NP; NC; f]	Produtividade (mol/h)	Recuperação (%)
1	[4; 1; 0,50]	8375,29	95,72
5	[4; 2; 0,06]	8369,42	95,65
10	[12; 4; 0,06]	8693,03	95,21
15	[8; 1; 0,08]	8583,20	95,23
15 [†]	[4; 1; 0,50]	13855,88	74,56
10 [†]	[4; 1; 0,50]	13733,79	75,21
5 [†]	[4; 1; 0,50]	13305,17	77,30
1 [‡]	[8; 1; 0,08]	8003,24	96,42
5 [‡]	[8; 1; 0,08]	8141,89	96,15
10 [‡]	[8; 1; 0,08]	8173,39	96,14
Componente mais volátil/ Controle de temperatura			
1	[12 ; 8; 0,25]	8003,34	96,42
Componente intermediário/ Controle de composição			
Δt (min.)	Parâmetros DMC [NP; NC; f]	Produtividade (mol/h)	Recuperação (%)
1	[12; 1; 0,08]	7813,93	69,58
5	[4; 1; 0,01]	7942,14	69,59
10	[8; 1; 0,02]	7848,57	69,89
15	[12; 8; 0,04]	8513,47	70,54

[†] Controlador usando os melhores parâmetros para tempo de amostragem de 1 min.

[‡] Controlador usando os melhores parâmetros para tempo de amostragem de 15 min.

Outra situação prática que pode ocorrer durante a operação de uma coluna de destilação em batelada é a falha no equipamento de medida. Esta situação foi simulada de duas formas:

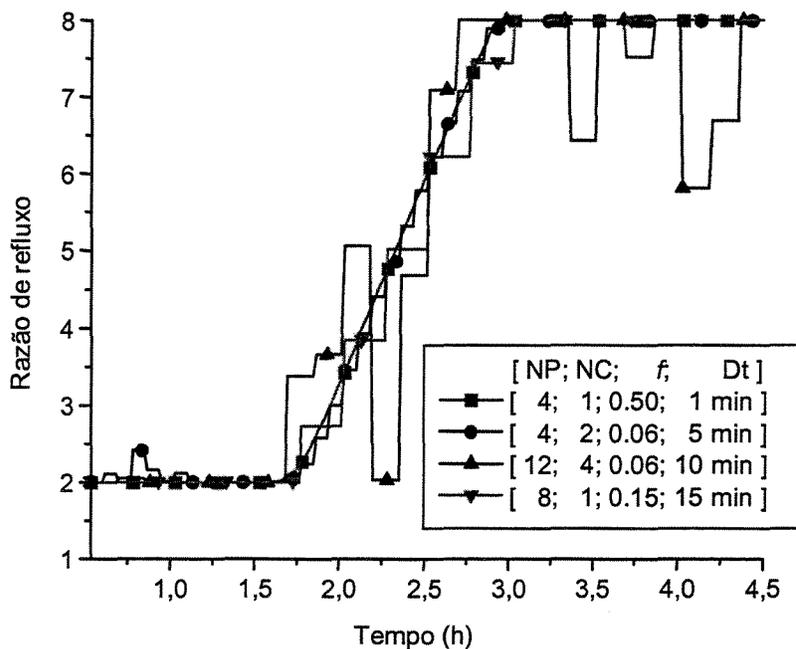
1- Usando o melhor conjunto de parâmetros para tempo de amostragem de 1 minuto, simulou-se a operação da coluna em malha fechada considerando tempos de amostragem de 5, 10 e 15 minutos para modelar as falhas no analisador.

2- Usando o melhor conjunto de parâmetros para o tempo de amostragem de 15 minutos, simulou-se a operação da coluna em malha fechada para tempos de amostragem de 1, 5 e 10 minutos, para se avaliar se o controlador era capaz de manter o mesmo desempenho.

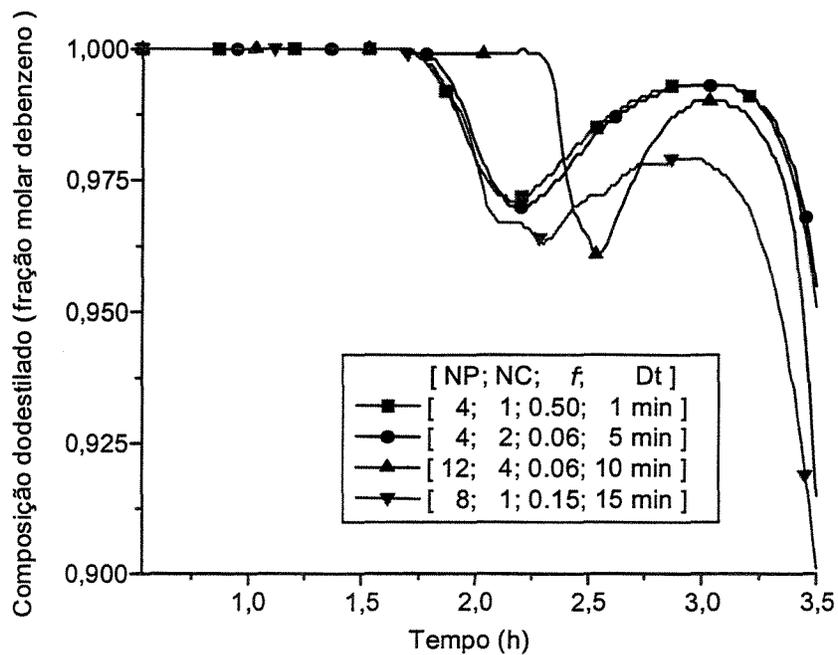
Considerando a primeira maneira de se avaliar falhas no analisador, observa-se na Tabela 8.9 que as produtividades aumentaram, mas a recuperação do componente mais volátil (benzeno) caiu drasticamente (de 95,23 para 74,56 % usando 15 minutos como tempo de amostragem). Como o melhor desempenho da destilação em batelada é aquele em que se obtém altas recuperações aliadas a altas produtividades, uma falha no equipamento de medida leva a recuperações menores, embora o controlador continue estável. Considerando a segunda maneira de se avaliar as falhas do equipamento de medida, observa-se que as recuperações do benzeno foram um pouco melhores sem haver grandes perdas de produtividade. Como conclusão, os parâmetros do controlador devem considerar o maior tempo de amostragem possível, visto que o controlador se mostrou capaz de controlar todos os tempos de amostragem menores, com recuperações similares e com perdas menores que 7 % em produtividade (ver Tabela 8.9).

Na Figura 8.12, podem ser vistos os perfis das variáveis manipulada e controlada (composição), e ainda o perfil de temperatura (prato 20) para os melhores conjuntos de parâmetros para o controlador DMC para diferentes tempos de amostragem. Deve-se salientar que altas recuperações foram obtidas para o componente mais volátil (benzeno), aproximadamente 95 %, e para o segundo componente (tolueno) apenas 70 % do que foi alimentado inicialmente foi recuperado. Além disso, os melhores parâmetros para recuperação do segundo componente são diferentes dos parâmetros para a recuperação do

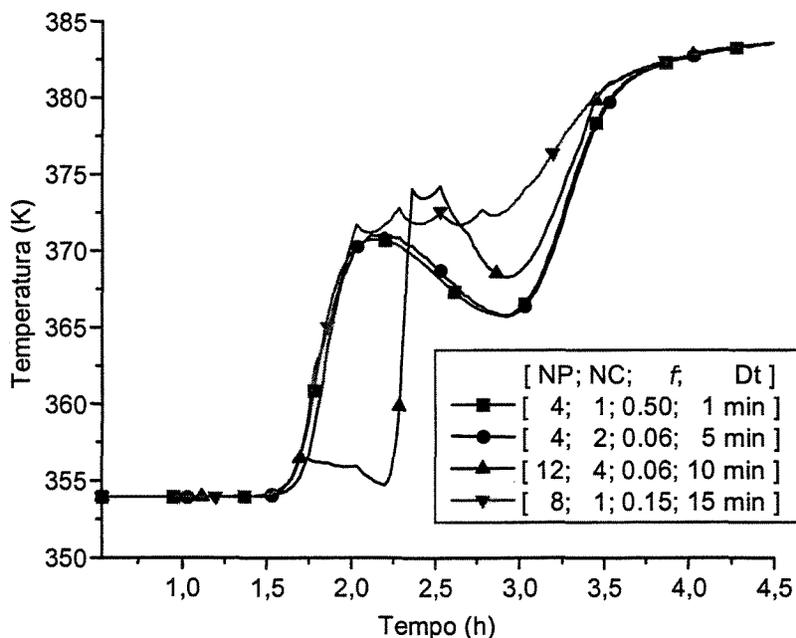
primeiro componente, mesmo usando o mesmo tempo de amostragem. Para o terceiro componente (m-xileno) a recuperação foi maior que 98 %.



(a) perfil da variável manipulada



(b) perfil da variável controlada (Figura 8. 12)



(c) Perfil de temperatura (prato 20)

Figura 8. 12. Desempenho da malha fechada usando o DMC e diferentes tempos de amostragem

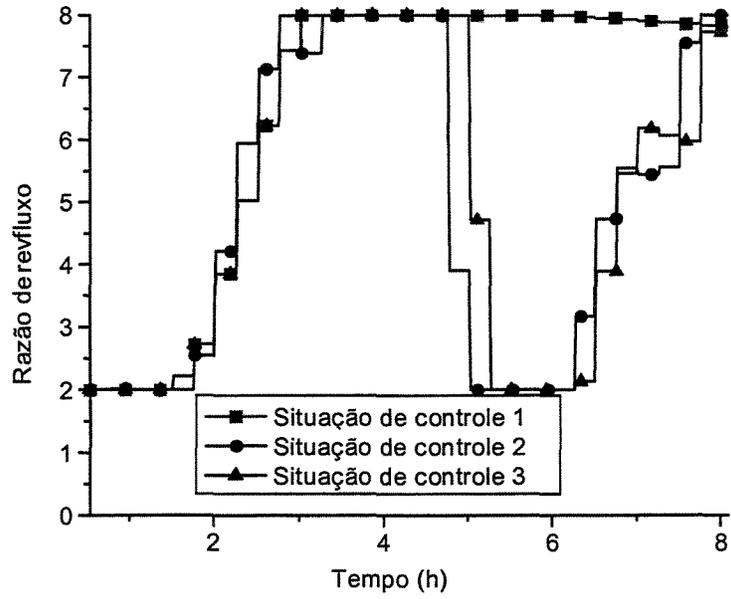
Para melhor analisar a influência dos parâmetros do controlador na recuperação dos componentes, foram investigadas três diferentes situações de controle:

- 1- os melhores parâmetros do controlador para o primeiro componente são utilizados para a recuperação dos dois componentes, o mais volátil e o intermediário;
- 2- os melhores parâmetros do controlador para o segundo componente são utilizados para a recuperação dos dois componentes, o mais volátil e o intermediário;
- 3- os melhores parâmetros para o primeiro componente são utilizados para recuperação do primeiro componente e os melhores parâmetros para o segundo componente são usados para recuperação do segundo componente.

