



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA



ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Estudo de um Novo Conceito de Coluna de Destilação: Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC)

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade
de Engenharia Química como parte dos requisitos
exigidos para obtenção do título de Mestre em
Engenharia Química

Autor : **Jeffrey León Pulido**

Orientador: **Profa. Dra Maria Regina Wolf Maciel**

Campinas - São Paulo
Junho de 2011

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

L551e León Pulido, Jeffrey
Estudo de um novo conceito de coluna de destilação:
coluna de destilação com integração interna de calor
(CDIIC) / Jeffrey León Pulido. --Campinas, SP: [s.n.],
2011.

Orientador: Maria Regina Wolf Maciel.
Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Simulação de processos. 3.
Processos químicos. 4. Coluna CDIIC. 5. Energia. I.
Maciel, Maria Regina Wolf. II. Universidade Estadual
de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III.
Título.

Título em Inglês: Study of a new concept of distillation column: heat
integrated distillation column (HIDiC)

Palavras-chave em Inglês: Distillation, Process simulation, Chemical
processes, HIDiC, Energy

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Márcio Luiz de Souza Santos, Christiane de Arruda
Rodrigues

Data da defesa: 02-06-2011

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

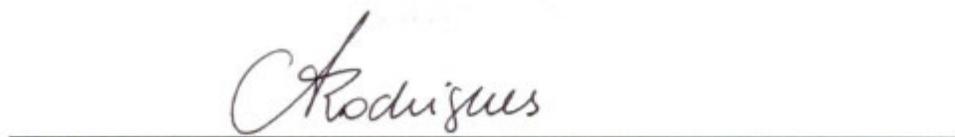
Dissertação de Mestrado defendida por Jeffrey León Pulido e aprovada em 02 de Junho de
2011 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel – Orientador

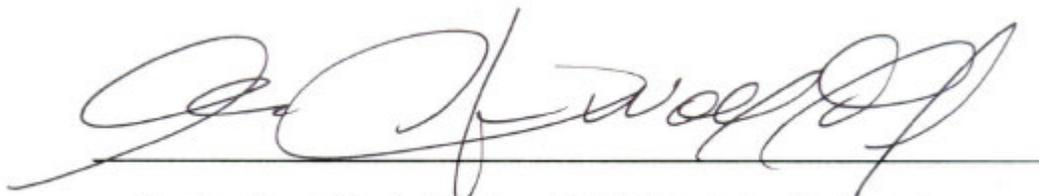


Prof. Dr. Márcio Luiz de Souza Santos



Profa. Dra. Christiane de Arruda Rodrigues

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química do aluno Jeffrey León Pulido, defendida e aprovada em 02 de Junho de 2011:

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

Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel – Orientador

Para meus pais
Jasmine Pulido e Francisco León

*Encaminha sempre tuas metas no topo da montanha,
assim,
ao final do caminho já terás escalado uma cordilheira.*

J.L.P., palavras inspiradas na experiência de trabalho com a Profa. M.R.W.

Agradecimentos

A meus pais pelo apoio e carinho neste processo.

Aos meus padrinhos Nery Avillaneda e Robinson Rodrigues pelo apoio incondicional.

A minha namorada Gina Vera Rizzo por sua compreensão e amor na distancia.

Aos colegas do LDPS e LOPCA pela amizade e suporte acadêmico; especialmente ao Carlos D., ao Arturo, ao Leonardo, ao Melvin, ao Pablo, ao Julian, ao Edwin, ao Camilo, ao Mario, ao Julio Maia, ao Nadson, ao Victor, ao Rodrigo, ao Edney, à Lamia e à Tassia.

A minha orientadora Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel e ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho pelo incentivo e valiosas sugestões.

Finalmente, gostaria de registrar meu agradecimento a FAPESP pelo apoio financeiro, à UNICAMP pela fomação e ao Brasil pela acolhida.

Resumo

Os processos de separação são amplamente usados na indústria petrolífera e alcoolquímica. O processo de destilação representa por volta de 40% dos custos da energia requerida nas operações industriais e grande quantidade de energia do processo não é aproveitada, sendo perdida ao ambiente. No Brasil, devido aos avanços industriais e à necessidade do mercado energético, inovações ao processo convencional de separação são essenciais para o desenvolvimento de novas estratégias e projetos que permitam uma diminuição do consumo de energia.

Neste trabalho, foi desenvolvido o estudo do novo conceito de Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC) a qual é referenciada na literatura como coluna HIDiC (*Heat Integrated Distillation Column*) na qual a seção de retificação opera a pressões e temperaturas maiores que a seção de esgotamento; assim, aproveita-se o calor da seção de retificação para aquecer a seção de esgotamento. O simulador de processos Aspen Plus V7.2 foi utilizado para o estudo e a implementação de uma modelagem da configuração no simulador, a qual é uma modelagem aproximada, pois o mesmo não possui este tipo de Operação Unitária.

As simulações desenvolvidas foram feitas visando os cenários mais realistas que descrevessem a nova configuração, simplificando as complexidades do projeto e criando estratégias de convergência que permitam o estudo do potencial de diminuição do consumo de energia desta configuração. Na coluna CDIIC, as seções de retificação e de esgotamento se encontram dispostas de forma concêntrica e para garantir a operabilidade são usados um compressor e uma válvula para obter as temperaturas e pressões necessárias ao sistema.

Na atualidade, esta configuração não é uma realidade na indústria sendo o projeto interno o de maior complexidade, além da falta de dados experimentais da coluna em uma escala suficientemente adequada para comparações. Na coluna CDIIC, estudos de transferência de calor foram realizados indicando os parâmetros de processo, como posição de alimentação, quantidade de calor trocado e possíveis configurações internas. Até o momento, aqui no Brasil, ainda não se encontram trabalhos publicados na área. Pela faixa de aplicabilidade, a coluna CDIIC terá muitas aplicações importantes, seja na área petroquímica, seja na alcoolquímica, sendo uma alternativa com potencial para a diminuição do consumo de energia em processos de destilação.

Palavras Chaves: Destilação, Simulação de Processos, Processos Químicos, Coluna CDIIC, Energia.

Abstract

The separation processes are largely used in petroleum and alcohol-chemical industries. The distillation process represents around 40% of energy costs in industrial operation, thus large amount of energy of the process is not used and it is lost to the surrounding. In Brazil, industrial developments and the need of energy market allowed innovations to the conventional separation process. This is essential for the development of new strategies and designs that enable a reduction in energy consumption.

In the present work a study of the new concept of Heat Integrated Distillation Column which is referenced in literature as HIDiC column was developed. In this column, the rectifying section operates at higher pressures and temperatures than the stripping section. Thus, the heat of rectifying section is used to heat the stripping section. The Aspen Plus V7.2 software was used for the study of column configuration and the potential of heat transfer, since it does not have this type of unit operation.

The simulations show a more realistic situation able to model the new configuration, simplifying the complexities of design and creating strategies that facilitate the study of the potential for reducing the energy consumption of this configuration. In HIDiC column, the rectifying and stripping section are concentrically and to ensure operability a compressor and throttle valve are applied to achieve the temperatures and pressures required by the system.

Currently, this configuration is not a reality in the industry, because the lack of experimental data from the column. In addition, the complexity of internal configuration needs to be solved. In HIDiC column, heat transfer studies were performed showing the process parameters such as feed position, amount of heat exchanged and the initial concentration. So far, in Brazil has not been published works about this technology. The range of applicability of HIDiC column has many important applications in petrochemical and alcohol-chemical industries and it represents an alternative for reducing the energy consumption in distillation process.

Keywords: Distillation, Simulation Process, Chemical Processes, HIDiC, Energy.

Conteúdo

RESUMO	XIII
ABSTRACT	XV
LISTA DE FIGURAS	XXI
LISTA DE TABELAS	XXV
ABREVIATURAS	XXVII
NOMENCLATURA	XXVII
FLUXOGRAMAS	XXIX
CAPÍTULO 1– SÍNTESE DO PROJETO	- 1 -
1.1 INTRODUÇÃO	- 3 -
1.2. OBJETIVOS ESTABELECIDOS	- 4 -
1.3 METODOLOGIA DESTA DISSERTAÇÃO	- 5 -
1.4 ESTRUTURA DA DISSERTAÇÃO	- 7 -
CAPÍTULO 2 – REVISÃO DA LITERATURA	- 9 -
2.1 SISTEMAS COM APROVEITAMENTO DA ENERGIA EM DESTILAÇÃO	- 11 -
2.1.1 <i>Coluna de Destilação Convencional</i>	- 11 -
2.1.2 <i>Efeitos Múltiplos</i>	- 12 -
2.1.3 <i>Acoplamento Térmico</i>	- 14 -
2.1.4 <i>Recompressão Direta de Vapor</i>	- 15 -
2.1.5 <i>Destilação Diabática</i>	- 16 -
2.1.6 <i>Colunas Aquecidas por Corrente de Calor</i>	- 18 -
2.1.7 <i>Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC)</i>	- 19 -
2.2 ALTERNATIVAS DO PROJETO INTERNO EM COLUNAS COM INTEGRAÇÃO DE CALOR	- 22 -
2.2.1 <i>Colunas Inter-Acopladas</i>	- 23 -
2.2.2 <i>Coluna Concêntrica</i>	- 24 -
2.2.3 <i>Coluna Tubo e Carcaça</i>	- 25 -
2.2.4 <i>Coluna com Troca de Calor no Prato</i>	- 26 -
2.2.5 <i>Coluna Concêntrica com Painéis de Calor</i>	- 27 -
2.2.6 <i>Coluna de Parede Dividida</i>	- 28 -
2.3 COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES	- 29 -
CAPÍTULO 3 –TRANSFERÊNCIA DE MASSA E ENERGIA NA COLUNA CDIIC	- 31 -
3.1 INTRODUÇÃO	- 33 -
3.2 TRANSFERÊNCIA DE MASSA	- 35 -
3.2.1 <i>Seção de Retificação da coluna CDIIC</i>	- 38 -

3.2.2 Seção de Esgotamento da coluna CDIIC.....	- 40 -
3.3 CONSIDERAÇÕES GERAIS DA COLUNA CDIIC.....	- 40 -
3.4 DESCRIÇÃO DAS EQUAÇÕES MESH	- 42 -
3.5 COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES.....	- 44 -
CAPÍTULO 4 – COLUNA DE DESTILAÇÃO COM INTEGRAÇÃO INTERNA DE CALOR (CDIIC): PARÂMETROS E PROJETO	45 -
4.1 INTRODUÇÃO	- 47 -
4.2 CONCEITO DA COLUNA CDIIC – I	- 47 -
4.3 CONCEITO DA COLUNA COM INTEGRAÇÃO INTERNA DE CALOR - CDIIC	- 49 -
4.4 EQUIPAMENTOS ASSOCIADOS À COLUNA - CDIIC	- 54 -
4.5 OPERAÇÃO DA COLUNA CDIIC	- 55 -
4.6 EFICIÊNCIA DA COLUNA CDIIC	- 56 -
4.6.1 Estágios de Equilíbrio em Colunas de Destilação.....	- 57 -
4.6.2 Eficiência em Colunas de Destilação.....	- 58 -
4.6.3 Conceito de Correlações de Eficiência.....	- 59 -
4.6.4 Eficiência de ponto	- 60 -
4.6.5 Eficiência Total de Prato	- 61 -
4.7 AVALIAÇÃO TERMODINÂMICA.....	- 62 -
4.7.1 Descrição Termodinâmica da Coluna Convencional	- 62 -
4.7.2 Descrição Termodinâmica da Coluna CDIIC.....	- 65 -
4.8 COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES.....	- 67 -
CAPÍTULO 5– ESTUDOS DE SIMULAÇÃO DA COLUNA CDIIC.....	- 69 -
5.1 RESUMO	- 71 -
5.2 PROCEDIMENTO PARA A SIMULAÇÃO DE COLUNAS CDIIC NO SOFTWARE ASPEN PLUS V7.2	- 71 -
5.3 DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS E ESTUDOS DE SIMULAÇÃO.....	- 75 -
5.4 ESTUDO TERMODINÂMICO DE EQUILÍBRIO DE FASES BINÁRIO DOS SISTEMAS ENVOLVIDOS.....	- 77 -
5.5 SIMULAÇÃO DA COLUNA CDIIC NA SEPARAÇÃO DA MISTURA BENZENO-TOLUENO	- 87 -
5.5.1 Caso 1	- 92 -
5.5.2 Caso 2	- 96 -
5.5.3 Caso 3	- 100 -
5.5.4 Análise e Resultados do Sistema Benzeno-Tolueno	- 103 -
5.5.5 Conclusões.....	- 105 -
5.6 SIMULAÇÃO DA COLUNA CDIIC NA SEPARAÇÃO DA MISTURA METANOL-ÁGUA.....	- 106 -
5.6.1 Resultados e Conclusões	- 112 -
5.7 SIMULAÇÃO DA COLUNA CDIIC NA SEPARAÇÃO DO SISTEMA ETANOL-ÁGUA.....	- 114 -
5.7.1 Comentários e Conclusões.....	- 122 -
5.8 CONCLUSÕES DO CAPÍTULO.....	- 126 -
5.9 ESTUDO DA EFICIÊNCIA DE PRATOS	- 128 -
5.9.1 Comentários e Conclusões.....	- 129 -
CAPÍTULO 6 – PROJETO INTERNO E PAINÉIS DE CALOR	- 131 -
6.1 INTRODUÇÃO	- 133 -
6.2 PAINÉIS DE TRANSFERÊNCIA EXPERIMENTAIS	- 133 -