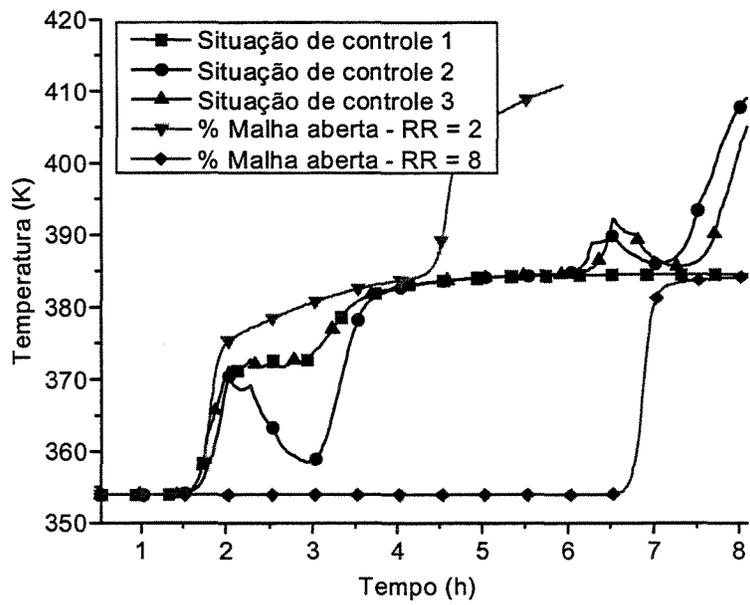
Os resultados para estas situações são mostrados na Figura 8.13. Deve-se observar que o terceiro caso foi o que apresentou melhores resultados. Isto parece óbvio, mas deve-

se considerar que a operação da coluna de destilação em batelada para a recuperação de ambos os componentes é uma operação contínua e uma mudança brusca nos parâmetros do controlador, durante a batelada, pode levar o sistema de controle a se tornar instável. Se isto não ocorrer, a mudança on-line dos parâmetros do controlador poderá ser realizada na prática e deve ser feita no início da retirada do primeiro produto fora de especificação, isto é, logo após o término da retirada do produto rico em componente mais volátil. Além disto, a recuperação do componente intermediário na terceira situação foi de 69,81 %, já na situação 1 a recuperação foi de 67,21 % (produtividades de 8571,99 e 4582,57 mole/h, respectivamente). Isto mostra que quando se usa um controlador DMC, na coluna de destilação em batelada, para a recuperação de mais de um componente, é recomendado usar um conjunto de parâmetros para a retirada de cada componente, obtendo-se assim a melhor condição de operação em malha fechada. De outra forma, mesmo que o controlador funcione corretamente a produtividade será menor.

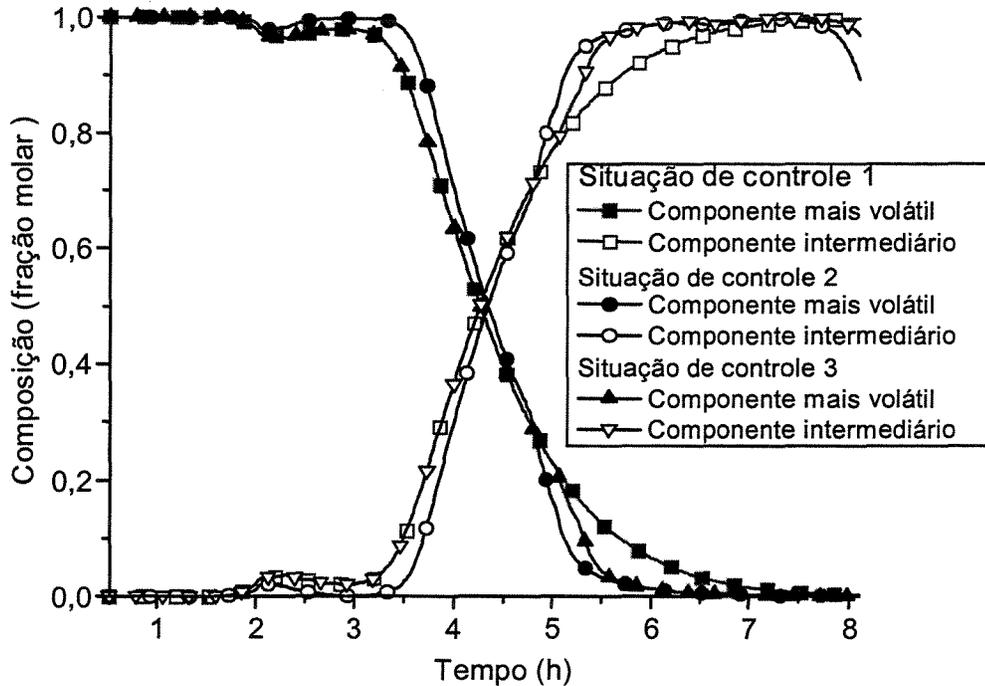
Até o momento, avaliou-se somente a malha de controle de composição usando a composição como variável medida e controlada. A seguir mostra-se uma avaliação do controle de composição usando a temperatura como variável medida e controlada. Se a temperatura for escolhida como a variável controlada (mais usual), usando o controlador DMC, obtiveram-se recuperações e produtividades similares às obtidas usando o controle composição. Os resultados para o controle de temperatura usando o DMC são apresentados na Tabela 8.9 e para o controlador PID os resultados são mostrados na Tabela 8.10.



(a) perfil da variável manipulada



(b) perfil de temperatura (prato 20)



(c) perfil de composição do destilado

Figura 8. 13. Comportamento da malha fechada usando o DMC com diferentes parâmetros do controlador (variável medida: composição; tempo de amostragem: 15 minutos)

Na Tabela 8.10, comparam-se os resultados de malha aberta ($RR = 2$ e $RR = 8$) com os resultados de malha fechada. A recuperação do componente mais volátil e a produtividade foram bastante similares entre os controladores PID e DMC, mostrando que com a operação em malha fechada obteve-se melhores produtividades com recuperações equivalentes ao caso de malha aberta onde $RR = 8$.

Estes resultados mostram que a temperatura pode ser usada como variável de medida ao invés da composição, visto que a temperatura é mais facilmente medida (a um custo baixíssimo) quando comparada como a medida de composição. Resultados de simulações mostraram que para a recuperação do componente intermediário, o uso da temperatura como variável de medida, não foi tão bom quanto o uso da composição, visto que a malha fechada pode se tornar instável. Deve-se salientar que todos os resultados aqui apresentados são para uma mistura ideal e, quando se considera a separação de misturas

não ideais, malhas de controle baseadas na medida de temperatura precisam ser melhor investigadas.

Tabela 8.10. Resultados para o controle de temperatura usando o controle PID e malha aberta com razão de refluxo (RR) constante.

Controle	Componente Mais volátil		Componente Intermediário	
	Produtividade (mole/h)	Recuperação (%)	Produtividade (mole/h)	Recuperação (%)
PID*	8318,02	96,64	4483,57	69,38
Malha Aberta				
RR = 2	14809,72	73,69	13703,81	6,20
RR = 8	4859,57	97,48	4483,09	71,94

$$*K_C = 10; \tau_I = 5, \tau_D = 1.0 \cdot 10^{-4}$$

8.4.4. Controle Adaptativo

A estratégia de controle utilizada neste trabalho foi a abordagem usando reguladores auto-ajustáveis (*Self Tuning Regulator*). Supôs-se, primeiramente, que a relação entre a variável de saída (composição de destilado) e a de entrada (razão de refluxo) é uma função de transferência de 1ª ordem com um atraso de tempo, como foi proposto por Sastry *et al.* (1977). Esta função de transferência no domínio de Laplace foi então discretizada, gerando o modelo de controle do processo. Este modelo tem que ser atualizado a cada tempo de amostragem de forma a descrever a dinâmica do processo em questão. As estimativas de parâmetros são calculadas usando pesos exponenciais relacionados aos dados passados. A lei de controle resultante é:

$$u(t) = \frac{1}{\hat{\beta}_0} [\hat{\alpha}_1(t)y(t) + \hat{\alpha}_2(t)y(t-1)] - \hat{\beta}_1(t)u(t-1) - \hat{\beta}_2(t)u(t-2) \quad (6.14)$$

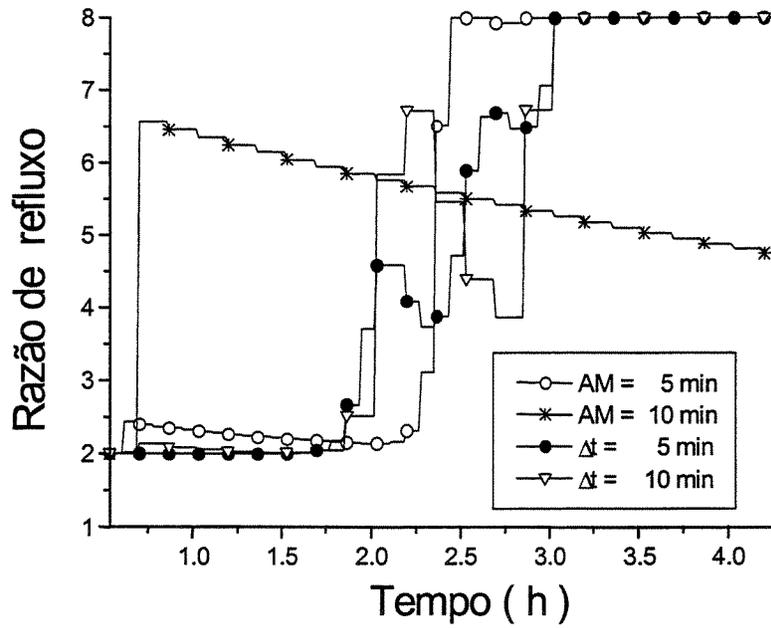
onde

- $u(t)$ = Variável de entrada manipulada (razão de refluxo na forma desvio) no tempo de amostragem, t ;
 $y(t)$ = Variável de saída controlada (composição na forma desvio) no tempo de amostragem t ;
 β_0 = Parâmetro do controlador;
 $\hat{\beta}_i, \hat{\alpha}_i$ = Parâmetros do modelo estimados on-line;
 t = Tempo, (min).

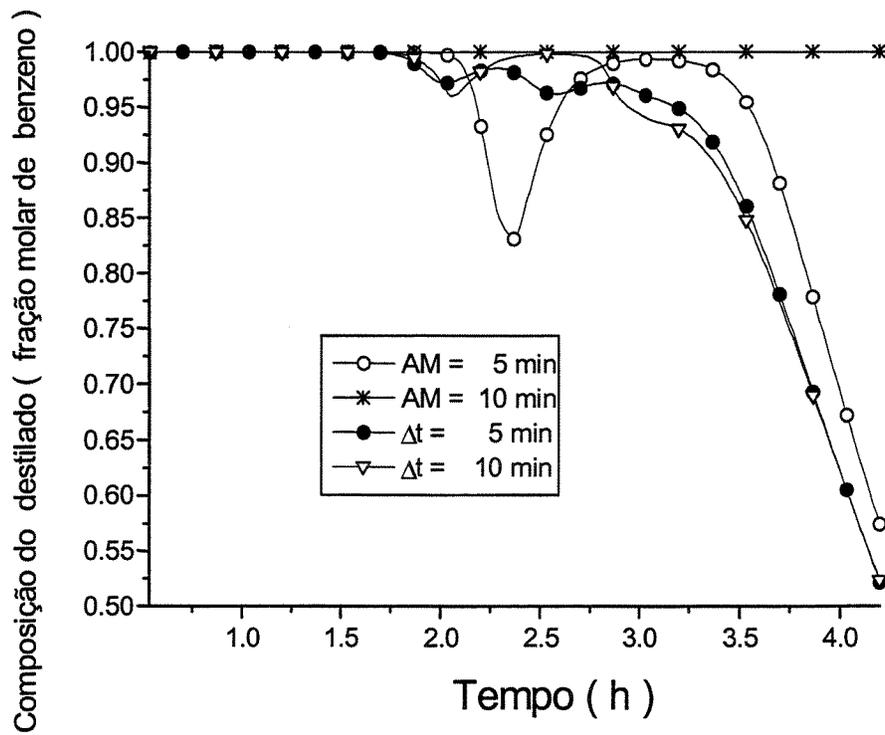
Os resultados para a estratégia de controle adaptativo são mostrados na Tabela 8.11 e na Figura 8.14. Quando se usou um tempo de amostragem de 5 minutos, os atrasos de medida de composição de até 5 min, não tiveram grandes influências nos resultados (ver Tabela 8.11). O mesmo, não se pode afirmar para o controle com tempo de amostragem e atraso de medida de 10 minutos. Neste caso a produtividade decresceu significativamente (de 8638 para 6502 mol/h para o produto rico em benzeno).

Para os outros casos observa-se na Figura 8.14 b que a composição de benzeno no destilado ficou mantida próxima de 1 por um período de 2 horas. Depois deste período, a composição começou a cair e o controlador começou a manipular a razão de refluxo para tentar manter a composição o mais alta durante o maior tempo possível.

Isto leva a maiores quantidades de benzeno no destilado (maiores recuperações), mas nem sempre a altas produtividades (Dechechi *et al.*, 1998). Deve-se salientar que a lei de controle foi a mesma durante ambos os casos, com atraso e sem atraso de medida. Se for necessário, numa situação prática, trabalhar com atraso de medida maiores, outra lei de controle STR precisaria ser empregada de forma a levar em contas estes atrasos maiores.



(a) perfil da variável manipulada



(b) perfil da composição de destilado

Figura 8.14. Resposta das simulações para o comportamento de malha fechada usando o STR para diferentes tempos de amostragem (Δt) e atraso de medida (AM) (variável medida: composição).

Tabela 8.11 – Resultados do controlador adaptativo STR.

Tempo de amostragem	5 min.		10 min.	
	0 min	5 min	0 min	10 min
Atraso de medida				
Produtividade do produto 1 (mole/h)	8673	8523	8638	6502
Recuperação de benzeno (%)	95	95	95	95
Produtividade do produto 2 (mole/h)	6962	6611	6458	5454
Recuperação de tolueno (%)	66	66	74	73

8.5. CONCLUSÕES

Foi desenvolvido e apresentado um software versátil e interativo que pode ser extensivamente usado tanto na academia ou na indústria. Ele fará parte do sistema especialista em desenvolvimento para avaliação da separação onde a recuperação de solventes e a separação pequenas quantidades de produtos se façam necessárias.

Na indústria este software pode ser usado para treinamento de operadores, para otimizar condições operacionais de processo e para melhorar o desempenho do controle do processo. Devido às características multipropósito da destilação em batelada, estudos sobre a viabilidade da separação de diferentes misturas podem ser avaliados antes de um procedimento prático industrial, evitando perdas de tempo, consumo de matérias-primas, consumo de energia e problemas ambientais.

Na academia o software pode ser usado tanto para pesquisas como especificamente para cursos. Os estudantes podem facilmente usar este software de forma a observar diferenças de comportamento entre a operação em malha aberta e em malha fechada de uma coluna de destilação em batelada.

As capacidades de simulação do software apresentado incluem três estratégias de controle, a saber, PID clássico, DMC (*Dynamic Matrix Control*) e a STR (*Self Tunning Regulator*). A variáveis controladas foram a perda de pressão (só PID clássico) e a composição de destilado (PID, DMC e STR). O desempenho das três estratégias de controle empregadas foi muito bom, visto que os controladores foram capazes de manipular a razão de refluxo de forma a obter boas recuperações dos componentes a altas

produtividades (mol/h) quando comparadas com a operação a refluxo constante, a forma mais fácil de operação industrial e considerada neste trabalho como malha aberta.

Quando for usado o controlador DMC em uma coluna de destilação em batelada para a recuperação de um ou mais componentes, o controlador precisa ser ajustado para a retirada de cada um dos componentes, obtendo-se assim a melhor condição possível de operação em malha fechada. O uso de um mesmo conjunto de parâmetros para o controlador na recuperação de todos os componentes também é possível, mas neste caso existe uma perda na capacidade de recuperação, principalmente na produtividade. Além disto, foi considerado neste trabalho diversos tempos de amostragem para a variável medida e foi mostrado que o controlador precisa ser definido usando o pior caso, a saber, o maior tempo de amostragem.

Usando o controlador STR o modelo de controle foi adequado para situações onde os atrasos de medida não são muito longos, isto é, as perdas de recuperação e de produtividade foram pequenas. Para atrasos de medida mais longos onde as perdas foram maiores, portanto uma outra lei de controle deve ser aplicada.

Visto que o ajuste de controladores para a destilação em batelada não é uma tarefa muito fácil de se fazer na prática, o software UNIBATC mostrou ser uma ferramenta valiosa e confiável para o ajuste destes tipos de controladores. Esta é uma operação unitária um tanto complexa e embora seja uma coluna destilação, o comportamento da mesma é completamente diferente quando comparada a uma coluna de destilação contínua.

CAPÍTULO 9.

CONCLUSÕES

As contribuições e as potencialidades do programa desenvolvido em termos da caracterização de misturas, na predição de azeótropos, análise de superfícies de equilíbrio, recomendação de processos de separação e a determinação da melhor seqüência de colunas de destilação foram mostradas. Uma visão ampla do programa foi feita no capítulo 6, que permite uma análise do potencial da ferramenta desenvolvida.

O desenvolvimento de rotinas em FORTRAN, acopladas ao ambiente interativo, mostrou-se bastante eficaz. O trabalho repetitivo para a análise da mistura foi minimizado com o uso do programa elaborado. Toda a caracterização termodinâmica da mistura e a predição da existência de azeótropos foi realizada utilizando rotinas próprias e que devido ao ambiente amigável criado, tornam-se facilmente acessíveis, utilizando-se um navegador de internet para visualizá-las.

O programa elaborado, baseando-se nas propriedades físico-químicas dos componentes puros e nas volatilidades relativas dos binários presentes na mistura inicial, mostra as possibilidades de processos de separação mais viáveis do ponto de vista das propriedades físico-químicas para a obtenção dos componentes.

Como resultado da metodologia proposta para verificar a existência de azeótropos, pode-se dizer que a mesma sempre indicou a presença destes, quando de fato estes existem experimentalmente. Os valores preditos para as temperaturas e composições dos azeótropos binários e ternários, homogêneos ou heterogêneos para diferentes sistemas foram apresentados e, na maior parte dos casos, estes valores não se desviaram significativamente dos valores experimentais. A melhor concordância entre valores preditos e experimentais ocorreu para a temperatura do azeótropo, mas para as composições os desvios ficaram abaixo de 10% para a maioria das misturas.

O parâmetro proposto (**CES modificado**) para conduzir o sequenciamento de colunas de destilação foi testado com diferentes misturas e nos casos estudados levou o sequenciamento diretamente ou próximo à rota ótima com confiabilidade. Este parâmetro

deve ser utilizado para auxiliar o engenheiro que está trabalhando com o *software*. Mostrou-se que se deve tomar cuidado ao se usar modelos aproximados para a simulação das colunas, pois, em alguns casos, mesmo com mistura ideal, os resultados obtidos foram totalmente diferentes dos obtidos usando modelos rigorosos.

Foi desenvolvido e apresentado um software versátil e interativo para a simulação e controle de colunas de destilação em batelada. Ele fará parte do sistema especialista em desenvolvimento para avaliação da separação onde a recuperação de solventes e a separação de pequenas quantidades de produtos se façam necessárias.

Três técnicas foram implementadas para o controle da composição no topo ou da temperatura em um prato especificado da coluna, a saber PID clássico, controle por matriz dinâmica (*DMC - Dynamic Matrix Control*) e regulação auto-ajustável (*STR - Self Tunning Regulator*). Os desempenhos das três técnicas foram semelhantes e satisfatórios, porém devido às características intrínsecas do processo de destilação em batelada, os resultados foram melhores quando se utilizou os parâmetros para cada uma das etapas de retirada de produtos.

Também foram analisados diferentes tempos de amostragem para simular falhas de sensores e analisar a robustez das técnicas de controle utilizadas. Tanto o controle por matriz dinâmica ou o controle adaptativo tiveram bons desempenhos, isto é, manipularam a variável manipulada de forma a manter a variável controlada dentro dos valores desejados.

Visto que o ajuste de controladores para a destilação em batelada não é uma tarefa muito fácil de se fazer na prática, o software UNIBATC mostrou ser uma ferramenta valiosa e confiável para o ajuste destes tipos de controladores. Esta é uma operação unitária um tanto complexa e embora seja uma coluna de destilação, o comportamento da mesma é completamente diferente quando comparada a uma coluna de destilação contínua.

O objetivo do desenvolvimento deste software, neste trabalho de tese, não é a completa solução para a síntese da separação de uma certa mistura, mas sim colaborar interativamente, usando as informações disponíveis, com os engenheiros de processo nas tomadas de decisão durante o projeto e avaliação de unidades de separação. Dando continuidade ao desenvolvimento aqui mostrado, pretende-se que no LDPS se tenha, num futuro próximo, um sistema especialista bastante eficiente para a síntese completa de processos de separação.

9.1. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O trabalho desenvolvido nesta tese abre um leque muito grande de atividades de pesquisa que podem e devem ser desenvolvidas. Como este foi um trabalho de base para a criação de um sistema especialista aplicado à engenharia de separações, os trabalhos futuros devem envolver a implementação de outras operações unitárias de separação durante a síntese do processo.

Em um primeiro momento, outros processos de destilação, tais como destilações azeotrópica e extrativa, poderão ser incorporados. Como o programa elaborado já disponibiliza um grande número de informações sobre a mistura a ser separada, a seleção de solventes, etapa imprescindível nestes processos com agente de separação mássico, deve ser facilitada e, além disto, uma nova abordagem para a seleção dos solventes poderá ser proposta e implementada.

Dando continuidade à utilização de outros processos pelo sistema especialista, o processo de extração líquido-líquido poderá ser implementado, tendo em mente que tanto na extração quanto nos processos de destilação com agente de separação mássico, é necessário após a separação dos produtos, uma etapa de recuperação do solvente adicionado.