6.3 ESTUDO DO PROJETO INTERNO DE COLUNA CDIC.....	- 136 -
6.4 DISCUSSÕES E CONCLUSÕES	- 143 -
SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	- 147 -
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	- 149 -
APÊNDICE I.....	- 159 -

Lista de Figuras

- Figura 1. Configuração de Coluna Convencional.
- Figura 2. Múltiplos Efeitos.
- Figura 3. a)Colunas de destilação com Acoplamento Térmico b)Acoplamento Múltiplo.
- Figura 4. Coluna com Recompressão Direta de Calor.
- Figura 5. Coluna de Destilação Diabática.
- Figura 6. Painéis de Calor Internos b)Trocadores de Calor tipo Serpentina.
- Figura 7. Representação da Coluna Inter-acoplada.
- Figura 8. Representação da Coluna Concêntrica.
- Figura 9. Representação da Coluna Tubo e Carcaça.
- Figura 10. Representação da Coluna com Troca de Calor no Prato.
- Figura 11. Coluna CDIIC com Painéis de Calor.
- Figura 12. Representação da Coluna de Parede Dividida.
- Figura 13. Representação da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor.
- Figura 14. Localização de Painéis em Seção de Esgotamento.
- Figura 15. Configuração Conceitual da Coluna CDIIC (Tsung-Jen Ho, 2010).
- Figura 16. Configuração de Coluna CDIIC – i.
- Figura 17. Representação do Arranjo Interno da Coluna CDIIC (Pulido et al. 2010).
- Figura 18. Projeto da coluna CDIIC .
- Figura 19. Possíveis Arranjos Internos de Coluna CDIIC (Reijke, 2007).
- Figura 20. Esquema de um Estágio de Equilíbrio.
- Figura 21. A) Esquema de Conexão do Modelo Radfrac em Aspen plus (Aspen Plus library, V7.2).
- Figura 22. Diagrama T-xy do Sistema Benzeno – Tolueno.
- Figura 23. Diagrama T-xy de Sistema Metanol – Água.
- Figura 24. Curva de Equilíbrio Líquido-Vapor para o Sistema Etanol-Água.
- Figura 25. Diagrama T-xy de Sistema Etanol – Água.
- Figura 26. Diagrama T-x de Sistema Etanol – Água.
- Figura 27. Análise do Azeótropo da Mistura Etanol - Água (1atm).

Figura 28. Diagramas x-y Benzeno – Tolueno.

Figura 29. Diagramas x-y Metanol – Água.

Figura 30. Diagramas x-y Etanol – Água.

Figura 31. a) Coluna Convencional, b) Coluna CDIIC.

Figura 32. Entalpia na Fase Vapor da Coluna CDIIC Caso 1.

Figura 33. Entalpia na Fase Líquido da Coluna CDIIC Caso 1.

Figura 34. Perfil de Temperatura da Coluna CDIIC Caso 1.

Figura 35. Entalpia da Coluna CDIIC Caso 2.

Figura 36. Perfil de Temperatura da Coluna CDIIC - Caso 2.

Figura 37. Entalpia da Coluna CDIIC Caso 3.

Figura 38. Perfil de Temperatura da Coluna CDIIC Caso 3.

Figura 39. Perfil de Energia dos Casos de Estudo.

Figura 40. Perfil Temperatura das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 2.

Figura 41. Perfil de Fluxo de vapor das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 2.

Figura 42. Perfil de Composição (fração molar) na Fase Vapor das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 2.

Figura 43. Perfil de Temperatura das Colunas CDIIC e Convencional do Sistema 3.

Figura 44. Perfil de Composição na fase Vapor das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 3.

Figura 45. Fração molar do Sistema 3 a 0,1012 MPa e 0,2012 MPa.

Figura 46. Análise do Azeótropo da Mistura Etanol - Água (2 atm).

Figura 47 . a) Painel de calor, b) Baffle Distribuidor de líquido. c) Set de painéis de calor usado em seção de intercâmbio.(Reijke 2007).

Figura 48. a) Localização dos painéis de transferência de calor em 'Downcomer', b) Desenho de conjunto de painéis de calor na seção ativa.(Reijke 2007).

Figura 49. Representação do Teste de Painel de Calor (Reijke 2007).

Figura 50. Estágio Concêntrico da Coluna CDIIC.

Figura 51. Projeto Interno de Prato Perfurado.

Figura 52. Seção de Retificação e Esgotamento: (a) Domínio do Fluido e (b) Domínio do Solido. (Pulido et al. 2010).

Figura 53. Perfis de distribuição de Temperatura (a) Seção de retificação (b) Seção de esgotamento. (Pulido et al. 2010).

Figura 54. Perfil de temperatura ao longo das seções da coluna CDIIC.

Figura 55 Fluxo de Vapor da Coluna CDIIC.

Figura 56. Perfil de Temperatura na Interface Sólida da Coluna CDIIC.

Figura 57. Nova Configuração multi-concêntrica de coluna CDIIC.

Lista de Tabelas

Tabela 1. Cronograma do trabalho.

Tabela 2. Equipamentos Associados à Coluna CDIIC.

Tabela 3. Dados de Equilíbrio do Sistema Etanol-Água.

Tabela 4. Pressão de Vapor dos Componentes (Pv) da literatura (1) e obtida pelo Simulador (2).

Tabela 5. Categoria dos Componentes da Mistura 1 no Simulador.

Tabela 6. Parâmetros da Simulação do Sistema Benzeno-Tolueno.

Tabela 7. Especificações do processo simulado para a mistura 1.

Tabela 8. Resultados do Compressor Caso 1.

Tabela 9. Resultados do Compressor Caso 2.

Tabela 10. Resultados Casos de Estudo para Mistura Benzeno - Tolueno.

Tabela 11. Categoria dos Componentes da Mistura 2 no Simulador.

Tabela 12. Parâmetros da Simulação do Sistema Metanol-Água.

Tabela 13. Especificações do Processo Simulado para a Mistura 2.

Tabela 14. Resultados Sistema Metanol - Água.

Tabela 15. Categoria dos Componentes da Mistura 3 no simulador.

Tabela 16. Parâmetros da Simulação Sistema Etanol – Água.

Tabela 17. Especificações do Processo Simulado para a Mistura 3.

Tabela 18. Comportamento do Azeótropo a Diferentes Pressões da Mistura Etanol - Água.

Tabela 19. Resultados das Simulações Mistura Etanol - Água.

Tabela 20. Resultados da Mistura Etanol - Água.

Tabela 21. Figura 21. Eficiências Globais de Prato.

Tabela 22. Especificações Simulação Aspen Plus V 7.2.

Tabela 23. Especificações do Estágio da Coluna CDIIC.

Abreviaturas

CDIIC: Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor.

CDIIC-i: Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor Ideal.

HIDiC: Heat Integrated Distillation Column.

SRV: Vaporização com Refluxo Secundário.

Nomenclatura

q_j	Taxa de fluxo de calor (J/s)
E_{max}	Eficiência termodinâmica máxima (-)
F	Fluxo de alimentação (mol/s)
H	Entalpia (J/mol)
P_{in}	Pressão na entrada do compressor (kPa)
P_{out}	Pressão na saída do compressor (kPa)
Q_{min}	Taxa de energia mínima requerida (J/s)
R	Constante Universal dos gases (J/mol•K)
S	Entropia (J/mol•K)
T	Temperatura (K)
V	Fluxo no Compressor (mol/s)
v_n	Fluxo de vapor no estágio
L_n	Fluxo de líquido no estágio
$W_{compressor}$	Calor trocado pelo Compressor (J/s)
W_{min}	Trabalho mínimo para que se dê a separação (J/s)
x_i	Fração molar do componente i (-)
$\Delta H_{vap,B}$	Entalpia de vaporização no produto de fundo (J/mol)
K	Relação entre os calores específicos a pressão constante e a volume constante (-)
Re	Número de Reynolds

U	Coefficiente global de transferência de calor (W/m ² K)
A	Área de contato
g	Aceleração da gravidade (m/s ²)
L	Comprimento do tubo (m)
D	Diâmetro do tubo (m)
y	Fração molar do vapor
y _n	Fração molar do vapor no equilíbrio
f _i , φ _i	Fugacidade do componente i no líquido e do vapor.
N	Número do estágio total da coluna
n	Estágio em análise
B	Palavra em referência ao fundo
D	Palavra em referência ao destilado
R	Palavra em referência à seção de retificação
S	Palavra em referência à seção de esgotamento
V	Fluxo da fase vapor
F	Fluxo da fase líquida
E	Eficiência de Murphree
C _p	Capacidade calorífica
Q _{R,C}	Calor no refeedor e no condensador
η _{cc}	Eficiência termodinâmica

Fluxogramas

Fluxograma 1. Metodologia do Desenvolvimento da Tese.

Fluxograma 2. Procedimento Simulação Coluna CDIIC no simulador Aspen Plus V 7.2.

***Capítulo 1– Síntese do
Projeto***

1.1 Introdução

Na atualidade, Brasil é um dos países que apresentam maior desenvolvimento de tecnologias para o tratamento de biocombustíveis, aproveitamento dos processos do refino de petróleo e de novas fontes de energia. A grande importância do combustível não fóssil fez aumentar o interesse mundial, sendo uma alternativa para a obtenção de energia. Hoje o etanol é uma realidade no mercado o qual sustenta um aumento no consumo interno de álcool hidratado devido ao sucesso dos veículos automotores *flex-fuel*, além do interesse mundial da mistura etanol-gasolina. O uso dos biocombustíveis tem como valor agregado a diminuição de emissões de gases de efeito estufa e estabelece um suporte econômico na oscilação do preço do petróleo.

Desta maneira, um significativo aumento na demanda de etanol exige ampliar as proporções da produção, além de estabelecer alternativas tecnológicas que melhorem o tratamento das matérias primas e diminuam o consumo de energia usada para o processamento. Estudos para o tratamento da biomassa, o pretratamento do bagaço e palha seguem sendo desenvolvidos na atualidade gerando propostas que permitam maior eficiência no planejamento na obtenção do etanol.

A destilação é um dos processos de maior importância na indústria química, petroquímica e de álcool. Sabe-se que as colunas de destilação são muito usadas em separações industriais, mas demandam grande quantidade de energia (ao redor de 5% da energia total consumida em indústrias químicas no mundo), por isto é necessário desenvolver projetos que não só melhorem a pureza dos produtos, mas que também tragam novos conceitos que permitam melhorar as condições energéticas e, portanto, os custos de operação.

Um novo tipo de arranjo interno na coluna de destilação convencional (a coluna convencional é composta por uma seção de retificação e outra de esgotamento) está sendo desenvolvido por importantes grupos de pesquisa no Japão e na Holanda. Basicamente, a nova configuração inclui arranjos internos na coluna convencional, onde a seção de retificação trabalha a uma pressão maior e, conseqüentemente, maior temperatura que a seção de esgotamento. O conceito de Coluna com Integração Interna de Calor CDIIC é conhecido na literatura como Coluna HIDiC (*Heat Integrated Distillation Column*) tendo

como objetivo fundamental o aproveitamento de calor na coluna; por conseguinte, as seções são dispostas de maneira concêntrica, uma dentro da outra.

Para garantir as condições de operação da coluna, é necessária a inclusão de uma válvula e de um compressor que permitam manter as temperaturas e pressões requeridas pelo sistema. O conceito de integração interna foi introduzido no ano 1977 e logo uma quantidade razoável de pesquisa na direção do aproveitamento energético em colunas de destilação foi realizada, principalmente nos anos de 1984 a 1987. Posteriormente, de 1998 até nossos dias, o conceito de coluna de destilação concêntrica apresenta grandes vantagens para separações de misturas com pontos de ebulição próximos. Na atualidade, a coluna não é uma realidade na indústria, a principal causa é a complexidade do projeto e a falta de dados experimentais. No Brasil, ainda não se fala desta tecnologia e pela faixa de aplicabilidade, a coluna CDIIC apresenta grande potencial de uso, seja na área petroquímica como alcoolquímica.

1.2. Objetivos Estabelecidos

O objetivo geral desta pesquisa foi estudar o novo conceito de coluna de destilação CDIIC, com abrangência sobre modelos de simulações aproximados que permitam obter maior conhecimento da configuração por meio de softwares comerciais. O estudo refere-se à implementação de uma modelagem da configuração no simulador de processos Aspen Plus V 7.2 e realizar diferentes projetos da parte interna da coluna em relação a variáveis do novo processo, tais como transferência de calor, pressão e carga energética no refeedor e no condensador.

A avaliação do trabalho foi desenvolvida por meio da modelagem de três das configurações existentes da coluna CDIIC no Simulador de Processos Aspen Plus V 7.2, já que por se tratar de uma configuração não convencional, este simulador (como qualquer outro disponível) não possui a possibilidade desta operação. Foram simuladas situações criando estratégias de convergência, as quais permitiram a obtenção de resultados da diferença de temperaturas entre as duas seções, dos fluxos da coluna, e da operabilidade da coluna em função da transferência de calor entre as seções.