Em uma segunda etapa, outros processos de separação poderão ser considerados pelo sistema especialista, a adsorção e a separação por membranas. A implementação destes dois processos será um pouco mais demorada, devido ao fato de que o ASPEN PLUS na sua versão básica não simula processos de adsorção, nem de separação por membranas. Aliás, para a adsorção existe um pacote específico, que tem o mesmo custo do ASPEN PLUS básico. Deverão ser introduzidas rotinas desenvolvidas, em FORTRAN, para a utilização destes dois processos de separação, inclusive levando em conta os custos dos equipamentos, das utilidades, dos adsorventes e das membranas.

Pode-se propor um novo coeficiente da facilidade da separação, envolvendo características dos novos processos de separação considerados. Além da recomendação dada pela propriedade físico-química relacionada com o processo de separação, o parâmetro a ser proposto deve levar em conta as diferenças entre os processos de separação.

Outras técnicas de otimização poderão ser exploradas quando diferentes processos de separação estiverem implementados.

A destilação em batelada é, sem dúvida, um processo que está sendo revitalizado, e, portanto, deve-se continuar a estudar este processo de separação, devido, principalmente, à sua característica multipropósito. O desempenho deste processo está bastante relacionado ao controle da operação, como foi observado neste trabalho de tese. Então, poder-se-á continuar a investigar o uso de novas técnicas e estratégias de controle para otimizar a operação deste tipo de equipamento e, além disso, poder-se-á explorar o uso da destilação em batelada na separação de misturas não ideais.

Referências Bibliográficas

- ANDRADE, MARIA HELENA CANO, Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor de Misturas Ternárias: Algoritmo de Cálculo e Aspectos, Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade de Campinas. 1991 Tese (Mestrado)
- ASSIS, A. J., LUZ JR, L. F. L., DECHECHI, E. C., MACIEL, M. R. W. , MACIEL FILHO, R. A software for interactive simulation and predictive control of a batch distillation column, *Proceedings of ECCE1 - 1st. European Congress of Chemical Engineering*, Florença, Italia, Maio. 1997.
- ASSIS, A. J., LUZ JR, L.F.L., MACIEL, M.R.W., MACIEL FILHO, R., A Software for Interactive Simulation and Control of a Batch Distillation Column, *XII Congresso Nacional de Ingenieria Quimica*, Santa Maria, Chile, 9 a 11 de Octubre, Tomo II p. 612 - 617, 1996.
- BARNICKI, S. D., FAIR, J. R. Separation System Synthesis: A Knowledge-Based Approach. 1. Liquid Mixture Separations *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.29, p. 421-432, 1990.
- BARNICKI, S. D., FAIR, J. R. Separation System Synthesis: A Knowledge-Based Approach. 2. Gas/Vapor Mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.31, p. 1679-1694, 1992.
- BARTHOLOMEV-BIGGS M. C., *Constrained Minimisation using Recursive Equality Quadratic Programming in Numerical Methods for Non-linear Optimisation*, Ed. F.A. Lootsma, Academic Press, 1972.
- BEK-PEDERSEN, E., GANI, R. e LEVAUX, O. Determination of optimal energy efficient separation schemes based on driving forces. *Computers Chem. Engng*, v.24, p. 253-259, 1999.
- BOSTON, J. F., BRITT, H. I., JIRAPONGPHAN, S. AND SHAH, V. B., An Advanced System for the Simulation of Batch Distillation Operations, *Chemical Process Design*, p. 203-237, 1980.
- BRUNET, J. C. M.S. Thesis, Virginia Polytechnic Institute and State University, VA, 1992.

- BRUNET, J., LIU, Y. A. Studies in Chemical Process Design and Synthesis. 10. An Expert System for Solvent Based Separation Process Synthesis. *Ind Eng. Chem Res.*, v.32, p. 315-334, 1993.
- CHENG, S.H. e LIU, Y. A. Studies in Chemical Process Design and Synthesis. 8. A Simple Heuristic Method for Initial Sequences for Sloppy multicomponent Separations, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 27, p.2304-2312, 1988.
- CIRNE, MARIA IZABEL SANTOS. *Modelagem e Simulação do Processo de Destilação Extrativa em Batelada*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade de Campinas. 1998 Tese (Mestrado)
- CUILLE, P. E. & REKLAITIS, G. V., Dynamic Simulation of Multicomponent Batch Rectification With Chemical Reactions, *Comput. Chem. Engng.*, v.10, n.4, p.389-398 1986.
- DECHECHI, E.C., *Controle DMC de um processo de fermentação alcoólica contínua em escala industrial*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1996. Tese (Mestrado)
- DECHECHI, E.C., LUZ JR., L. F. L., ASSIS, A. J., MACIEL, M. R. W., MACIEL FILHO, R., Interactive Supervision of Batch Distillation with Advanced Control Capabilities, *Computers chem. Engng*, v., Suppl., p.S867-S870, 1998.
- ECKERT, E.; KUBICEK, M. Computing Heterogeneous Azeotropes in Multicomponent Mixtures. *Computers Chem. Engng*, v. 21, p. 347-350, 1997.
- FRAGA, E. S. e MATIAS, T. R. S. Synthesis and optimization of a nonideal distillation system using a parallel genetic algorithm. *Computers Chem. Engng*, v.20, p.579-584, 1996.
- FRESHWATER, D. C., HENRY, B. D. Optimal Configuration of Multicomponent Distillation Systems, *Chem. Eng.*, p.533, 1975.
- GUTERMUTH, W., Applications of Computer Integrated Process Engineering in the Chemical Industry, *ESCAPE-1*, S15, *Supplement to Computers & Chem. Engng*. 1992.
- HENDRY, J. E. e HUGHES, R. R., Generating Separation Process Flowsheets, *Chem. Eng. Prog.*, 68 (6), p.71, 1972.

- HENLEY, E. J. e SEADER, J. D., *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, New York, Wiley, 1981.
- HENLEY, E. J., ROSEN, E. M., *Calculo de balances de materia y energia*, John Wiley & Sons, 1969.
- HORSLEY, L.H., *Azeotropic data - III. Advances in Chemistry Series 116*, American Chemical Society, Washington, D.C., 1973.
- HOSTRUP, M., HARPER, P.M. e GANI, R. Design of environmentally benign processes: integration of solvent design and separation process synthesis *Computers Chem. Engng*, v.23, p.1395-1414, 1999.
- HYSIM™, comercial simulator; Manuais, 1996
- JAKSLAND, C. A., GANI, R., LIEN, K. M. Separation Process Design and Synthesis Based on Thermodynamic Insights. *Chemical Engng. Science*, v.50, 3, p.511-530, 1995.
- KING, C. J. *Separation Processes*, New York, 2^a ed., McGraw-Hill:, 1980.
- LIU, Y. A., QUANTRILLE, T. E., CHENG, S. Studies in Chemical Process Design and Synthesis, 9, A unifying Method for the Synthesis of Multicomponent Separation Sequences with Sloppy Product Streams. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.29, p.2227-2241, 1990.
- LUYBEN, W. L., *Process Modelling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, 2nd ed., McGraw-Hill, USA 1989.
- LUZ JR, L. F. L. AND WOLF-MACIEL, M. R, Separation Synthesis Problem: A Detailed Solution Using A Tutorial-Expert System, *Proceedings do PRESS'99*, maio, Budapest, Hungria, 1999.
- LUZ JR, L.F.L., DECHECHI, E.C., ASSIS, A.J., WOLF-MACIEL, M.R.W., MACIEL FILHO, R., Application of Different Control Techniques in the Supervision of the Batch Distillation Process. *Proceedings of the XVIII Interamerican Congress of Chemical Engineering em CD-ROM*, ISBN 0-9650084-0-1, 6-10 Dezembro, San Juan, Porto Rico, USA, 1998.

- LUZ JR, L.F.L., VASCONCELOS, C.J.G., PERIOTO, F.R. ,WOLF-MACIEL, M.R.,
Algoritmo para Cálculo *Flash* Trifásico e Azeótropo Ternário Heterogêneos.
*Proceedings of the XVIII Interamerican Congress of Chemical Engineering em CD-
ROM*, ISBN 0-9650084-0-1, 6-10 Dezembro, San Juan, Porto Rico, USA, 1998b.
- LUZ JR., L. F. L. AND MACIEL, M. R. W., Numerical Methods for Simulation of Batch
Distillation Columns: Stiff Systems, *Brazilian Journal of Chemical Engng*, v.12, 2
1995.
- LUZ JR., L. F. L., ASSIS, A. J., DECHECHI, E. C., MACIEL, M. R. W., e MACIEL
FILHO, R. Control of a Batch Distillation Column using Dynamic Matrix Control
(DMC) Technique, *1^{er} Congreso de Ingenieria de Procesos del Mercosul*,
ENPROMER'97, 1-4 Setembro, Bahia Blanca, Argentina, 1997.
- LUZ JR., L. F. L., *Modelagem e Simulação de Colunas de Destilação Multicomponente em
Batelada*. Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de
Campinas. 1993 Tese (Mestrado).
- MACIEL, M. R. W., VASCONCELOS, C. J. G., Comparação de Três Processos Diferentes
para a Separação de Misturas Altamente Não-Ideais. *12o Congresso Brasileiro de
Engenharia Química*, 14 a 17 de Setembro, Porto Alegre RS, 1998, CDROM.
- MACIEL, M.R.W., PhD Thesis, Department of Chemical Engineering, University of
Leeds, England,UK., 1989.
- MAURATH, P.R., MELLICHAMP, D. A. AND SEBORG, D. E., Predictive Controller
design for single-input/single-output (SISO) systems, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.27, 6,
p.956-962, 1988.
- MOTARD, R. L., WESTERBERG, A. W., Process Synthesis, *AIChE Advanced Seminar
Lecture Notes*, New York, 1978.
- MÜLER, D.; MARQUARDT, W.; HAUSCHILD,T.; RONGE, G.; STEUDE, H.;
Experimental validation of an equilibrium stage model for three-phase distillation.
distillation and Absorption, v.1, p. 149-159., 1997.
- NADGIR, V. M., LIV, Y. A. Studies in Chemical Process Desing and Systhems Part 5.
AIChE J., v.29, 6, p.926-936, 1983.