Depois de realizadas as simulações, foram desenvolvidas a análise e obtenção de resultados do calor do refeedor, do condensador e do compressor nas configurações estudadas, a fim de ser comparado o consumo de energia entre os projetos de coluna; também, uma análise da eficiência termodinâmica foi realizada a partir das simulações, comparando a eficiência energética da coluna CDIIC com a coluna convencional,

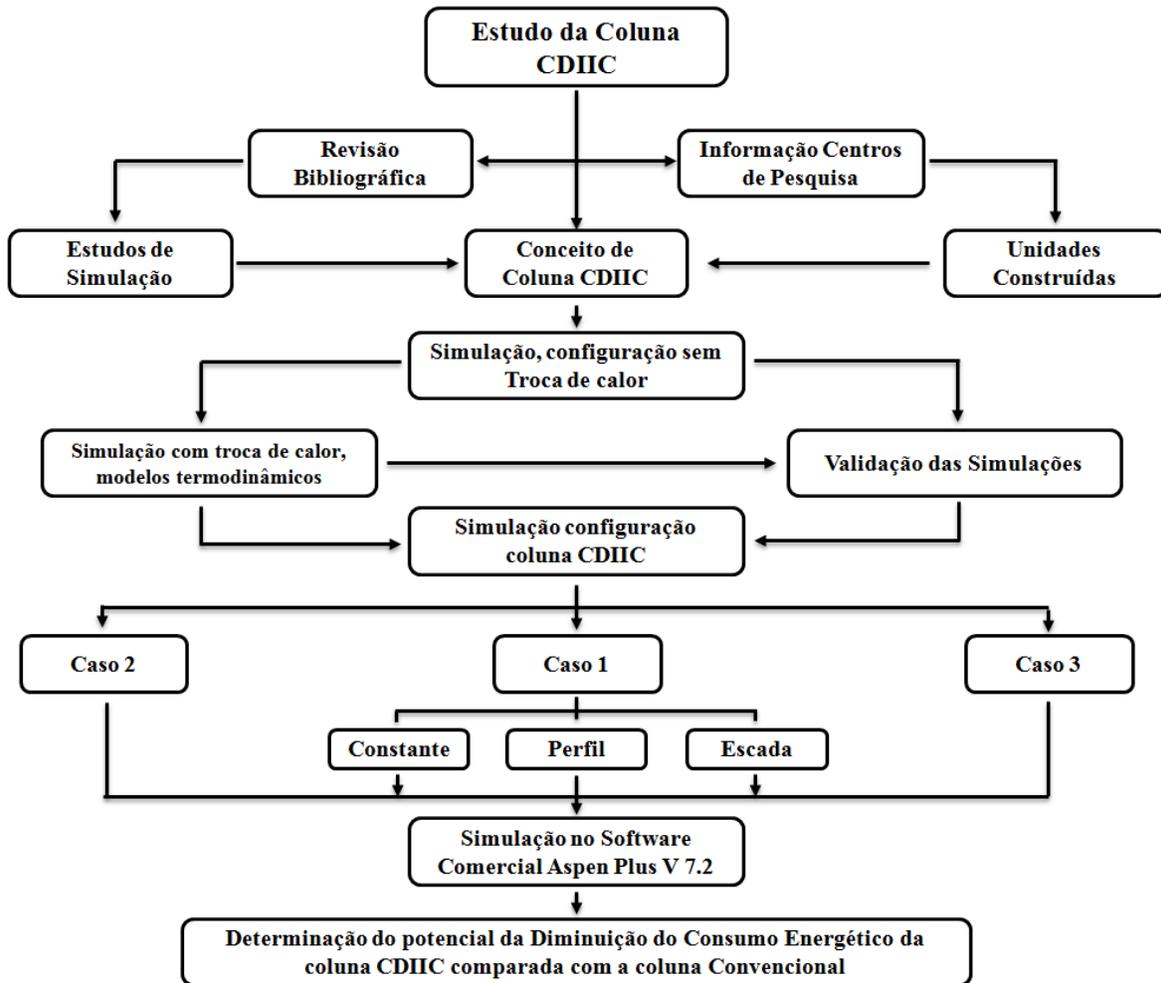
Para a avaliação da configuração de coluna CDIIC foram usados como caso de estudo a separação do sistema benzeno-tolueno, metanol-água e o sistema etanol-água o qual é de interesse no atual momento de uso de energia renovável. Estes foram estudados com o objeto de estabelecer o potencial na diminuição da energia consumida da coluna CDIIC em relação com a coluna convencional.

1.3 Metodologia desta Dissertação

Para o desenvolvimento desta dissertação, foram desenvolvidas e estabelecidas estratégias de convergência que permitiram a modelagem desta nova configuração no simulador comercial, devido a que por se tratar de uma configuração nova, estes não possuem a coluna CDIIC como Operação Unitária. Ferramentas apresentadas pelo simulador como: modelos de colunas, ferramentas de análises e modelos *shortcut*, em conjunto com o banco de dados e equações disponíveis foram usados e permitiram a modelagem desta nova configuração.

Por não se ter informação a nível experimental desta coluna a validação da simulação foi feita em relação a estudos publicados na literatura aberta (Naito et al. [27], Huang et al. [83], Gadalla et al. [48], Suphanit [84] e Gadalla [85]) para a configuração da coluna CDIIC. Partindo destes estudos, foram desenvolvidos estudos de simulação estabelecendo condições de operação que permitiram avaliar os sistemas e encontrar resultados inéditos da coluna CDIIC comparada com o projeto de coluna convencional. A seguir, foram analisados os dados obtidos em relação à relação de compressão entre as duas seções, transferência de calor e consumo de energia da configuração convencional e da coluna CDIIC.

A seguir é apresentado o fluxograma da metodologia usada na presente dissertação.



Fluxograma 1. Metodologia do Desenvolvimento da Tese.

Nos estudos de simulação realizados foi encontrando uma diminuição significativa do consumo energético da coluna CDIIC em relação ao projeto de coluna convencional para as condições estabelecidas. Finalmente, são apresentados estudos inéditos no Brasil em relação ao novo conceito de coluna de destilação com integração interna de calor CDIIC os quais permitem observar o potencial desta configuração para a diminuição do consumo de energia em processos de destilação. Como resultado dos estudos, foi também estabelecida uma proposta de configuração da coluna CDIIC e seu arranjo interno. Esta proposta deverá ser aprofundada em estudos posteriores, para esta dissertação são apresentados os primeiros estudos da configuração, visando o estudo do potencial de integração da energia.

1.4 Estrutura da Dissertação

O Capítulo 1 trata da síntese do trabalho; onde a coluna CDIIC é definida apresentando sua importância na atualidade. Os objetivos gerais e específicos e as atividades desenvolvidas em relação ao desenvolvimento deste trabalho são descritos. Também, é apresentada a metodologia usada para o desenvolvimento da dissertação.

No Capítulo 2, são apresentados os diferentes sistemas de aproveitamento da energia em destilação; descrevem-se os sistemas mais importantes a serem levados em conta no desenvolvimento do conceito da coluna CDIIC. Em seguida são apresentadas as alternativas de projeto interno em colunas de destilação. Estes arranjos descrevem um aproveitamento da energia presente no processo e seu potencial na diminuição do consumo de energia. Neste capítulo são mostrados os recentes desenvolvimentos em projetos internos em colunas de destilação. Estes sistemas são fundamentais para o entendimento das limitações e possibilidades dos arranjos internos nas colunas de destilação, bem como o desenvolvimento das possíveis configurações internas a serem realizadas no projeto de coluna CDIIC.

No Capítulo 3, são descritas as equações de transferência de massa e energia em colunas com integração interna de calor e o projeto convencional. Estes permitem estabelecer considerações no projeto de coluna em relação à possibilidade de simulação e identificação de possíveis limitações termodinâmicas e químicas em relação à configuração das seções e os equipamentos associados ao processo.

Posteriormente, no Capítulo 4, é realizada a descrição detalhada da coluna de destilação com integração interna de calor (CDIIC) objeto do presente projeto. Assim, a configuração da coluna, equipamentos associados, efeitos da configuração, parâmetros do projeto e modo de operação da coluna são apresentados, esclarecendo a diferença entre o conceito da coluna ideal CDIIC-i e a configuração de coluna CDIIC desenvolvido nesta dissertação. Também, é estudada a eficiência termodinâmica da coluna convencional e da coluna CDIIC. Uma modelagem do estágio de equilíbrio foi descrita para o projeto de coluna convencional e para a coluna CDIIC, levando em consideração que os fenômenos de transferência de massa na coluna CDIIC são os mesmos da coluna convencional. Além

disso, foram descritos os diferentes tipos de eficiência, identificando a complexidade para o cálculo desta devido à falta de dados experimentais que permitam avaliar a configuração.

No Capítulo 5 são apresentados estudos de simulação para a coluna CDIIC e para a coluna convencional. Estes foram desenvolvidos para três tipos de misturas binárias (benzeno-tolueno, metanol-água e etanol-água), por meio de estratégias de simulação no software Aspen Plus V7.2. Também a caracterização das misturas, o estudo de equilíbrio de fases binário, a determinação de parâmetros da simulação e os casos de estudo estabelecidos para as simulações realizadas são desenvolvidos neste capítulo.

No Capítulo 6 foi estudada a necessidade da inclusão de painéis de calor no projeto da coluna CDIIC; assim, foi apresentada uma proposta de aproveitamento energético por meio de um ajuste geométrico da coluna. Sabe-se que quanto maior for a quantidade de unidades intermediárias e sistemas inclusos nas operações, maior é a complexidade. Estudos desenvolvidos para um estágio concêntrico é apresentado, fazendo uma análise do projeto de painéis de calor e o projeto interno da coluna CDIIC. Finalmente são enunciadas as necessidades para estudos futuros, em relação ao projeto de coluna CDIIC.

***Capítulo 2 – Revisão da
Literatura***

2.1 Sistemas com Aproveitamento da Energia em Destilação

O processo de destilação é um processo químico amplamente usado no campo da separação de sistemas líquido-vapor. No entanto, uma das principais desvantagens é a quantidade de energia requerida no processo. Nas colunas de destilação convencionais [1], a separação acontece devido às trocas de massa e calor entre os componentes nas fases líquida-vapor (troca de momento também, mas em menor extensão). A destilação fracionada usa altas temperaturas no refeedor para gerar a ebulição dos componentes e, posteriormente, o produto de topo é resfriado no condensador. A eficiência se encontra abaixo dos 10%. [2]. Por isso que diferentes estudos para o aproveitamento da energia em processos de destilação são continuamente desenvolvidos. No presente capítulo são apresentadas as operações de destilação mais significativas que permitiram a fundamentação conceitual da coluna CDIIC.

2.1.1 Coluna de Destilação Convencional

O processo de destilação consiste na separação, mediante vaporização, de misturas líquidas as quais se compõem de componentes individuais miscíveis entre si. Este processo permite a possibilidade de trabalhar com altas quantidades de forma contínua, o qual faz com que o processo de separação por destilação seja um dos preferidos nas indústrias químicas e petroquímicas [3].

Para o interesse em particular da indústria Brasileira, mais especificamente da indústria sucroalcooleira, a separação do sistema etanol-água é muito importante. Trata-se de uma mistura não ideal, formando um azeótropo com fração molar de aproximadamente 89% de etanol e 11% água a uma atmosfera [4]. É importante salientar que um azeótropo é uma mistura de componentes os quais possuem a mesma concentração nas fases líquidas e vapor no equilíbrio, não sendo possível a separação da mistura por destilação convencional. No caso da mistura etanol-água, a destilação convencional realiza a concentração da mistura até pontos próximos do azeótropo o qual é de aproximadamente 93% em massa.

A unidade convencional é constituída por duas seções, uma seção de esgotamento e outra de retificação. O esquema simplificado desta configuração é apresentado na Figura 1.

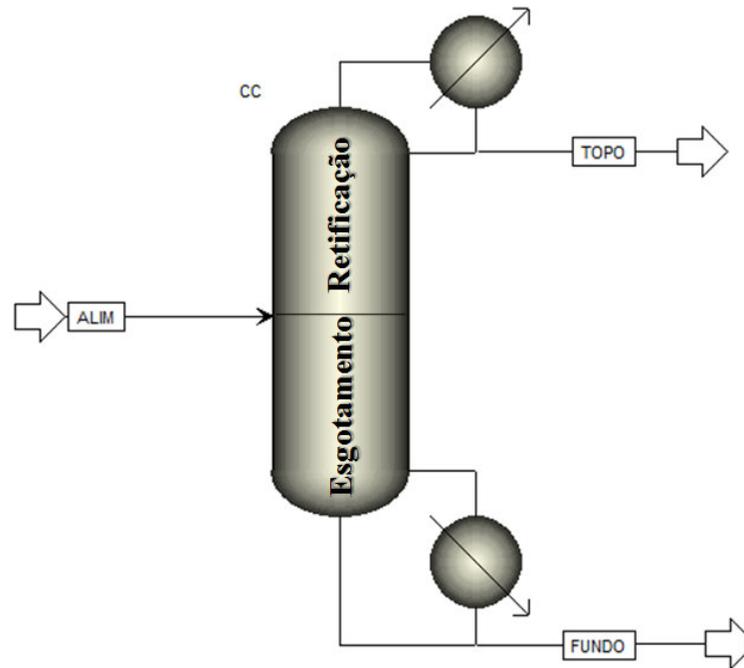


Figura 1. Configuração de Coluna Convencional

A seção de esgotamento tem a função de retirar os componentes com maior ponto de ebulição; o vapor produzido nesta seção é conduzido para a seção de retificação a qual contém os componentes mais voláteis.

Para o presente trabalho, o conceito da coluna convencional é usado, pois o novo arranjo da coluna apresenta o mesmo fenômeno de transferência de massa e é composto pelas mesmas duas seções, a de retificação e a de esgotamento. Uma modificação na configuração da coluna composta por um arranjo interno na disposição das seções é usado para aproveitar o calor presente na seção de retificação e, desta forma, aquecer a seção de esgotamento pelo meio de troca de calor.

2.1.2 Efeitos Múltiplos

Nas últimas décadas, várias configurações foram desenvolvidas para melhorar o comportamento térmico e a economia nos processos de destilação; a maioria destas foram

aplicadas na indústria e o aproveitamento de calor é realizado por meio de colunas localizadas em série. A idéia básica dos Efeitos Múltiplos conhecido na literatura aberta como *Multiple Effect Methods*, é utilizar o conteúdo de energia do produto de topo de uma coluna de destilação, para suprir a energia necessária pelo refeedor da seguinte coluna. A energia requerida pelo refeedor de uma unidade é diminuída devido à troca de calor fornecida pela corrente de produto de topo da unidade anterior. Outras unidades podem ser dispostas de forma sequencial aproveitando-se a energia presente na corrente de topo das unidades destiladoras.

A configuração inclui o conceito de análise *Pinch*, levando em consideração a necessidade de operabilidade em contínuo das colunas, os efeitos desta interação entre as correntes no processo global aproveita o calor presente no processo para o aquecimento das unidades destiladoras [5-7]. Na Figura 2 é apresentado um esquema desta configuração.

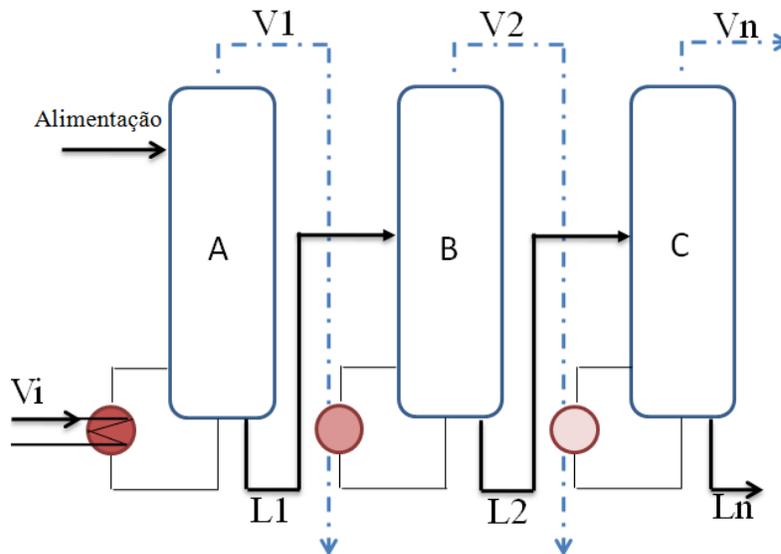


Figura 2. Múltiplos Efeitos

A Figura 2 apresenta um sistema típico de duplo efeito para três colunas de destilação. A energia é inserida na corrente V_i para o refeedor da coluna A, seguidamente o produto de topo é usado para aquecer o refeedor da unidade B e assim, da mesma forma com a unidade C.

O conceito dos múltiplos efeitos é usado na configuração de coluna CDIIC, onde a energia presente nas correntes do processo (produto de topo e produto de fundo) são aproveitadas no mesmo sistema, no caso do múltiplo efeito, esse aproveitamento resulta no aquecimento do refeedor da coluna seguinte e no caso da coluna CDIIC resulta na alimentação da seção de retificação com temperatura mais elevadas que permitam a troca de calor.

2.1.3 Acoplamento Térmico

O acoplamento térmico faz parte das alternativas para melhorar a eficiência energética em processos de destilação. A energia requerida pelo processo diminui devido ao aproveitamento do calor presente nas correntes de produto das unidades destiladoras, em virtude de um acoplamento térmico entre as unidades. Este aproveitamento elimina a necessidade de preaquecimento da alimentação nas colunas de destilação, pois basicamente, apresenta duas ou mais colunas de destilação acopladas termicamente. Em algumas situações, pode ser introduzida uma conexão de pressão para o transporte da mistura líquido-vapor de uma unidade para a outra. Na Figura 3a é apresentado um esquema de colunas acopladas termicamente com três unidades destiladoras e na 3b um esquema de aproveitamento do calor para separações mais complexas.

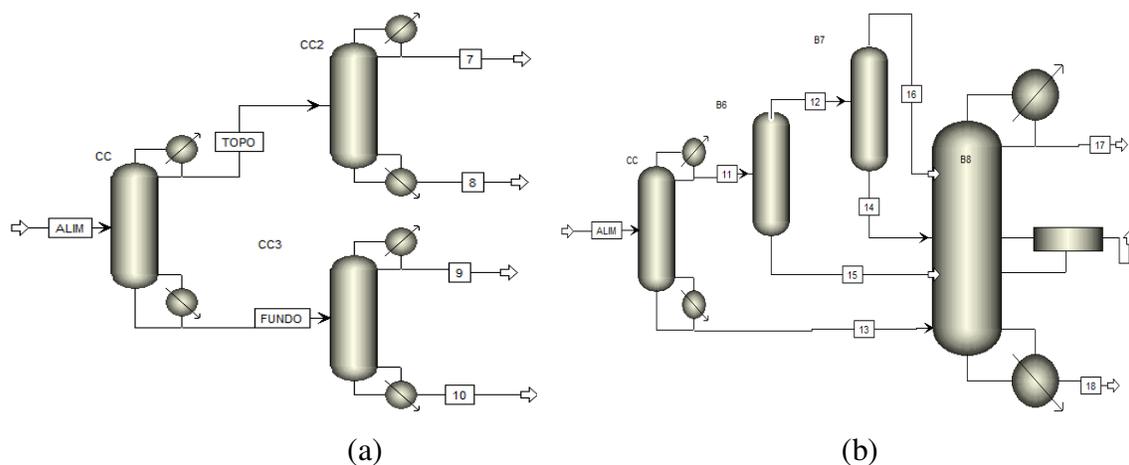


Figura 3. a) Colunas de destilação com Acoplamento Térmico b) Acoplamento Múltiplo

A destilação com acoplamento térmico foi apresentada inicialmente segundo a figura 3(a,b) [8,9], depois foi re-apresentada por Petlyuk et al. [10] quem incluiu algumas modificações em relação à mistura a ser tratada. Este arranjo apresentava vantagens para algumas separações ternárias. O acoplamento térmico [11-13] e a coluna *dividing wall* [14,15] descrevem idéias importantes na busca da diminuição do consumo de energia em processos de separação, fazendo uso de estratégias que aproveitam a energia presente no processo (interação das correntes quentes com outras etapas do processo que precisam de aquecimento). Estes conceitos permitem diminuir a quantidade de energia requerida, gerando idéias de projetos que podem ser usados de forma ajustada no conceito da coluna CDIIC.

2.1.4 Recompressão Direta de Vapor

Contrastando com os métodos precedentes, a recompressão direta de vapor conhecida na literatura aberta como *Direct Vapor Recompression - VRC* apresenta a possibilidade de aproveitamento térmico numa coluna só. Em comparação com o sistema de efeitos múltiplos [16,17], no sistema VRC o vapor presente na corrente de topo é comprimido para o aumento da pressão e temperatura até um nível que esta corrente possa aquecer o refeedor no fundo da coluna, esta compressão e uso da energia é conhecida também como: configuração com calor assistido por bomba.

A recompressão direta de vapor se apresenta como uma técnica muito útil para diminuir o consumo de energia, sua aplicação é viável para misturas de pontos de ebulição muito próximos, devido a uma pequena diferença de temperatura da parte inferior e superior da coluna. Nesta configuração, uma relação de compressão no compressor é necessária para o processamento. De fato, os estudos mostram que o potencial de redução de energia é maior quando no produto destilado o calor latente presente na corrente é alto e o gradiente de temperatura ao longo da coluna é baixo. Este efeito gera um aproveitamento da energia devido à troca no refeedor. Se não fosse assim, seriam necessários grandes refeedores para separar as misturas. Um esquema desta configuração é apresentada na Figura 4.

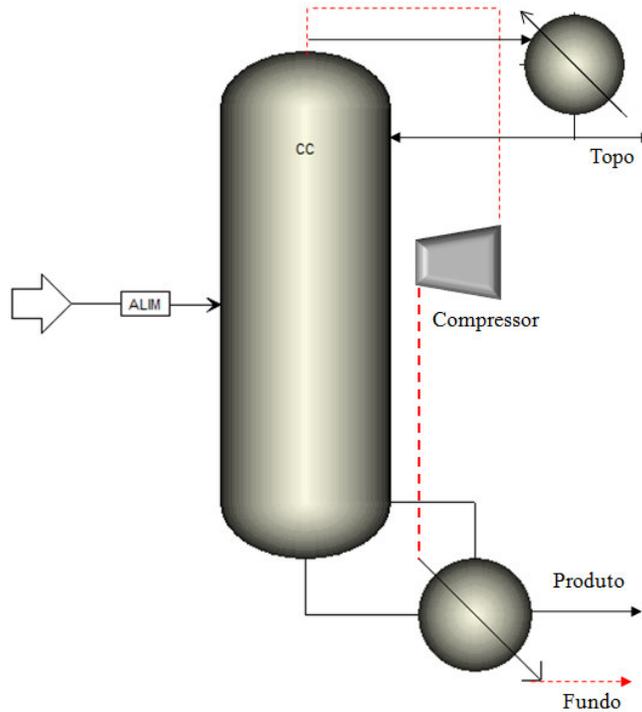


Figura 4. Coluna com Recompressão Direta de Calor

2.1.5 Destilação Diabática

Outro conceito proposto para diminuir o consumo de energia aplicado a colunas de destilação é a chamada Destilação Convencional Diabática [18,19], este processo não foi aplicado até a presente data numa escala industrial. Este conceito em comparação com a destilação adiabática substitui o refeedor e o condensador normalmente conectados no topo e no fundo da coluna, por um condensador e um refeedor integrado na seção de retificação e esgotamento, respectivamente. Os estudos apresentados na literatura aberta expõem o aproveitamento energético desta configuração, devido à taxa de produção de entropia menor em relação a coluna adiabática convencional.

Esta configuração permite visualizar pontos de resfriamento e aquecimento em faixas internas na coluna como foi apresentado na Figura 5. Estes operam fazendo o trabalho do refeedor e do condensador em relação a sua localização, respectivamente.

Em sua aplicabilidade, pontos internos de troca de calor são possíveis para a transferência de calor; este princípio é usado na coluna CDIIC, sendo a seção de retificação uma unidade de duplo propósito: o primeiro como unidade de retificação e o outro como unidade de troca de calor para o aquecimento da seção externa de esgotamento. Na Figura 5 é apresentado um modelo de coluna de destilação diabática.

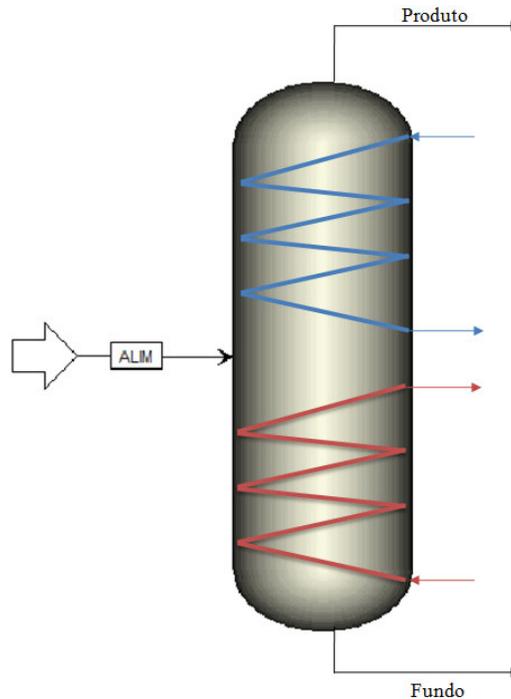


Figura 5. Coluna de Destilação Diabática

Nesta configuração, o processo inclui múltiplos estágios de igual forma que o projeto convencional. A destilação diabática contém nos seus estágios uma remoção de calor (geralmente, os dois ao longo da coluna) em suas seções, o calor é fornecido por meio de trocadores em cada prato.

Esta forma de atingir o sistema melhora termicamente a forma de adição de calor em comparação com a coluna convencional, obtendo economia devido à diminuição de energia desperdiçada no refeedor e no condensador.

2.1.6 Colunas Aquecidas por Corrente de Calor

Outra possibilidade de arranjo é o aquecimento das colunas de destilação por meio de correntes quentes; estas são produtos de outros processos associados que compõem o sistema. Estes tipos de configurações incluem as vantagens da troca de calor dentro do prato, o qual diminui as perdas no refeedor e no condensador; a energia nobre é transportada pelas correntes desde os produtos de outras unidades (correntes frias e quentes do processo) até as conexões nos pratos da coluna onde a energia é transportada na forma de calor latente que pode ser cedido facilmente. Alguns modelos com aquecimento por corrente de calor são apresentados na Figura 6.