- NATH, R., MOTARD, R. L. Evolutionary Synthesis of Separation Processes, 85th National Meeting of *AIChE*, 1978.
- NATH, R., MOTARD, R.L. Evolutionary Synthesis of Separation Process. *AIChE J.*, v.27, 4, p.578, 1981.
- NELSON, P. A. , Rapid phase determination in multiple-phase *flash* calculations, *Computers Chem. Eng.*, v.11, p.581-591, 1987.
- NISHIDA, N, STEPHANOPOULOS, G., WESTERBERG, A.W. A Revision of Process Synthesis, *AIChE Journal*, v.27, 3, p.321-351, 1981.
- PERRY, R. H. e GREEN, D. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. Singapura: 6a. Ed., McGraw-Hill, 1984.
- PHAM, H. N. & DOHERTY, M. F., Design and synthesis of Heterogeneous Azeotropic Distillation - I. Heterogeneous Phase Diagrams, *Chemical Engng. Science*, v.45, p.1823-1836, 1990.
- PRAUSNITZ, J.M., BUNZ, A.P., DOHRN, R., Three-phase *flash* calculations for multicomponent systems, *Comp. Chem. Eng.*, v.15, n.1, p. 47-51, 1991.
- QIAN, Y., LIEN, K. M. Rule Base Synthesis of Separation Systems by Predictive Best First Search wit Rules Represented as Trapezoidal Numbers. *Computers Chem. Engng*, v.19, 1, p.1185-1205, 1995.
- QUANTRILE, T. E. AND LIU, Y. A., *Artificial Intelligence in Chemical Engineering*, San Diego: Academic Press, San Diego, USA, 1991.
- RONG, B., KRASLAWSKI, A. e NYSTRÖM, L. The synthesis of thermally coupled distillation flowsheets for separations of five-component mixtures. *Computers Chem. Engng*, v.24, p.247-252, 2000.
- RONG, B., KRASLAWSKI, A. e NYSTRÖM, L. Design and synthesis of multicomponent thermally coupled distillation flowsheets. *Computers Chem. Engng*, v.25, p.807-820, 2001.
- RUDD, D. F., POWERS, G. J., SIROLA, J. J. *Process Synthesis*. Prentice-Hall: Englewood Cliff., NJ, 1973.

- SASTRY, V. A., SEBORG, D. E. AND WOOD, R. K., Self-Tuning Regulator Applied to a Binary Distillation Column. *Automatica*, v.13, p.417-424, 1977.
- SEADER, J. D. e WESTERBERG, A. W., A Combined Heuristic and Evolutionary Strategy for the Synthesis of Simple Separation Sequences, *AIChE J.*, v.23, p.951, 1977.
- SEBORG, D.E., EDGAR, T.F. AND MELLICHAMP, D.A., *Process Dynamics and Control*, John Wiley & Sons, USA 1989.
- SØRENSEN, E., *Studies on Optimal Operation and Control of Batch Distillation Columns*, Ph.D. Thesis, University of Trondheim, Norway (1994).
- SOUDERS, M., The Countercurrent Separation Processes, *Chem. Eng. Prog.*, v.62 (2), 75, 1964.
- SULZER Brasil S.A., Catalogue.
- THOMPSON, R. W., KING, C. J. Synthesis of Separation Schemes. *AIChE J.*, v.8, 5, p.941, 1972.
- VAN WINKLE, M., *Distillation*, New York: McGraw-Hill, 1967.
- WAHNSCHAFFT, O. M., JORAIN, T. P. e WESTERBERG, A. W. Split: A separation Process Designer. *Computers Chem. Engng*, v.15, 8, p.565-581, 1991.
- WALAS, S. M. *Phase Equilibria in Chemical Engineering*: Butterworth: MA, 1985.
- WANG, K., QIAN, Y., YUAN, Y., YAO, P. Synthesis and optimization of heat integrated distillation systems using an improved genetic algorithm. *Computers Chem. Engng*, v.23, p.125-136, 1998.
- WANKAT, P. C. *Rate-Controlled Separations* New York: Elsevier Applied Science, 1990.
- WU, J.S., BISHNOI, P.R., An algorithm for three phase equilibrium calculations, *Comp. Chem. Eng.*, v.10, n.3, p. 269-275, 1986.
- ZDRAVKO, K. , GROSSMANN, L. E. Multilevel-hierarchical MINLP synthesis of process flowsheets. *Computers Chem. Engng*, v.21, p.421-426, 1997.

Apêndice A

Arquivo "Dados.html"

Data-Bank : PURECOMP Data-Bank number: 1
 Components number: 4

N-BUTANE	C4H10-1
N-PENTANE	C5H12-1
N-HEXANE	C6H14-1
N-HEPTANE	C7H16-1

Mixture: Ideal
 Solution: Concentrada
 Activity coefficient method: NRTL

ASPEN BINARY PARAMETERS:(*) estimated parameters

Component i	C4H10-1	C4H10-1	C4H10-1
Component j	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1 (*)
$a_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000	.000000
$a_{NRTL(j,i)}$.000000	.000000	.000000
$b_{NRTL(i,j)}$	-264.293300	52.951200	-288.488103
$b_{NRTL(j,i)}$	413.762600	-59.466300	357.051466
$c_{NRTL(i,j)}$.300000	.300000	.300000
$d_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000	.000000
$e_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000	.000000
$e_{NRTL(j,i)}$.000000	.000000	.000000
$f_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000	.000000
$f_{NRTL(j,i)}$.000000	.000000	.000000
$T_{lower(i,j)}$	298.150000	253.150000	.000000
$T_{upper(j,i)}$	298.150000	273.150000	1000.000000

Component i	C5H12-1	C5H12-1
Component j	C6H14-1	C7H16-1
$a_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000
$a_{NRTL(j,i)}$.000000	.000000
$b_{NRTL(i,j)}$	188.952700	-723.966700
$b_{NRTL(j,i)}$	-180.424900	1095.574500
$c_{NRTL(i,j)}$.300000	.160000
$d_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000
$e_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000
$e_{NRTL(j,i)}$.000000	.000000
$f_{NRTL(i,j)}$.000000	.000000
$f_{NRTL(j,i)}$.000000	.000000
$T_{lower(i,j)}$	298.150000	343.150000
$T_{upper(j,i)}$	341.350000	343.150000

Component i	C6H14-1
Component j	C7H16-1
$a_{NRTL(i,j)}$.000000
$a_{NRTL(j,i)}$.000000
$b_{NRTL(i,j)}$	48.073400
$b_{NRTL(j,i)}$	-56.201300
$c_{NRTL(i,j)}$.300000
$d_{NRTL(i,j)}$.000000
$e_{NRTL(i,j)}$.000000
$e_{NRTL(j,i)}$.000000

$f_{\text{NRTL}}(i,j)$.000000
$f_{\text{NRTL}}(j,i)$.000000
$T_{\text{lower}}(i,j)$	287.150000
$T_{\text{upper}}(j,i)$	371.750000

Arquivo "Flashres.html"

Flash Results of the initial mixture

Feed Coonditions:

Pressure (bar) = 2.0260
 Temperature (K) = 325.0000
 Flow-rate (kg-mol/h) = 100.0000

Flash Vessel Conditions:

Pressure (bar) = 1.0130
 Temperature (K) = 308.3425
 Vapour fraction = .1000
 Phase = 2

Component	Feed	Vapour	Liquid1	K ₁	Liquid2	K ₂
N-BUTANE	.25000	.68339	.20185	3.38570	.00000	.00000
N-PENTAN	.25000	.21696	.25367	.85528	.00000	.00000
N-HEXANE	.25000	.07726	.26919	.28702	.00000	.00000
N-HEPTAN	.25000	.02239	.27529	.08132	.00000	.00000
Flow-rate(KMOL/HR)	100.00000	10.00000	90.00000	-	.00000	-
Temperature(K)	325.00000	308.34251	308.34251	-	.00000	-
Pressure(Bar)	2.02600	1.01300	1.01300	-	.00000	-

Flash results of the initial mixture

Feed Coonditions:

Pressure (bar) = 2.0260
Temperature (K) = 325.0000
Flow-rate (kg-mol/h) = 100.0000

Flash Vessel Conditions:

Pressure (bar) = 1.0130
Temperature (K) = 313.4743
Vapour fraction = .2000
Phase = 2

Component	Feed	Vapour	Liquid1	K ₁	Liquid2	K ₂
N-BUTANE	.25000	.61653	.15837	3.89297	.00000	.00000
N-PENTAN	.25000	.25024	.24994	1.00121	.00000	.00000
N-HEXANE	.25000	.10104	.28724	.35178	.00000	.00000
N-HEPTAN	.25000	.03219	.30445	.10572	.00000	.00000
Flow-rate(KMOL/HR)	100.00000	20.00000	80.00000	-	.00000	-
Temperature(K)	325.00000	313.47427	313.47427	-	.00000	-
Pressure(Bar)	2.02600	1.01300	1.01300	-	.00000	-

Flash results of the initial mixture

Feed Coonditions:

Pressure (bar) = 2.0260
Temperature (K) = 325.0000
Flow-rate (kg-mol/h) = 100.0000

Flash Vessel Conditions:

Pressure (bar) = 1.0130
Temperature (K) = 341.7812
Vapour fraction = .9000
Phase = 2

Component	Feed	Vapour	Liquid1	K ₁	Liquid2	K ₂
N-BUTANE	.25000	.27356	.03794	7.21063	.00000	.00000
N-PENTAN	.25000	.26353	.12824	2.05512	.00000	.00000
N-HEXANE	.25000	.24770	.27074	.91496	.00000	.00000
N-HEPTAN	.25000	.21521	.56308	.38219	.00000	.00000
Flow-rate(KMOL/HR)	100.00000	90.00000	10.00000	-	.00000	-
Temperature(K)	325.00000	341.78121	341.78121	-	.00000	-
Pressure(Bar)	2.02600	1.01300	1.01300	-	.00000	-

Azeotropes Prediction

Binary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE

Pressure= .500 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-HEXANE

Pressure= .500 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-HEPTANE

Pressure= .500 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-PENTANE -N-HEXANE

Pressure= .500 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-PENTANE -N-HEPTANE

Pressure= .500 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= .500 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE -N-HEXANE

Pressure= .500 bar

Objective function value = .0000337

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE -N-HEPTANE

Pressure= .500 bar

Objective function value = .0001636

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= .500 bar

Objective function value = .0541283

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-PENTANE -N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= .500 bar

Objective function value = .0720896

There is not an azeotrope for the ternary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE

Pressure= 1.013 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-HEXANE

Pressure= 1.013 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-HEPTANE

Pressure= 1.013 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-PENTANE -N-HEXANE

Pressure= 1.013 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-PENTANE -N-HEPTANE

Pressure= 1.013 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= 1.013 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE -N-HEXANE

Pressure= 1.013 bar

Objective function value = .0000048

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE -N-HEPTANE

Pressure= 1.013 bar

Objective function value = .0086478

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= 1.013 bar

Objective function value = .1279929

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-PENTANE -N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= 1.013 bar

Objective function value = .0623831

There is not an azeotrope for the ternary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE

Pressure= 5.000 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-HEXANE

Pressure= 5.000 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-BUTANE -N-HEPTANE

Pressure= 5.000 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-PENTANE -N-HEXANE

Pressure= 5.000 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-PENTANE -N-HEPTANE

Pressure= 5.000 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Binary mixture: N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= 5.000 bar

There is not an azeotrope for the binary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE -N-HEXANE

Pressure= 5.000 bar

Objective function value = .0000525

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-PENTANE -N-HEPTANE

Pressure= 5.000 bar

Objective function value = .0027136

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-BUTANE -N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= 5.000 bar

Objective function value = .0796868

There is not an azeotrope for the ternary above

Ternary mixture: N-PENTANE -N-HEXANE -N-HEPTANE

Pressure= 5.000 bar

Objective function value = .0454198

There is not an azeotrope for the ternary above

Final Results

Information about azeotropes prediction complete results for azeotropes prediction