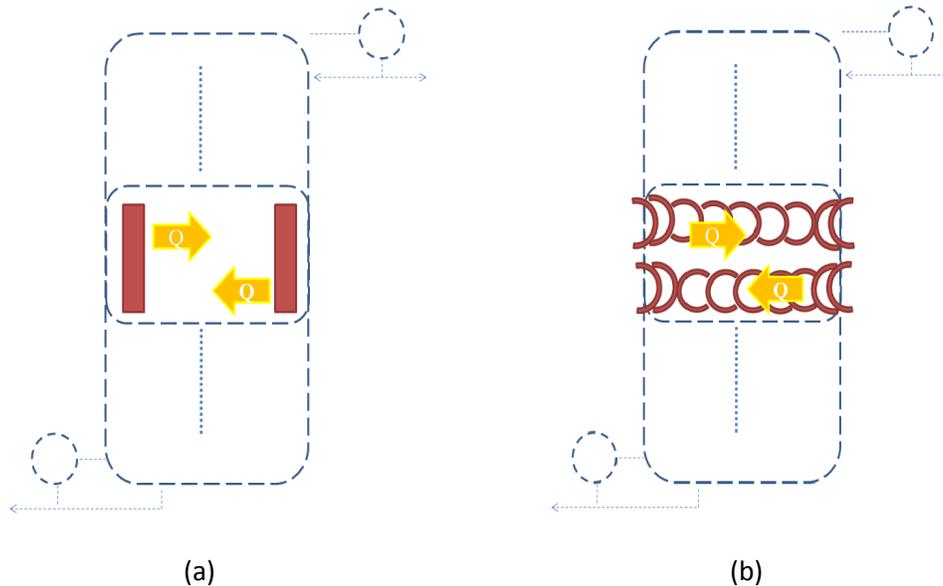


Figura 6. a)Painéis de Calor Internos b)Trocadores de Calor tipo Serpentina

O princípio deste sistema de aquecimento consiste no aproveitamento da energia do processo para ser cedida em pratos determinados (aqueles que apresentem menor temperatura) da coluna de destilação. Este sistema de aquecimento apresenta basicamente algumas complicações. Para o aquecimento dos fundos da coluna é necessário garantir temperaturas maiores à cedida pelo refeedor, isto gera complicações devido à exigência de unidades de processamento com maior temperatura que a unidade de destilação.

Também, modificações no projeto de pratos nas colunas fazem aumentar a complexidade do projeto, aumenta a queda de pressão na coluna e gera dificuldades na operação do sistema total (destilação e outras unidades de processo).

2.1.7 Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC)

Outra possibilidade é a integração interna de calor conhecida na literatura como coluna *HIDiC (Heat Integrated Distillation Column)* na qual se focaliza o presente estudo; esta combina as vantagens da recompressão direta do vapor e da destilação diabática, além da inclusão de conceitos de aproveitamento do calor em operações de separação. Na coluna CDIIC, o calor é transferido da seção mais quente à mais fria por meio de um arranjo concêntrico das seções, sendo assim, a seção de retificação trabalha a maior pressão e temperatura com relação à seção de esgotamento.

O princípio de recompressão direta de vapor é aplicado com intuito de aumentar a pressão entre as seções. De fato, a principal vantagem que apresenta a coluna CDIIC comparado com o projeto de coluna com recompressão do vapor é a possibilidade de operar numa relação de compressão menor uma vez que a troca de calor da configuração acontece ao longo da coluna entre duas seções e não no refeedor como na coluna com recompressão direta de vapor.

Teoricamente, a configuração da coluna é capaz de operar sem refeedor e condensador num tempo determinado. Esta configuração é conhecida como coluna CDIIC – ideal. Estes conceitos serão abordados de forma mais profunda no capítulo dedicado ao conceito da coluna CDIIC.

A altura da coluna CDIIC é outra vantagem, pois é significativamente menor. Para algumas misturas pode ser até a metade da altura das colunas convencionais, facilitando o processo de construção, a manutenção e a diminuição dos custos devido à diminuição na quantidade de material usado para a coluna.

Estudos apresentados por Laven (2010) mostram a coluna CDIIC - ideal com um grande potencial na diminuição do consumo de energia, ao redor de 90% em comparação com a coluna convencional de 50% com o projeto de coluna com recompressão direta de vapor.

Além disso, o projeto da coluna com integração interna de calor tem não somente como objetivo a diminuição do consumo da energia, mas também visa a diminuição das emissões

de CO₂ ao meio ambiente; estas podem ser reduzidas em 83% comparadas com o projeto convencional de coluna e 36% comparadas com a recompressão direta de vapor [20].

Atualmente, as condições ótimas da configuração de coluna CDIIC tais como troca de calor, projeto, misturas ternárias, misturas multicomponentes, colunas com reação química e algoritmos de controle ainda estão em desenvolvimento por diferentes grupos de pesquisa no mundo.

Estudos Desenvolvidos

Os estudos apresentados por Mah et. al. [21], com relação à diminuição no consumo de energia tiveram um impacto considerável entre os pesquisadores. Posteriormente, Seader [22] sugeriu diferentes configurações de coluna com recompressão direta proposta por Mah. Por outro lado, uma configuração de tubo e carcaça empacotada foi apresentada por Aso et al. [23] encaminhadas ao arranjo interno da coluna. Pesquisadores japoneses [24-27] estudaram a coluna com integração interna de calor, mostrando resultados de 60% na diminuição do consumo de energia com respeito à convencional. A primeira unidade foi construída em escala de laboratório em *Kimura Chem. Plant CO* em 1997, para o estudo da troca interna. Na América Latina, particularmente no Brasil, ainda não se fala desta tecnologia, sendo de grande importância este estudo para desenvolvimento de novas alternativas para diminuir o consumo de energia em processos de separação nas indústrias petroleiras e álcoolquímicas.

Estudos desenvolvidos no TU Delft em parceria com o *Dutch Ministry of Economic Affairs* (grant EETK10125), Energy research Centre of the Netherlands (ECN), ABB-Lummus, BP, DSM, SHELL and Sulzer Chemtech apresentaram a avaliação deste tipo de configuração e construíram uma unidade que permitiu o estudo da transferência de calor e a necessidade de incluir painéis no projeto da coluna.

O trabalho apresentado por Reijke et al. [28] contém um estudo da viabilidade industrial da coluna com integração interna de calor e sua aplicabilidade. Em Taiwan, estudos realizados numa unidade piloto são desenvolvidos pelo *Industrial Technology Research Institute* no departamento de aplicações e de processos pilotos, os quais representam grandes esforços em pesquisa sobre o projeto e a modelagem da coluna e sua aplicabilidade na indústria.

As pesquisas desenvolvidas, no entanto, concentram-se em aspectos de arranjo interno, no entanto, comportamentos de processo e informações experimentais de sistemas complexos não são publicados com frequência.

Análise Termodinâmica

Basicamente, o conceito de coluna CDIIC potencializa o aproveitamento da energia na unidade destiladora. Nas colunas de destilação convencionais a energia requerida na operação é fornecida no refeedor e no condensador. Mais especificamente a energia é usada para o aquecimento do sistema no refeedor e logo retirada no condensador para esfriar o sistema, isto gera perdas energéticas no sistema.

A idéia de intercâmbio interno é basicamente um aproveitamento e adição do calor removido no processo de forma uniforme ao longo da longitude da coluna. Vantagens termodinâmicas devido à igualdade na distribuição de energia para a introdução e remoção desta na coluna de destilação são apresentadas por diferentes autores [29-32]. Eles apresentam a possibilidade de um “projeto ótimo” de coluna, baseados no sentido da segunda lei, onde a entropia produzida no processo é distribuída de forma uniforme entre as variáveis do processo. O princípio de equipartição ou entropia de forma uniforme foi apresentado por Villiermaux et al, (19993); estes permitiram descrever desafios futuros para a pesquisa em engenharia química, aplicando o princípio da equipartição de entropia em colunas diabáticas, destilação quase-reversíveis e colunas CDIIC [33, 34]. A eficiência termodinâmica na coluna de destilação com integração interna de calor foi discutida em outros trabalhos [35,36].

No presente estudo, foi levado em consideração os estudos apresentados por Nakaiwa et al. (2003), onde se estudou a aplicação da integração interna de calor, a partir de pesquisas na unidade em operação, para sua avaliação termodinâmica; esta é estudada de forma mais aprofundada no capítulo termodinâmica e eficiência da coluna CDIIC.

Potencial na diminuição do consumo de Energia

Os estudos realizados para a coluna de destilação ideal com integração interna de calor conhecida na literatura como i-HIDiC (esta é apresentada com maior profundidade no

Capítulo 4) e simulações desenvolvidas por importantes grupos de investigação Japoneses [36,37], apresentaram a necessidade de validar os estudos numa planta piloto que permita determinar fatores fundamentais e possíveis inconvenientes que se podem apresentar na operação devido à configuração [38]. Os resultados e conclusões com respeito à viabilidade da coluna CDIIC mostram uma diminuição da energia de até 60% nos projetos de simulação, mas o número de estágios aumenta num fator de 2 a 3, comparado com a coluna convencional. A configuração de coluna CDIIC, apresenta vantagens para misturas com pontos de ebulição próximos, devido à diferença de pressão entre as duas seções, o efeito da pressão muda as condições de separação favorecendo a obtenção dos componentes puros de misturas com pontos de ebulição próximos.

Desta forma, a coluna CDIIC é viável para separações de misturas azeotrópicas, pois a diferença de pressão entre as duas seções permite a modificação das condições de separação da mistura. A maior quantidade de estudos publicados da configuração foi desenvolvida para misturas binárias; estudos de misturas multicomponentes foram realizados pelos grupos de pesquisa japoneses na unidade construída por eles. O potencial de diminuição energética e de emissões de CO₂ ao meio ambiente são muito promissores, além disso, o fato de outros grupos de pesquisa (TU Delft, University of Taiwan) de desenvolver em unidades industriais, mostram as grandes expectativas da coluna CDIIC.

2.2 Alternativas do Projeto Interno em Colunas com Integração de Calor

Em relação aos sistemas de aproveitamento da energia em colunas de destilação referenciados anteriormente, diferentes alternativas de projeto interno nas colunas de destilação foram desenvolvidos com a finalidade de aproveitar a energia presente na coluna de destilação; estes trabalhos são apresentados com a intenção de observar as diferentes possibilidades de troca de calor e estabelecer possíveis alternativas de troca de calor a ser usadas na simulação da coluna CDIIC no software Aspen Plus V7.2. Em geral, técnicas de troca de calor e aplicações implementadas na indústria permitem o aproveitamento da energia em colunas de destilação; estes sistemas permitem ter um maior conhecimento das possibilidades de arranjos a serem usados na configuração da coluna CDIIC. Os mais significativos para o conceito de coluna são descritos a seguir.

2.2.1 Colunas Inter-Acopladas

Uma das primeiras propostas consideradas para a integração interna de calor [29] apresenta duas colunas interconectadas em paralelo e separadas entre si, considerando que a destilação ocorre nas duas colunas. Uma representação é apresentada na Figura 7. O calor é transferido por meio de conexões térmicas submersas na mistura líquido/vapor, nas bandejas. Esta modelagem também é conhecida como colunas em paralelo.



Figura 7. Representação da Coluna Inter-acoplada

Este método é flexível e permite sua aplicação em projetos de coluna, mas, relativamente, a troca na área ativa do prato não é muito grande, além do que a energia deve ser armazenada numa unidade externa para sua posterior transferência (tubos de transporte). Outra possibilidade de troca de calor nesta configuração é por meio de tubos interconectados prato a prato o qual é uma limitação desta configuração devido à quantidade destes dispositivos dentro da coluna, dando lugar a custos adicionais, além de aumentar as perdas de calor com o meio.

Um esquema de separação sem conexão em cada bandeja [39], fazendo uso de uma unidade intermediária de armazenamento de energia para a transferência representa outra possibilidade de arranjo, o qual soluciona o problema de acúmulo de tubos; nesta configuração, uma bomba externa de calor é necessária para o transporte do vapor.

A transferência de calor é dada especialmente por meio de placas organizadas em forma de serpentina dentro das bandejas; isto implica uma transferência de calor total, mas restringe a área de interação do líquido e vapor dentro do prato.

2.2.2 Coluna Concêntrica

Esta configuração é a mais usada na atualidade e possui o arranjo interno que permite a troca direta de calor da seção de retificação para a seção de esgotamento e foi proposta por Govind e Glenchur [6]. Eles apresentaram a coluna concêntrica, em relação a uma configuração anular entre as seções de retificação e esgotamento como é exposto na Figura 8.



Figura 8. Representação da Coluna Concêntrica

Esta configuração concêntrica tem como princípio a transferência de calor sem possível vazamento da unidade interna com o meio ambiente, já que o calor da seção de retificação não vai diretamente à unidade externa, sendo trocado com a seção de esgotamento no caso da coluna CDIIC. Este conceito foi proposto para colunas de pratos, ou com área de transferência de calor restringida por paredes. Como consequência, a restrição da área de

transferência de calor, a qual é relativamente pequena faz com que o projeto interno seja insuficiente para mudar significativamente a energia no estágio.

2.2.3 Coluna Tubo e Carcaça

O problema da limitação da área de transferência de calor apresentada na configuração de coluna concêntrica [40] é minimizado pelo conceito de tubo múltiplo e carcaça [20], desta forma, o problema é solucionado por meio de múltiplos tubos internos que aumentam a possibilidade de transferência. Uma representação do sistema é apresentada na Figura 9.

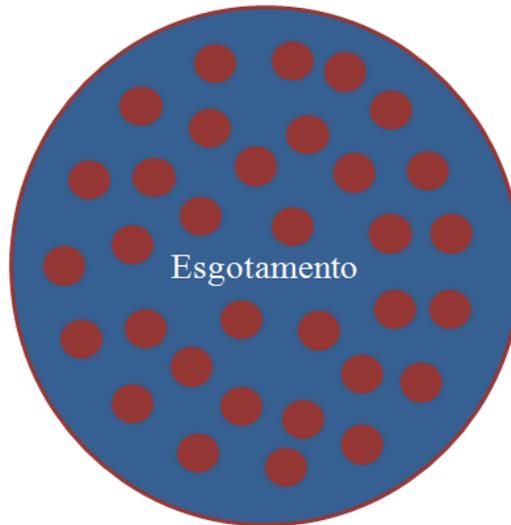


Figura 9. Representação da Coluna Tubo e Carcaça

Esta configuração permite o fracionamento de misturas devido à troca de calor dos tubos internos para a seção de esgotamento sendo o fenômeno de transferência de massa o mesmo.

O projeto interno é construído em função da área de transferência de calor, o que faz deste arranjo ter boas propriedades de troca. Da mesma forma que a coluna concêntrica, o calor pode ser transferido só à seção de esgotamento por meio da configuração da seção de esgotamento ao redor dos tubos; isto gera flexibilidade na área de transferência de calor ao longo da coluna. A desvantagem do tubo e carcaça na coluna CDIIC é que as bandejas da

seção de retificação e esgotamento precisariam de diâmetros de tubos muito pequenos o que complica o projeto da coluna.

2.2.4 Coluna com Troca de Calor no Prato

Esta coluna com integração interna de calor possui um intercâmbio tipo ‘*Plate-fin*’ estudado por Reijke [28] para melhorar a transferência de calor entre as seções. Este dispositivo inclui canais verticais alternos e adjacentes dispostos na seção de retificação e de esgotamento. Neste desenho, devido à troca direta dos pratos, a área de transferência de calor é longa e flexível. Ao mudar a geometria do sistema de troca, o área de transferência de calor pode mudar ao longo da altura da coluna, fazendo projetos internos em relação ao prato, assim, este tipo de intercâmbio é aplicável devido a sua flexibilidade de desenho.

Esta configuração apresenta dificuldades na construção e limpeza da unidade. Uma representação da configuração pode ser observada na Figura 10.

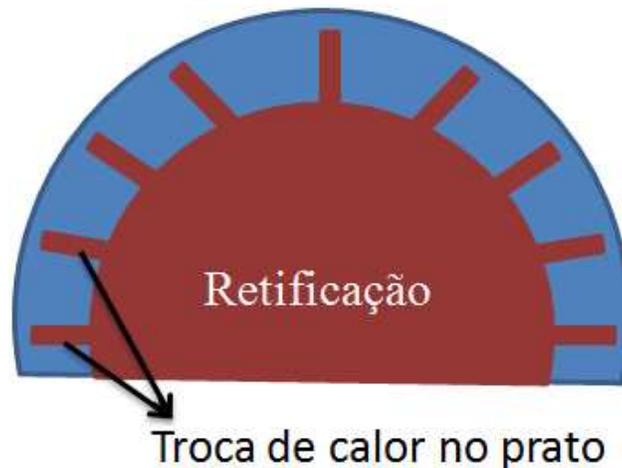


Figura 10. Representação da Coluna com Troca de Calor no Prato.

A configuração apresenta a possibilidade de trocar o calor nos pontos mais longos da seção de esgotamento localizada de forma concêntrica (seção externa), por isto, um arrnajo no prato onde o espaço vertical diminui ao longo da coluna, além de paredes enrugadas, permite melhorar a troca de energia no prato.

2.2.5 Coluna Concêntrica com Painéis de Calor

Nesta configuração, se apresenta a coluna concêntrica equipada com painéis de calor (Figura11). Sua configuração interna se dá na estrutura dos pratos, onde a transferência de calor acontece entre as seções de retificação e de esgotamento. Na parte inferior da coluna CDIIC, existe a necessidade de maior troca de calor, pois nestes estágios o líquido na seção de esgotamento precisa ser aquecido para gerar a separação, enquanto a seção de retificação contém a maior quantidade de calor latente para a transferência, conseqüentemente, a área de transferência disponível nos estágios para aumentar a transferência deve ser maior.

A transferência de calor é dada da seção de esgotamento para a seção de retificação, entretanto, com o intuito de que o vapor da seção de retificação possa entrar ao painel, trocar a energia e condensar-se, as duas seções devem encontra-se dispostas de forma concêntrica para que o líquido condensado possa voltar à mesma seção.

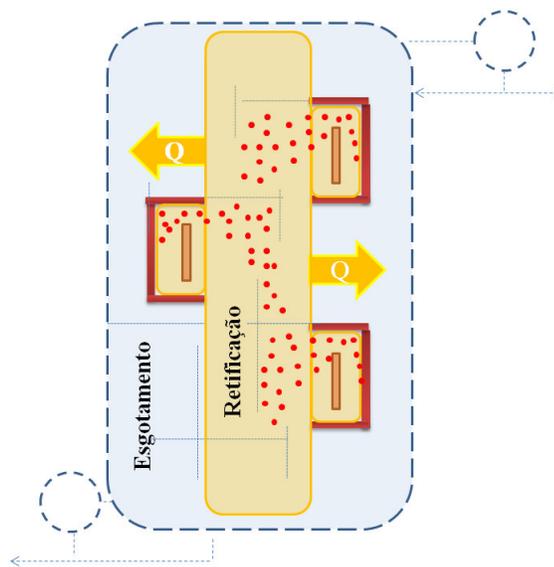


Figura 11. Coluna CDIIC com Painéis de Calor

Nesta configuração, a posição dos painéis de calor está na seção de esgotamento. Em relação aos outros conceitos, este arranjo interno se encontra disposto por meio de uma conexão aberta entre as duas seções. O vapor da seção de retificação é o único que consegue entrar no painel; o vapor permite a evaporação da seção disposta de forma

concêntrica e o líquido condensado cai de volta na seção de retificação. Nesta configuração, a colocação dos painéis de calor pode mudar em relação ao projeto da coluna, pois a disposição dos painéis pode ser estabelecido dentro da seção de esgotamento. Assim, uma quantidade de vapor da seção de retificação pode entrar no painel disposto na seção de esgotamento, com o intuito que a transferência de energia do vapor para o líquido facilite a evaporação parcial do líquido presente na seção de esgotamento.

2.2.6 Coluna de Parede Dividida

O conceito de coluna de parede dividida apresenta outra forma de arranjo para o aproveitamento do calor. Seader [22] apresentou a configuração de duas seções semi-cilíndricas onde a transferência de calor acontece de uma seção para a outra por meio de tubos internos colocados nos estágios da coluna. Uma representação da configuração de parede dividida é apresentada na Figura 12.

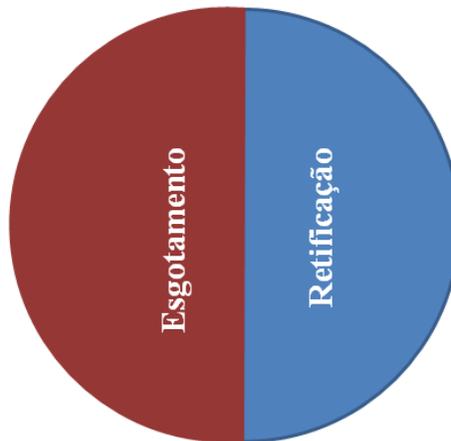


Figura 12. Representação da Coluna de Parede Dividida

Nesta configuração, a queda de pressão e os coeficientes de transferência de calor da parede permitem a transferência da energia devido à diferença de temperatura entre as duas seções dispostas de forma vertical. Este conceito é aplicável a colunas de prato e permite uma área flexível de troca no estágio. Ian et al. (2008) apresentaram a patente da coluna

com troca de parede dividida; nesta foi estabelecido a diminuição do custo de construção, desenho e operação da coluna. A configuração da coluna apresenta uma mínima interferência no processo de destilação; por esta razão, o intercâmbio da energia na parede de uma seção para a outra simplifica a troca, a qual acontece na parede intermediária na coluna devido ao calor latente presente na seção de retificação.

2.3 Comentários e Conclusões

Como o parâmetro mais importante do projeto da coluna CDIIC é o coeficiente de transferência de calor no interior da coluna de destilação e a respectiva área de transferência, diferentes projetos em relação a estes parâmetros são necessários para encontrar as condições ótimas de operação.

Durante os estudos apresentados neste capítulo, unidades de coluna CDIIC foram projetadas para o entendimento do processo e desenvolvimento das simulações. Uma coluna piloto construída no Japão por um grupo de pesquisadores para o estudo deste arranjo interno tipo tubo carcaça permitiu conhecer numa escala significativa as condições do processo.

Outro protótipo foi desenvolvido pelo TU Delf na Holanda, onde foram estudados projetos internos de coluna. Foi incluído projeto de painéis de calor que permitiram melhorar a troca de calor. Na China, foi construída a última unidade de coluna, desenvolvendo estudos numa escala piloto, onde foram estudadas estratégias de controle e a transferência de calor do projeto concêntrico.

No presente ano, os esforços de pesquisa estão focados em aplicações em escala industrial. As possibilidades de troca de energia e o potencial da configuração apresentam grande interesse aos pesquisadores para o aprimoramento de sistemas de aproveitamento energético e o desenvolvimento da coluna CDIIC. Os estudos principais no projeto da coluna CDIIC estão dirigidos à transferência de calor eficiente entre as seções que permitam uma boa separação. Além de reduzir os custos no consumo de energia e contribuir com a diminuição de emissões ao meio ambiente, esta coluna permite o avanço tecnológico em processos de separação.

O objetivo do presente trabalho é o estudo da coluna com integração interna de calor por técnicas de simulação que permitam a modelagem aproximada da configuração de coluna CDIIC no simulador convencional Aspen Plus V7.2, baseado nos estudos e arranjos citados.

***Capítulo 3 – Transferência de
Massa e Energia na Coluna
CDIIC***

3.1 Introdução

A coluna com integração interna de calor (CDIIC) combina as vantagens do vapor de recompressão, destilação diabática, coluna concêntrica e coluna tubo carcaça. Estes conceitos levaram à formulação do conceito de coluna CDIIC aproveitando o calor da seção de retificação para o aquecimento da seção de esgotamento; o arranjo concêntrico (seção de retificação de forma concêntrica dentro da seção de esgotamento) permite a troca da energia presente na seção de retificação para o aquecimento da seção de esgotamento.

Na Figura 13 é apresentado o modelo de coluna CDIIC aproximado para efeitos de simulação, o qual descreve de maneira esquemática o comportamento físico da coluna.

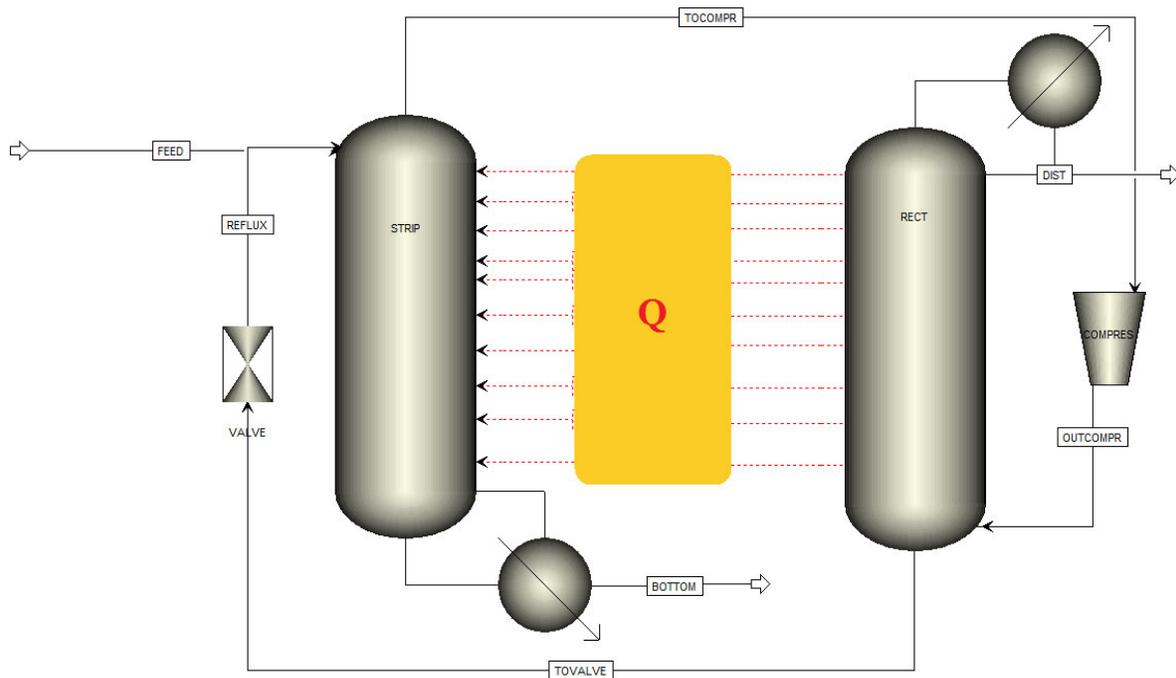


Figura 13. Representação da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor. (Pulido et al. 2010)

Estudos de simulação indicam a necessidade de uma efetiva distribuição e troca de calor, por isto, estudos desenvolvidos por Lavèn (2010) no grupo de pesquisa no TU Delft, apresentaram a necessidade de localizar painéis na seção de esgotamento (Figura 14). A

figura apresenta esquematicamente a configuração das seções, a possibilidade de diferentes projetos de painéis de calor e vertedouros na seção de esgotamento da coluna CDIIC.