Pressure: .500 bar

Binary/Ternary	Prediction
N-BUTANE N-PENTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-PENTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-PENTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope

Pressure: 1.013 bar

Binary/Ternary	Prediction
N-BUTANE N-PENTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-PENTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-PENTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope

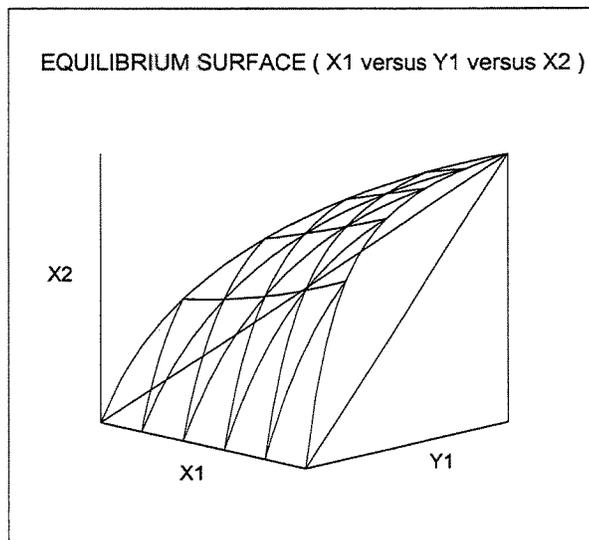
Pressure: 5.000 bar

Binary/Ternary	Prediction
N-BUTANE N-PENTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-PENTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-PENTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-BUTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEXANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-PENTANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope
N-HEXANE N-HEPTANE	There is not an azeotrope

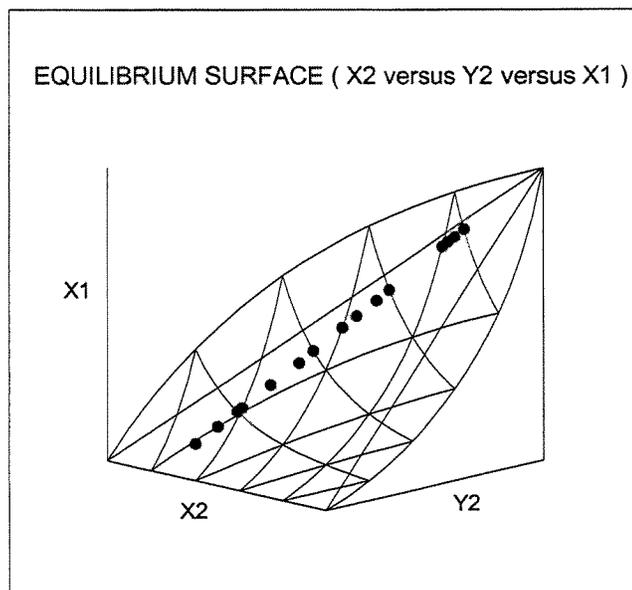
Superfícies de equilíbrio para o sistema n-butano; n-pentano e n-hexano

1 – n-butano 2 – n-pentano 3 – n-hexano

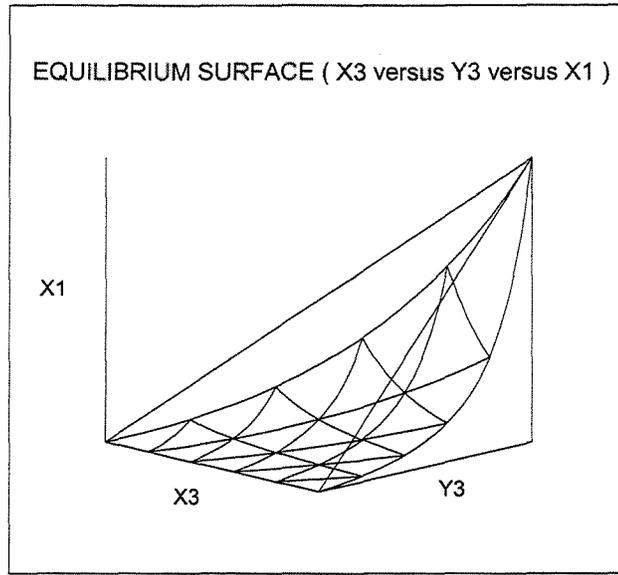
Arquivo: surf1.grf



Arquivo: surf2.grf



Arquivo: surf3.grf



Arquivo: "relsum.html"

"Relatório contendo as propriedades dos componentes, processos de separação recomendados, volatilidades relativas e o sequenciamento das colunas de destilação"

If you want you can go direct to summary of step [1](#) [2](#) [3](#) [4](#) [5](#)

Property Number	Property	Component i	Value for i	Component j	Value for j	Ratio P_i/P_j	Ratio P_j/P_i
1	DELTA	C4H10-1	.137785D+05	C5H12-1	.143805D+05	.958138	1.043691
1	DELTA	C4H10-1	.137785D+05	C6H14-1	.149000D+05	.924732	1.081395
1	DELTA	C4H10-1	.137785D+05	C7H16-1	.152000D+05	.906480	1.103168
1	DELTA	C5H12-1	.143805D+05	C6H14-1	.149000D+05	.965134	1.036125
1	DELTA	C5H12-1	.143805D+05	C7H16-1	.152000D+05	.946086	1.056987
1	DELTA	C6H14-1	.149000D+05	C7H16-1	.152000D+05	.980263	1.020134
2	DHVLB	C4H10-1	.224035D+08	C5H12-1	.258148D+08	.867855	1.152266
2	DHVLB	C4H10-1	.224035D+08	C6H14-1	.287861D+08	.778275	1.284893
2	DHVLB	C4H10-1	.224035D+08	C7H16-1	.318366D+08	.703703	1.421055
2	DHVLB	C5H12-1	.258148D+08	C6H14-1	.287861D+08	.896780	1.115101
2	DHVLB	C5H12-1	.258148D+08	C7H16-1	.318366D+08	.810853	1.233269
2	DHVLB	C6H14-1	.287861D+08	C7H16-1	.318366D+08	.904183	1.105971
3	MUP	C4H10-1	.000000D+00	C5H12-1	.000000D+00	.000000	.000000
3	MUP	C4H10-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	.000000	.000000
3	MUP	C4H10-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
3	MUP	C5H12-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	.000000	.000000
3	MUP	C5H12-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
3	MUP	C6H14-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000

4	PLXANT	C4H10-1	.663430D+02	C5H12-1	.787410D+02	.842547	1.186877
4	PLXANT	C4H10-1	.663430D+02	C6H14-1	.104650D+03	.633951	1.577408
4	PLXANT	C4H10-1	.663430D+02	C7H16-1	.878290D+02	.755366	1.323862
4	PLXANT	C5H12-1	.787410D+02	C6H14-1	.104650D+03	.752422	1.329041
4	PLXANT	C5H12-1	.787410D+02	C7H16-1	.878290D+02	.896526	1.115416
4	PLXANT	C6H14-1	.104650D+03	C7H16-1	.878290D+02	1.191520	.839264
5	RGYR	C4H10-1	.288600D-09	C5H12-1	.333700D-09	.864849	1.156272
5	RGYR	C4H10-1	.288600D-09	C6H14-1	.376900D-09	.765720	1.305960
5	RGYR	C4H10-1	.288600D-09	C7H16-1	.417300D-09	.691589	1.445946
5	RGYR	C5H12-1	.333700D-09	C6H14-1	.376900D-09	.885381	1.129458
5	RGYR	C5H12-1	.333700D-09	C7H16-1	.417300D-09	.799665	1.250524
5	RGYR	C6H14-1	.376900D-09	C7H16-1	.417300D-09	.903187	1.107190
6	TB	C4H10-1	.272650D+03	C5H12-1	.309220D+03	.881735	1.134128
6	TB	C4H10-1	.272650D+03	C6H14-1	.341880D+03	.797502	1.253915
6	TB	C4H10-1	.272650D+03	C7H16-1	.371580D+03	.733759	1.362846
6	TB	C5H12-1	.309220D+03	C6H14-1	.341880D+03	.904469	1.105621
6	TB	C5H12-1	.309220D+03	C7H16-1	.371580D+03	.832176	1.201669
6	TB	C6H14-1	.341880D+03	C7H16-1	.371580D+03	.920071	1.086873
7	TPT	C4H10-1	.134860D+03	C5H12-1	.143420D+03	.940315	1.063473
7	TPT	C4H10-1	.134860D+03	C6H14-1	.177830D+03	.758365	1.318627
7	TPT	C4H10-1	.134860D+03	C7H16-1	.182570D+03	.738676	1.353774
7	TPT	C5H12-1	.143420D+03	C6H14-1	.177830D+03	.806501	1.239925
7	TPT	C5H12-1	.143420D+03	C7H16-1	.182570D+03	.785562	1.272974
7	TPT	C6H14-1	.177830D+03	C7H16-1	.182570D+03	.974037	1.026655
8	VOLREL	C4H10-1	.000000D+00	C5H12-1	.000000D+00	3.407968	.293430

8	VOLREL	C4H10-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	8.890842	.112475
8	VOLREL	C4H10-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	22.310139	.044823
8	VOLREL	C5H12-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	2.614465	.382487
8	VOLREL	C5H12-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	6.230894	.160491
8	VOLREL	C6H14-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	2.225185	.449401
9	VOLRE2	C4H10-1	.000000D+00	C5H12-1	.000000D+00	.000000	.000000
9	VOLRE2	C4H10-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	.000000	.000000
9	VOLRE2	C4H10-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
9	VOLRE2	C5H12-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	.000000	.000000
9	VOLRE2	C5H12-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
9	VOLRE2	C6H14-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
10	BETALL	C4H10-1	.000000D+00	C5H12-1	.000000D+00	.000000	.000000
10	BETALL	C4H10-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	.000000	.000000
10	BETALL	C4H10-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
10	BETALL	C5H12-1	.000000D+00	C6H14-1	.000000D+00	.000000	.000000
10	BETALL	C5H12-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000
10	BETALL	C6H14-1	.000000D+00	C7H16-1	.000000D+00	.000000	.000000

Binary: N-BUTANE -N-PENTANE

Property	Ratio P_i/P_j	Property Number	Process	Process	Process	Process
BETALL	.0000	10	-	-	-	-
VOLRE2	.0000	9	-	-	-	-
MUP	.0000	3	-	-	-	-
DELTA	1.0437	1	-	-	-	-
TPT	1.0635	7	-	-	-	-
TB	1.1341	6	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
DHVLB	1.1523	2	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
RGYR	1.1563	5	-	-	-	-
PLXANT	1.1869	4	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
VOLREL	3.4080	8	Distillation	-	-	-

Binary: N-BUTANE -N-HEXANE

Property	Ratio P_i/P_j	Property Number	Process	Process	Process	Process
BETALL	.0000	10	-	-	-	-
VOLRE2	.0000	9	-	-	-	-
MUP	.0000	3	-	-	-	-
DELTA	1.0814	1	-	-	-	-
TB	1.2539	6	-	-	-	-
DHVLB	1.2849	2	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
RGYR	1.3060	5	-	-	-	-
TPT	1.3186	7	-	-	-	-
PLXANT	1.5774	4	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
VOLREL	8.8908	8	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-