Nesta configuração, o vapor da seção de retificação entra no painel de transferência onde acontece a troca de energia, em seguida o vapor é condensado devido à troca e volta como líquido à mesma seção; na seção de esgotamento simultaneamente o líquido é evaporado e parte do vapor condensado no estágio superior volta como líquido gerando o equilíbrio líquido-vapor.

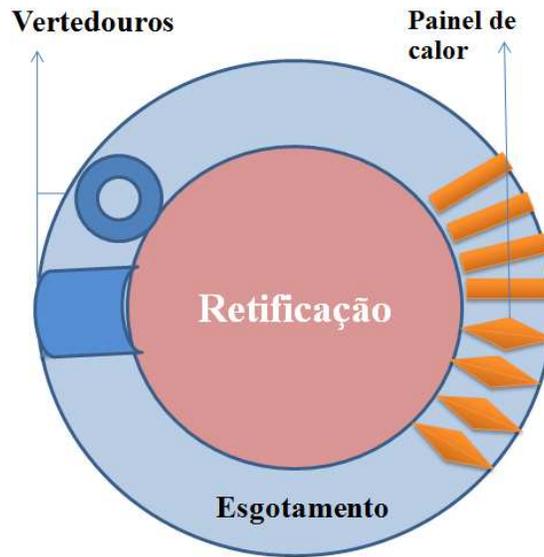


Figura 14. Localização de Painéis em Seção de Esgotamento.

É importante ressaltar que a condução do vapor aos painéis deve-se ao próprio processo e a condensação é espontânea devido ao contato entre as seções, além de que praticamente não há diferença de pressão na entrada e na saída do painel; estudos referentes à implementação de painéis são apresentados no Capítulo 6.

Em relação aos diferentes estudos de aproveitamento de calor, é complexa a atribuição de um modelo ao novo arranjo de coluna. Chan and Fair [43] usaram um modelo volumétrico de transferência de massa que tentam determinar a área interfacial entre as fases líquida e vapor.

Seguidamente, Prado e Fair [45] realizaram os primeiros esforços no desenvolvimento de um modelo de mistura no prato para diferentes regimes [41]. O modelo desenvolvido pelos autores, baseado no sistema ar/água numa escala experimental relativamente pequena, permitiu estender a base de dados, mas sem aplicação a líquidos sem condutividade elétrica. Garcia e Fair [44] estenderam o modelo para sistemas com misturas de hidrocarbonetos.

O modelo apresentado por Garcia aparece como o modelo geral de eficiência para um prato convencional mais adequado em relação à configuração concêntrica de prato da coluna CDIIC. Este modelo é o único modelo fundamental até o momento com uma base de dados experimental extensiva obtida a partir de eficiências de prato [41] o qual pode ser aplicado no projeto de coluna CDIIC contando com dados experimentais da mistura de estudo.

Este estudo também foi apresentado por Aris de Reijke (2005) como o mais adequado para o estudo da configuração de coluna CDIIC. No presente trabalho, devido à falta de dados numa escala suficientemente grande o estudo da eficiência será desenvolvido em relação à eficiência termodinâmica da coluna CDIIC.

3.2 Transferência de Massa

O fenômeno de transferência de massa da coluna CDIIC é abordado no presente capítulo. Considerando que o objetivo desta dissertação é o estudo do conceito da coluna CDIIC e seu potencial de transferência de calor, para a análise foram desenvolvidas simulações em softwares comerciais (Aspen Plus V7.2, Ansys-CFX), fazendo uso dos modelos contidos nos simuladores para descrever o processo.

Uma das maiores dificuldades da coluna CDIIC é a falta de informação numa escala suficientemente grande, no entanto, diferentes consórcios de pesquisadores e universidades como AIChE model [42], Chan e Fair [43] trabalharam no ajuste de correlações empíricas em base volumétrica para o cálculo de coeficientes de transferência de massa de misturas binárias, usando a zona interfacial entre a fase líquida e vapor para a análise da transferência de massa. Garcia e Fair [44] continuaram os trabalhos realizados e estenderam o modelo para misturas de hidrocarbonetos.

Para a coluna CDIIC, é necessária a introdução de uma grande quantidade de pesquisa nesta área; isto permitirá a validação dos estudos de modelagem e simulação. Dado que a coluna apresenta diferentes tipos de possibilidades no arranjo interno, diferentes abordagens são definidas pelo grupo de pesquisa partindo do mesmo conceito de coluna CDIIC.

Conseqüentemente, os resultados das unidades piloto construídas são limitados em sua informação o qual gera desvantagens na evolução do projeto.

A modelagem para o processo de destilação será feita tomando como base os estudos apresentados por Tsung (2010) e projeto de coluna convencional. Os estudos de simulação foram focados para misturas binárias a serem separadas na configuração aproximada de coluna CDIIC no software comercial Aspen Plus V7.2.

Parâmetros iniciais foram levados em consideração para a simulação da coluna CDIIC de forma que a representação no simulador apresentara condições semelhantes ao processo real.

O aquecimento inicial do sistema é realizado por meio de um refeedor que aquece a mistura até a ebulição. Visando o aproveitamento do calor latente presente na corrente de produto de topo, não foi tido em conta o condensador na seção de retificação. Este arranjo implica que a seção de retificação opera sem condensação.

A modelagem está baseada na configuração apresentada na Figura 16. A formulação das equações de balanço de massa e energia é ajustada aos modelos apresentados por Tsung [87].

Além da nomenclatura normalmente usada foram definidos:

- N é o número total de pratos (estágios);
- n é o estágio em análise da seção de retificação equivalente à seção de esgotamento;
- j é o estágio em análise de transferência de calor;
- B da palavra em inglês *bottom*, referência ao fundo;
- D da palavra em inglês *Distillate*, referência ao destilado;
- R referência à seção de retificação;

- S referência à seção de esgotamento;
- V representa o fluxo da fase vapor;
- F representa o fluxo da fase líquida.

Para facilitar a escrita das equações, mas sem perder objetividade na modelagem da coluna, foi considerado:

- As seções não experimentam perda de pressão;
- O estágio se encontra em equilíbrio térmico;
- A mistura é uniforme e homogênea;
- As colunas operam de forma adiabática.

O produto de topo da seção de retificação é (V_D), este é vapor e o produto de fundo líquido na seção de esgotamento é (L_E). A coluna CDIIC está constituída por uma seção de retificação, uma seção de esgotamento, o estágio de alimentação, o compressor e o refeedor parcial.

Os estágios foram assumidos ideais para a seção de retificação e esgotamento e foram enumerados de forma individual. Desta forma, NR é o número de estágios na seção de retificação e NS o número de estágios na seção de esgotamento.

O conceito de coluna CDIIC em relação à diferença de pressão é levado em conta, sabendo-se que a coluna de retificação opera a maior pressão e temperatura que a seção de esgotamento. O calor é transferido estágio a estágio como é apresentado na Figura 15.

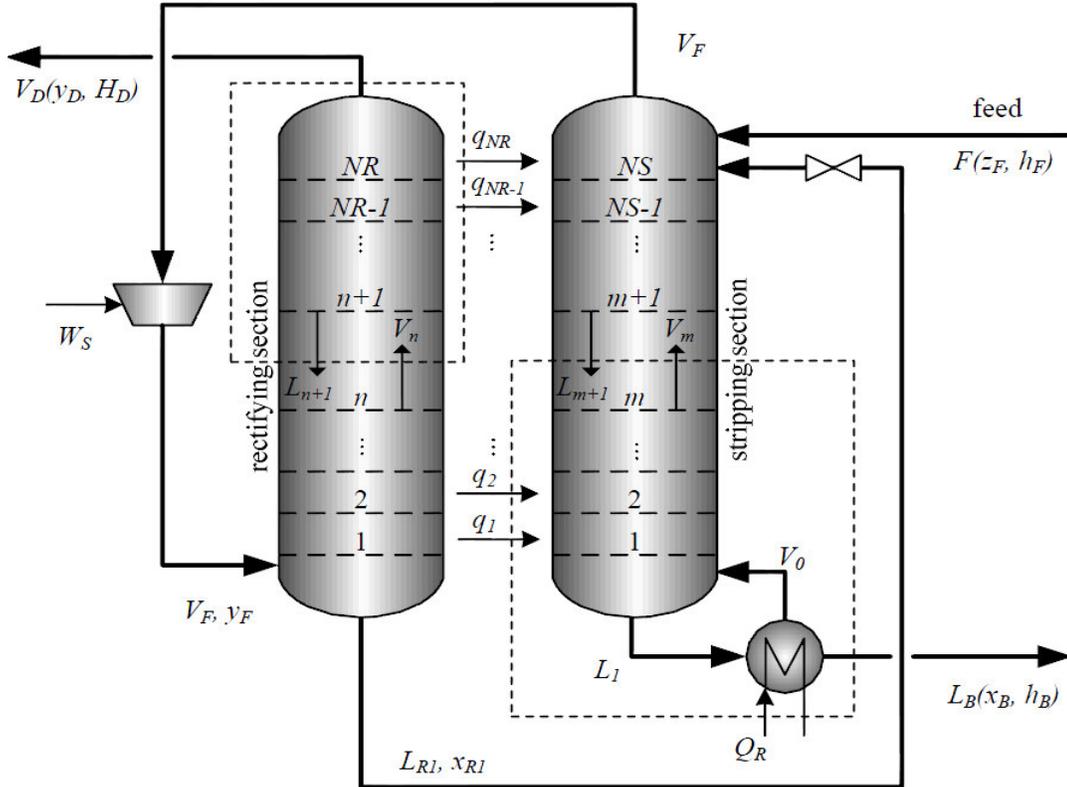


Figura 15. Configuração Conceitual da Coluna CDIIC (Tsun-Jen Ho, 2010)

A modelagem será descrita inicialmente para a seção de retificação, depois para a seção de esgotamento e finalmente uma descrição das equações MESH da configuração. Para a modelagem da mistura binária e facilidade na referência dos componentes, o componente mais leve (aquele com ponto de ebulição mais baixo da mistura) será chamado como componente *light* e o componente menos leve (aquele com ponto de ebulição mais alto da mistura) é o componente *heavy*.

3.2.1 Seção de Retificação da coluna CDIIC

As equações descritas estão baseadas em balanços de massa e de energia do projeto de coluna convencional e feitas para uma mistura binária. Uma modificação na equação de

energia é feita para a modelagem da troca de calor entre as duas seções, estas são apresentadas a seguir:

Balço de massa no prato superior da seção de retificação:

$$V_n - L_{n+1} = V_D \quad (1)$$

Balço de massa no prato n para o componente *light* (mais volátil):

$$V_n y_n - L_{n+1} x_{n+1} = V_D y_D \quad (2)$$

Balço total de energia em função da entalpia:

$$V_n H_n - L_{n+1} h_{n+1} = V_D H_D + \sum_{j=n+1}^{NR} q_j \quad (3)$$

Onde H é a entalpia de vapor e h é a entalpia do líquido. O termo $\sum_{j=n+1}^{NR} q_j$ [MJ/h, ou MW] representa o calor transferido no estágio j ao longo da coluna; é importante ressaltar que este termo é o diferencial da coluna CDIIC com respeito ao modelo convencional. Este representa o arranjo interno de troca de calor entre as duas seções. Do mesmo modo, a taxa de transferência de calor trocado entre as duas seções para cada estágio da seção de retificação com a seção de esgotamento (q_j) é:

$$q_j = U_j A_j (T_{Rj} - T_{Sj}) = U_j A_j \Delta T_j \quad (4)$$

Onde T_{Rj} é a temperatura do estágio da seção de retificação j e T_{Sj} é a temperatura correspondente do estágio da seção de esgotamento. U_j é o coeficiente de transferência de calor e A_j é a área de transferência. Na presente dissertação, nos estudos de simulação desenvolvidos foi assumido q_j constante; esta consideração permite estabelecer uma troca de calor uniforme de uma seção para a outra. Para o estudo da modelagem e projetos

futuros da coluna, a área de transferência e o coeficiente de transferência de calor são fundamentais para uma avaliação mais realista do processo.