Binary: N-BUTANE -N-HEPTANE

Property	Ratio P_i/P_j	Property Number	Process	Process	Process	Process
BETALL	.0000	10	-	-	-	-
VOLRE2	.0000	9	-	-	-	-
MUP	.0000	3	-	-	-	-
DELTA	1.1032	1	-	-	-	-
PLXANT	1.3239	4	-	-	-	-
TPT	1.3538	7	-	-	-	-
TB	1.3628	6	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
DHVLB	1.4211	2	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
RGYR	1.4459	5	-	-	-	-
VOLREL	22.3101	8	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-

Binary: N-PENTANE -N-HEXANE

Property	Ratio P_i/P_j	Property Number	Process	Process	Process	Process
BETALL	.0000	10	-	-	-	-
VOLRE2	.0000	9	-	-	-	-
MUP	.0000	3	-	-	-	-
DELTA	1.0361	1	-	-	-	-
TB	1.1056	6	-	-	-	-
DHVLB	1.1151	2	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
RGYR	1.1295	5	-	-	-	-
TPT	1.2399	7	-	-	-	-
PLXANT	1.3290	4	Distillation	<i>Flash Operation</i>	-	-
VOLREL	2.6145	8	Distillation	-	-	-

Binary: N-PENTANE -N-HEPTANE

Property	Ratio P_i/P_j	Property Number	Process	Process	Process	Process
BETALL	.0000	10	-	-	-	-
VOLRE2	.0000	9	-	-	-	-
MUP	.0000	3	-	-	-	-
DELTA	1.0570	1	-	-	-	-
PLXANT	1.1154	4	-	-	-	-
TB	1.2017	6	Distillation	Flash Operation	-	-
DHVLB	1.2333	2	Distillation	Flash Operation	-	-
RGYR	1.2505	5	-	-	-	-
TPT	1.2730	7	-	-	-	-
VOLREL	6.2309	8	Distillation	Flash Operation	-	-

Binary: N-HEXANE -N-HEPTANE

Property	Ratio P_i/P_j	Property Number	Process	Process	Process	Process
BETALL	.0000	10	-	-	-	-
VOLRE2	.0000	9	-	-	-	-
MUP	.0000	3	-	-	-	-
DELTA	1.0201	1	-	-	-	-
TPT	1.0267	7	-	-	-	-
TB	1.0869	6	Distillation	Flash Operation	-	-
DHVLB	1.1060	2	Distillation	Flash Operation	-	-
RGYR	1.1072	5	-	-	-	-
PLXANT	1.1915	4	Distillation	Flash Operation	-	-
VOLREL	2.2252	8	Distillation	-	-	-

Relative Volatilities (minimum and maximum values) at feed conditions

Component 1	Component 2	Relative volatility	Relative volatility	Relative volatility
		Maximum value	Minimum value	Medium value
N-BUTANE	N-PENTANE	3.733	3.253	3.408
N-BUTANE	N-HEXANE	12.783	6.529	8.891
N-BUTANE	N-HEPTANE	46.810	11.977	22.310
N-PENTANE	N-HEXANE	2.953	2.381	2.614
N-PENTANE	N-HEPTANE	8.773	5.499	6.231
N-HEXANE	N-HEPTANE	2.397	2.089	2.225

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 1	23.75000	1.25000	.00000	.00000	25.00000
Product 2	1.25000	22.50000	1.25000	.00000	25.00000
Product 3	.00000	1.25000	22.50000	1.25000	25.00000
Product 4	.00000	.00000	1.25000	23.75000	25.00000
TOTAL	25.00000	25.00000	25.00000	25.00000	100.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Best Results classified using CES
Products Separation

Products	CES	Light Key	Heavy Key	N _{min}	Actual Stages	Min. Reflux	Actual Reflux	Dist/Feed	Split
1 2 3 and 4	97.14	C4H10-1	C5H12-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2 3 4	71.43	C6H14-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 and 3 4	51.01	C4H10-1	C5H12-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 and 3 4	41.43	C6H14-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 and 3 4	24.79	C4H10-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 and 3 4	21.14	C4H10-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 and 3 4	19.04	C5H12-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 and 3 4	12.77	C5H12-1	C6H14-1	7.90 ⁽³⁾	16.00 ⁽²⁾	.535 ⁽²⁾	.743 ⁽²⁾	.500 ⁽³⁾	<u>feasible</u>
1 2 3 and 4	10.73	C4H10-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2 3 4	9.67	C5H12-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>

1 2 3 and 4	5.38	C5H12-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2 3 4	5.06	C5H12-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 3 and 4	3.36	C4H10-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2 3 4	3.36	C4H10-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2 3 4	2.35	C4H10-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 2 3 and 4	2.14	C5H12-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2 3 4	1.59	C4H10-1	C5H12-1	4.94 ⁽¹⁾	13.00 ⁽¹⁾	.805 ⁽³⁾	.932 ⁽³⁾	.250 ⁽²⁾	<u>feasible</u>
1 2 3 and 4	1.29	C6H14-1	C7H16-1	6.81 ⁽²⁾	19.00 ⁽³⁾	.221 ⁽¹⁾	.294 ⁽¹⁾	.750 ⁽¹⁾	<u>feasible</u>

Separation	Cost Carbon Steel	Cost Material	Efficiency	Number of Trays	Diameter	CESnew	Reboiler Duty	Utilities Cost	Split
1 2 and 3 4	131000.00	131000.00	.436675	37	1.371600	13.445545	.607305	1205600.00	<u>feasible</u>
1 and 2 3 4	94300.00	94300.00	.451273	29	1.066800	2.256135	.333861	617600.00	<u>feasible</u>
1 2 3 and 4	143400.00	143400.00	.425533	45	1.371600	1.290319	.673232	1648000.00	<u>feasible</u>

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05263	.00000	.00000
Product 2	.05000	.94737	1.00000	.00000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 1	23.75000	1.25000	.00000	.00000	25.00000
Product 2	1.25000	22.50000	1.25000	.00000	25.00000
TOTAL	25.00000	23.75000	1.25000	.00000	50.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000

Best Results classified using CES

Products Separation

Product s	CES	Light Key	Heavy Key	N_{min}	Actual Stages	Min. Reflux	Actual. Reflux	Dist/Feed	Split
1 and 2	44.11	C5H12-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2	21.14	C4H10-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
1 and 2	14.43	C4H10-1	C5H12-1	4.60 ⁽¹⁾	12.00 ⁽¹⁾	.594 ⁽¹⁾	.710 ⁽¹⁾	.500 ⁽¹⁾	<u>feasible</u>

Separation	Cost Carbon Steel	Cost Material	Efficiency	Number of Trays	Diameter	CESnew	Reboiler Duty	Utilities Cost	Split
1 and 2	90500.00	90500.00	.440151	28	.914400	14.431580	.233516	531100.00	<u>feasible</u>

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 3	.00000	1.00000	.94737	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05263	.95000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 3	.00000	1.25000	22.50000	1.25000	25.00000
Product 4	.00000	.00000	1.25000	23.75000	25.00000
TOTAL	.00000	1.25000	23.75000	25.00000	50.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Best Results classified using CES
Products Separation

Products	CES	Light Key	Heavy Key	N_{\min}	Actual Stages	Min. Reflux	Actual. Reflux	Dist/Feed	Split
3 and 4	44.11	C5H12-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
3 and 4	19.04	C5H12-1	C7H16-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
3 and 4	11.72	C6H14-1	C7H16-1	7.14 ⁽¹⁾	19.00 ⁽¹⁾	1.235 ⁽¹⁾	1.378 ⁽¹⁾	.500 ⁽¹⁾	<u>feasible</u>

Separation	Cost Carbon Steel	Cost Material	Efficiency	Number of Trays	Diameter	CESnew	Reboiler Duty	Utilities Cost	Split
3 and 4	129800.00	129800.00	.431227	45	1.219200	11.720479	.391894	1046500.00	<u>feasible</u>

Arquivo: "relamat.html"

Relatório com todas as separações estudadas – Resultados completos

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 1	23.75000	1.25000	.00000	.00000	25.00000
Product 2	1.25000	22.50000	1.25000	.00000	25.00000
Product 3	.00000	1.25000	22.50000	1.25000	25.00000
Product 4	.00000	.00000	1.25000	23.75000	25.00000
TOTAL	25.00000	25.00000	25.00000	25.00000	100.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Products Separation 1 2 and 3 4

Light-key component	C4H10-1	
Heavy-key component	C5H12-1	
$(d/b)_{LK}$	99.00000	
$(b/d)_{HK}$.05263	
Minimum number of stages	1.34627	.00000
Actual number of stages	.00000	
Feed location	.00000	
Minimum reflux	.00000	
Actual reflux	.00000	
Distillate/Feed ratio	.00000	
Relative volatility	3.40797	
FCES	1.00000	
DTCES	36.57000	
CES	51.01	
Distillate temperature	293.48286	
Bottom temperature	358.30555	

Non-Keys Components distribution:

Component	$b_{\text{specified}}$	$b_{\text{calculated}}$	Difference (%)	$d_{\text{specified}}$	$d_{\text{calculated}}$	Difference (%)	N_{min}	Relative volatility
C6H14-1	.95000	.16064	83.091	.05000	.83936	-1578.726	1.346	8.891
C7H16-1	.99000	.39774	59.825	.01000	.60226	-5922.628	1.346	22.310

Components distribution using ASPENPLUS

Mole-fractions

Components	Feed	Distillate	Bottom
C4H10-1	.25000	.94981	.01667
C5H12-1	.25000	.04999	.31669
C6H14-1	.25000	.00020	.33329
C7H16-1	.25000	.00000	.33336

Recoveries

Components	Distillate	Bottom
C4H10-1	.95000	.05000
C5H12-1	.05000	.95000
C6H14-1	.00020	.99980
C7H16-1	.00000	1.00000

Light-key component	C4H10-1	
Heavy-key component	C6H14-1	
$(d/b)_{LK}$	99.00000	
$(b/d)_{HK}$	19.00000	
Minimum number of stages	3.45056	.00000
Actual number of stages	.00000	
Feed location	.00000	
Minimum reflux	.00000	
Actual reflux	.00000	
Distillate/Feed ratio	.00000	
Relative volatility	8.89084	

FCES	1.00000
DTCES	69.23000
CES	21.14
Distillate temperature	293.48286
Bottom temperature	358.30555

Non-Keys Components distribution:

Component	$b_{\text{specified}}$	$b_{\text{calculated}}$	Difference (%)	$d_{\text{specified}}$	$d_{\text{calculated}}$	Difference (%)	N_{min}	Relative volatility
C7H16-1	.99000	.99780	-.788	.01000	.00220	78.042	3.451	22.310
C5H12-1	.05000	.40991	-719.825	.95000	.59009	37.886	3.451	3.408

Components distribution using ASPENPLUS

Mole-fractions

Components	Feed	Distillate	Bottom
C4H10-1	.25000	.94981	.01667
C5H12-1	.25000	.04999	.31669
C6H14-1	.25000	.00020	.33329
C7H16-1	.25000	.00000	.33336

Recoveries

Components	Distillate	Bottom
C4H10-1	.95000	.05000
C5H12-1	.05000	.95000
C6H14-1	.00020	.99980
C7H16-1	.00000	1.00000

Light-key component	C4H10-1	
Heavy-key component	C7H16-1	
$(d/b)_{LK}$	99.00000	
$(b/d)_{HK}$	99.00000	
Minimum number of stages	2.95978	.00000
Actual number of stages	.00000	
Feed location	.00000	
Minimum reflux	.00000	
Actual reflux	.00000	
Distillate/Feed ratio	.00000	
Relative volatility	22.31014	
FCES	1.00000	
DTCES	98.93000	
CES	24.79	
Distillate temperature	293.48286	
Bottom temperature	358.30555	

Non-Keys Components distribution:

Component	$b_{\text{specified}}$	$b_{\text{calculated}}$	Difference (%)	$d_{\text{specified}}$	$d_{\text{calculated}}$	Difference (%)	N_{min}	Relative volatility
C5H12-1	.05000	.27566	-451.323	.95000	.72434	23.754	2.960	3.408
C6H14-1	.95000	.86670	8.769	.05000	.13330	-166.606	2.960	8.891

Components distribution using ASPENPLUS

Mole-fractions

Components	Feed	Distillate	Bottom
C4H10-1	.25000	.94981	.01667
C5H12-1	.25000	.04999	.31669
C6H14-1	.25000	.00020	.33329
C7H16-1	.25000	.00000	.33336

Recoveries

Components	Distillate	Bottom
C4H10-1	.95000	.05000
C5H12-1	.05000	.95000
C6H14-1	.00020	.99980
C7H16-1	.00000	1.00000

Light-key component	C5H12-1	
Heavy-key component	C6H14-1	
$(d/b)_{LK}$	19.00000	
$(b/d)_{HK}$	19.00000	
Minimum number of stages	6.12748	7.89709
Actual number of stages	16.00000	
Feed location	7.06862	
Minimum reflux	.53537	
Actual reflux	.74298	
Distillate/Feed ratio	.50000	
Relative volatility	2.61447	

FCES	1.00000
DTCES	32.66000
CES	12.77
Distillate temperature	306.24318
Bottom temperature	380.01588

Non-Keys Components distribution:

Component	$b_{\text{specified}}$	$b_{\text{calculated}}$	Difference (%)	$d_{\text{specified}}$	$d_{\text{calculated}}$	Difference (%)	N_{min}	Relative volatility
C4H10-1	.01000	.00003	99.709	.99000	.99997	-1.007	6.127	8.891
C7H16-1	.99000	.99974	-9.84	.01000	.00026	97.429	6.127	6.231

Components distribution using ASPENPLUS

Mole-fractions

Components	Feed	Distillate	Bottom
C4H10-1	.25000	.49999	.00000
C5H12-1	.25000	.47500	.02500
C6H14-1	.25000	.02500	.47500
C7H16-1	.25000	.00001	.49999

Recoveries

Components	Distillate	Bottom
C4H10-1	1.00000	.00000
C5H12-1	.95000	.05000
C6H14-1	.05000	.95000
C7H16-1	.00002	.99998

Light-key component	C5H12-1	
Heavy-key component	C7H16-1	
$(d/b)_{LK}$	19.00000	
$(b/d)_{HK}$	99.00000	
Minimum number of stages	4.12106	.00000
Actual number of stages	.00000	
Feed location	.00000	
Minimum reflux	.00000	
Actual reflux	.00000	
Distillate/Feed ratio	.00000	
Relative volatility	6.23089	
FCES	1.00000	
DTCES	62.36000	
CES	19.04	
Distillate temperature	306.24318	
Bottom temperature	380.01588	

Non-Keys Components distribution:

Component	$b_{\text{specified}}$	$b_{\text{calculated}}$	Difference (%)	$d_{\text{specified}}$	$d_{\text{calculated}}$	Difference (%)	N_{min}	Relative volatility
C4H10-1	.01000	.00027	97.257	.99000	.99973	-.982	4.121	22.310
C6H14-1	.95000	.73422	22.714	.05000	.26578	-431.558	4.121	2.614

Components distribution using ASPENPLUS

Mole-fractions

Components	Feed	Distillate	Bottom
C4H10-1	.25000	.49999	.00000
C5H12-1	.25000	.47500	.02500
C6H14-1	.25000	.02500	.47500
C7H16-1	.25000	.00001	.49999

Recoveries

Components	Distillate	Bottom
C4H10-1	1.00000	.00000
C5H12-1	.95000	.05000
C6H14-1	.05000	.95000
C7H16-1	.00002	.99998

Light-key component	C6H14-1	
Heavy-key component	C7H16-1	
$(d/b)_{LK}$.05263	
$(b/d)_{HK}$	99.00000	
Minimum number of stages	2.06376	.00000
Actual number of stages	.00000	
Feed location	.00000	
Minimum reflux	.00000	
Actual reflux	.00000	
Distillate/Feed ratio	.00000	
Relative volatility	2.22519	

FCES	1.00000
DTCES	29.70000
CES	41.43
Distillate temperature	306.24318
Bottom temperature	380.01588

Non-Keys Components distribution:

Component	$b_{\text{specified}}$	$b_{\text{calculated}}$	Difference (%)	$d_{\text{specified}}$	$d_{\text{calculated}}$	Difference (%)	N_{min}	Relative volatility
C5H12-1	.05000	.69411	-1288.228	.95000	.30589	67.801	2.064	6.231
C4H10-1	.01000	.14028	-1302.820	.99000	.85972	13.160	2.064	22.310

Components distribution using ASPENPLUS

Mole-fractions

Components	Feed	Distillate	Bottom
C4H10-1	.25000	.49999	.00000
C5H12-1	.25000	.47500	.02500
C6H14-1	.25000	.02500	.47500
C7H16-1	.25000	.00001	.49999

Recoveries

Components	Distillate	Bottom
C4H10-1	1.00000	.00000
C5H12-1	.95000	.05000
C6H14-1	.05000	.95000
C7H16-1	.00002	.99998

Arquivo: "Relsumc.html"

Relatório sumarizado da separação da mistura inicial em componentes puros

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 1	23.75000	1.25000	.00000	.00000	25.00000
Product 2	1.25000	22.50000	1.25000	.00000	25.00000
Product 3	.00000	1.25000	22.50000	1.25000	25.00000
Product 4	.00000	.00000	1.25000	23.75000	25.00000
TOTAL	25.00000	25.00000	25.00000	25.00000	100.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.05000	.00000
Product 3	.00000	.05000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Components Separation

Components	CES	Light Key	Heavy Key	N_{min}	Actual Stages	Min. Reflux	Actual. Reflux	Dist/Fee d	Split
C4H10-1 C5H12-1 C6H14-1 and C7H16-1	97.14	C4H10-1	C5H12-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
C4H10-1 and C5H12-1 C6H14-1 C7H16-1	78.55	C5H12-1	C6H14-1	.00	.00	.000	.000	.000	<u>unfeasible</u>
C4H10-1 C5H12-1 and C6H14-1 C7H16-1	8.27	C5H12-1	C6H14-1	12.55 ⁽³⁾	24.00 ⁽²⁾	.648 ⁽²⁾	.920 ⁽²⁾	.500 ⁽³⁾	<u>feasible</u>
C4H10-1 and C5H12-1 C6H14-1 C7H16-1	1.02	C4H10-1	C5H12-1	7.64 ⁽¹⁾	19.00 ⁽¹⁾	.948 ⁽³⁾	1.091 ⁽³⁾	.250 ⁽²⁾	<u>feasible</u>
C4H10-1 C5H12-1 C6H14-1 and C7H16-1	.83	C6H14-1	C7H16-1	10.76 ⁽²⁾	29.00 ⁽³⁾	.290 ⁽¹⁾	.367 ⁽¹⁾	.750 ⁽¹⁾	<u>feasible</u>

Separation	Cost Carbon Steel	Cost Material	Efficiency	Number of Trays	Diameter	CESnew	Reboiler Duty	Utilities Cost	Split
C4H10-1 C5H12-1 and C6H14-1 C7H16-1	174300.00	174300.00	.433413	56	1.371600	9.571970	.654572	1310700.00	<u>feasible</u>
C4H10-1 and C5H12-1 C6H14-1 C7H16-1	118600.00	118600.00	.448255	43	1.066800	3.951183	.357470	657400.00	<u>feasible</u>
C4H10-1 C5H12-1 C6H14-1 and C7H16-1	200700.00	200700.00	.428127	68	1.524000	.826804	.704236	1722100.00	<u>feasible</u>

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05000	.90000	.00000	.00000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 1	23.75000	1.25000	.00000	.00000	25.00000
Product 2	1.25000	22.50000	.00000	.00000	23.75000
TOTAL	25.00000	25.00000	1.25000	.00000	50.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 1	.95000	.05000	.00000	.00000
Product 2	.05263	.94737	.00000	.00000

Components Separation

Components	CES	Light Key	Heavy Key	N_{min}	Actual Stages	Min. Reflux	Actual. Reflux	Dist/Feed	Split
C4H10-1 and C5H12-1	9.16	C4H10-1	C5H12-1	7.06 ⁽¹⁾	19.00 ⁽¹⁾	.720 ⁽¹⁾	.828 ⁽¹⁾	.500 ⁽¹⁾	<u>feasible</u>

Separation	Cost Carbon Steel	Cost Material	Efficiency	Number of Trays	Diameter	CESnew	Rebolier Duty	Utilities Cost	Split
C4H10-1 and C5H12-1	120800.00	120800.00	.428866	45	.914400	9.162496	.248278	560000.00	<u>feasible</u>

PRODUCTS CHARACTERISTICS

Component recoveries

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 3	.00000	.00000	.90000	.05000
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Component molar flow-rate

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1	TOTAL
Product 3	.00000	.00000	22.50000	1.25000	23.75000
Product 4	.00000	.00000	1.25000	23.75000	25.00000
TOTAL	.00000	1.25000	25.00000	25.00000	50.00000

Components concentration

Component	C4H10-1	C5H12-1	C6H14-1	C7H16-1
Product 3	.00000	.00000	.94737	.05263
Product 4	.00000	.00000	.05000	.95000

Components Separation

Components	CES	Light Key	Heavy Key	N_{min}	Actual Stages	Min. Reflux	Actual. Reflux	Dist/Feed	Split
C6H14-1 and C7H16-1	7.44	C6H14-1	C7H16-1	11.53 ⁽¹⁾	29.00 ⁽¹⁾	1.577 ⁽¹⁾	1.753 ⁽¹⁾	.500 ⁽¹⁾	feasible

Separation	Cost Carbon Steel	Cost Material	Efficiency	Number of Trays	Diameter	CESnew	Reboiler Duty	Utilities Cost	Split
C6H14-1 and C7H16-1	176000.00	176000.00	.430143	68	1.219200	7.441240	.451478	1202900.00	feasible