3.2.2 Seção de Esgotamento da coluna CDIIC

A modelagem para a seção de esgotamento foi desenvolvida para cada estágio incluindo o calor do refeedor, para a facilidade e diferenciação da seção as equações são descritas a seguir:

Balanco de massa no prato de fundo na seção de esgotamento:

$$L_{m+1} - V_m = L_E \quad (5)$$

Balanco de massa no prato m para o componente *ligh*:

$$L_{m+1}x_{m+1} - V_m y_m = L_E x_E \quad (6)$$

Balanco total de energia em função da entalpia:

$$L_{m+1}h_{m+1} - V_m H_m = L_E h_E - Q_R - \sum_{j=1}^m q_j \quad (7)$$

É importante ressaltar que o termo Q_R é o calor requerido pelo refeedor na seção de esgotamento como foi dito anteriormente.

3.3 Considerações Gerais da coluna CDIIC

Na configuração da coluna CDIIC, a corrente de alimentação entra no topo da seção de esgotamento junto com a corrente de produto de fundo da seção de retificação.

Esta interação entre as duas seções transporta a mistura dentro do sistema até a obtenção dos produtos de topo e de fundo, respectivamente. Por esta razão, é considerada uma

modelagem do sistema em conjunto e, deste modo, obter equações que permitam uma descrição mais clara do sistema. Estas são apresentadas em seguida:

Balço total de massa da coluna CDIIC:

$$F = L_B + V_D \quad (8)$$

Balço de massa para o componente *ligh da coluna CDIIC*:

$$Fz_f = L_B x_B + V_D y_D \quad (9)$$

Onde F é a vazão de alimentação na seção de esgotamento e z_f a concentração molar do componente z na alimentação.

Partindo-se da primeira lei da termodinâmica é descrita a equação $\Delta U = Q + W_s$ que descreve o processo isotérmico, o calore o trabalho. Onde W_s [MJ/h, ou MW] é o trabalho realizado por sistemas mecânicos (compressor da configuração na CDIIC). A configuração de coluna CDIIC dispõe do trabalho desenvolvido pelo compressor para garantir as condições de operação da coluna, deste modo o balanço de massa em função da entalpia é apresentado como:

$$Fh_F = L_B \left(h_B - \frac{Q_R + W_s}{L_B} \right) + V_D H_D \quad (10)$$

O trabalho do compressor é indicado, sendo caracterizado na simulação como um processo adiabático reversível, o qual é também conhecido como processo isentrópico, desta forma:

$$W_s = \frac{\gamma RT_{in}}{\gamma - 1} \left[\left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^{(\gamma - 1)/\gamma} - 1 \right] V_F \quad (11)$$

Onde V_F é o fluxo de vapor do primeiro estágio. O coeficiente politrópico γ é o valor constante da razão de calor específico.

Da equação (4) na qual se especifica a transferência de calor entre a seção de retificação e a de esgotamento, sendo o produto da área de transferência de calor, o coeficiente de transferência de calor e a diferença de temperatura de forma proporcional à taxa de energia transferida.

O conceito de recuperação energética apresentado por Levenspiel (1993) foi tido em conta para o estudo do calor trocado entre as seções. Este apresenta a troca de calor entre fluidos que se encontram separados por uma parede interna, no projeto, coeficientes de transferência de calor e modelos de contato entre as fases são necessários o qual complica os cálculos do sistema. Esta modelagem pode ser simplificada fazendo a consideração de: fluxo em pistão, fluxo misturado, fluido totalmente misturado, alimentação não misturada e fluido em repouso [46].

Levando em consideração o conceito apresentado por Levenspiel, foram usadas as considerações feitas para a simplificação dos cálculos da energia e desta forma obter a quantidade de energia localizada na seção de retificação.

A quantidade de energia q usada para o desenvolvimento das simulações foi calculada da equação a seguir:

$$q_j = \Delta H \quad (12)$$

Onde q_j é a taxa de calor transferida da seção de retificação para a seção de esgotamento e j , é o estágio em análise de transferência de calor. Desta forma, a taxa máxima de energia transferida se encontra a partir das entalpias do fluido em cada estágio n ; esta equação está descrita em ausência de trabalho mecânico.

3.4 Descrição das equações MESH

Para uma descrição detalhada da modelagem da coluna, as equações fundamentais MESH para o equilíbrio no estágio são descritas a seguir para o estado estacionário.

Equações de balanço de material

$$0 = L_{j-1} + V_{j+1} - L_j - V_j + F \quad (13)$$

Balanço de massa por componente:

$$0 = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} - L_jx_{i,j} - V_jy_{i,j} + F_{BF} \quad (14)$$

Equações de Equilíbrio

$$f_i^L = \phi_i^L x_i P \quad (15)$$

$$f_i^V = \phi_i^V y_i P \quad (16)$$

$$f_i^L = f_i^V \quad (17)$$

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (18)$$

Equações de somatório

$$\sum_{i=1}^{NC} x_{i,j} = 1 \quad (19)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} y_{i,j} = 1 \quad (20)$$

Equações de balanço de energia

$$0 = L_{j-1}H_{j-1}^L + V_{j+1}H_{j+1}^V - L_jH_j^L - V_jH_j^V + FH_F + Q_j \quad (21)$$

3.5 Comentários e Conclusões

Baseando-se nos estudos citados e no projeto de coluna convencional, foi descrita uma modelagem da coluna CDIIC uma descrição específica das equações na seção de retificação e esgotamento foi apresentada baseada no trabalho apresentado por Tsung. Para o maior entendimento da coluna e dos fenômenos que acontecem em sua configuração. Seguidamente, uma descrição geral da coluna com integração de calor foi feita levando em consideração o trabalho do compressor. A descrição das equações MESH foi estabelecida para uma mistura binária as quais permitiram caracterizar de forma rigorosa o sistema em equilíbrio.

Diferentes trabalhos foram apresentados na literatura aberta em relação à modelagem da coluna CDIIC, estes representam as unidades piloto construídas no mundo até hoje, portanto a modelagem está em função dos arranjos desenvolvidos e projeto específico de cada unidade. Para facilitar os cálculos da energia transferida entre as seções o presente estudo pretende desenvolver simulações aproximadas no software comercial Aspen Plus (aproximada pois este software não contém a coluna CDIIC como operação unitária), para isto foi levado em consideração o conceito de Levenspiel para o cálculo do calor no estágio. Em consequência, o estudo da modelagem permitiu determinar a possibilidade de modelar (entenda-se modelar como a realização de configurações no software Aspen Plus V7.2) a coluna com as ferramentas presentes no software.

Os estudos de modelagem permitiram estabelecer critérios para serem levados no simulador, de forma a estabelecer as possibilidades de desenvolver uma modelagem da coluna no software Aspen Plus V7.2, fazendo uso dos modelos descritos pelo simulador.

***Capítulo 4 – Coluna de
Destilação com Integração
Interna de Calor (CDIIC):
Parâmetros e Projeto***

4.1 Introdução

Demonstrou-se que o novo conceito de coluna CDIIC permite trocas de calor mais eficientes entre os estágios diminuindo o consumo de energia do processo. Conceitualmente, a coluna CDIIC está composta por uma seção de retificação instalada concêntrica dentro da seção de esgotamento de forma concêntrica, um refeedor, um condensador, um compressor e uma válvula. O arranjo interno permite diminuir o consumo de calor devido à troca do calor latente da seção de retificação para o aquecimento da seção de esgotamento, por esta razão a quantidade de energia requerida pelo refeedor diminui. A configuração da coluna CDIIC faz parte de múltiplos projetos inovadores decorrentes dos compromissos acordados no protocolo de Kyoto, onde se estabelece o compromisso dos países mais desenvolvidos na diminuição de emissões ao meio ambiente.

Em geral, a configuração de coluna CDIIC propõe uma nova disposição de coluna que apresenta vantagens na diminuição do consumo energético em processos de destilação, além da diminuição das emissões de CO₂ ao meio, conseqüente da diminuição da energia requerida pelo processo.

4.2 Conceito da Coluna CDIIC – i

É complexo atribuir o desenvolvimento do conceito de coluna CDIIC a um autor só, mas a maior quantidade de literatura aberta publicada em relação à configuração é apresentada por Nakaiwa, líder do projeto de investigação no Japão. Estudos como o desenvolvimento da extensão do método de McCabe – Thiele para a configuração da coluna com integração interna de calor foram realizados pelo grupo de pesquisadores japoneses [24, 47, 48, 49], identificando a possibilidade de operar sem a necessidade de refeedor, nem condensador. Esta configuração é conhecida na literatura como *Ideal-Heat Integrated Distillation Column – i-HIDiC* que em sua tradução ao português é chamada Coluna com Integração Interna de Calor-ideal. Uma representação gráfica da coluna CDIIC – i pode ser encontrada na Figura 16.

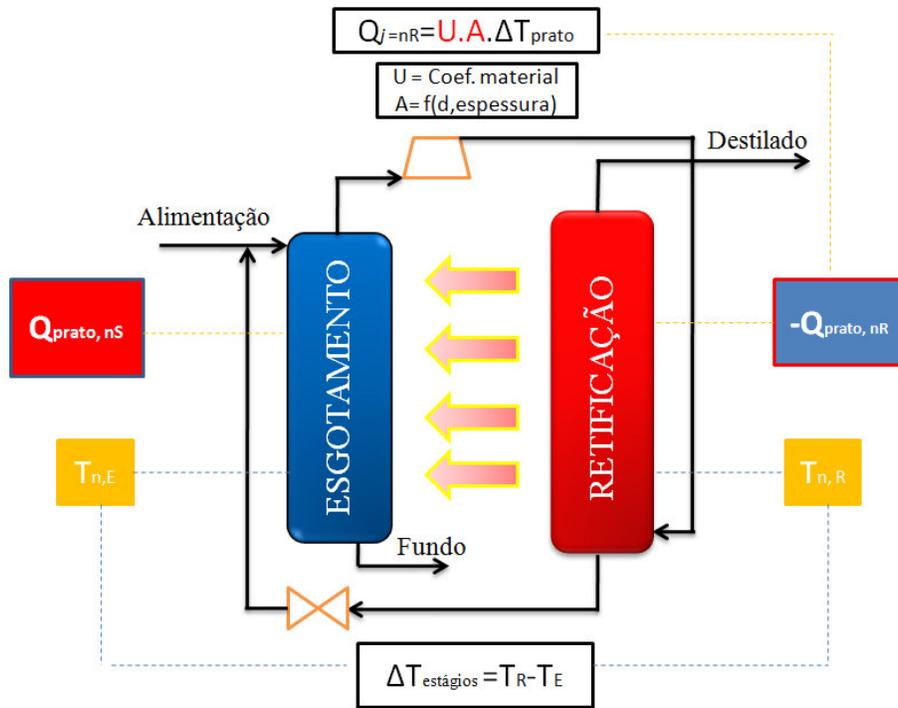


Figura 16. Configuração de Coluna CDIIC - i

A configuração exposta na Figura 16 parte do princípio básico da coluna convencional, onde a unidade de destilação se compõe de uma seção de esgotamento e outra de retificação. O fenômeno de transferência de massa na unidade convencional é o mesmo que na coluna CDIIC. A diferença está na transferência de calor entre a seção de retificação e a seção de esgotamento, assistidas por um compressor e uma válvula que permitem obter as condições de operação do sistema.

O acoplamento interno da Coluna Ideal CDIIC visa a troca de calor entre as duas seções instaladas concentricamente como se apresenta na Figura 17. A seção de retificação que opera a pressões e temperaturas mais altas que a seção de esgotamento permite a troca de calor para a seção de esgotamento, diminuindo a energia necessária pelo processo. Desta maneira, a integração de calor gera refluxos na seção de retificação e fluxos de vapor na seção de esgotamento. O princípio fundamental da coluna Ideal -CDIIC [49, 50, 51] é o não uso de condensador e refeedor na unidade de operação. É claro que para o início da operação, é necessário o uso destes equipamentos. No entanto, este conceito visa a redução

da energia requerida pelo refeedor e despendida no condensador até zero em relação à transferência de calor entre a seção de retificação e de esgotamento.



Figura 17. Representação do Arranjo Interno da Coluna CDIIC (Pulido et al. 2010)

A síntese e análise da coluna CDIIC-i discutida por Takamatsu et al. [51] mostra a viabilidade da operação do processo, mas apresenta a necessidade inicial de usar o refeedor para dar início à operação. Os estudos realizados pelos grupos de pesquisa indicam que a diminuição energética com respeito à coluna convencional é significativa e de operação viável, no entanto a configuração da coluna precisa dos equipamentos associados para sua operação [52-60].

4.3 Conceito da Coluna com Integração Interna de Calor - CDIIC

A coluna de destilação com integração interna de calor CDIIC possui o mesmo princípio da coluna CDIIC -ideal (i-HIDiC, *ideal Heat Integrated Distillation Column*) em relação à troca de calor entre as seções, a única diferença entre eles é que a coluna CDIIC inclui o refeedor e o compressor no processo.

O processo é representado na Figura 18, consta de duas colunas anulares, uma trabalha internamente como seção de retificação e a outra como seção de esgotamento. As colunas

estão localizadas concentricamente de forma que a troca de calor acontece da seção de retificação à seção esgotamento, permitindo diminuir o consumo de energia demandado pelo refeedor e aumentando a eficiência energética da coluna.

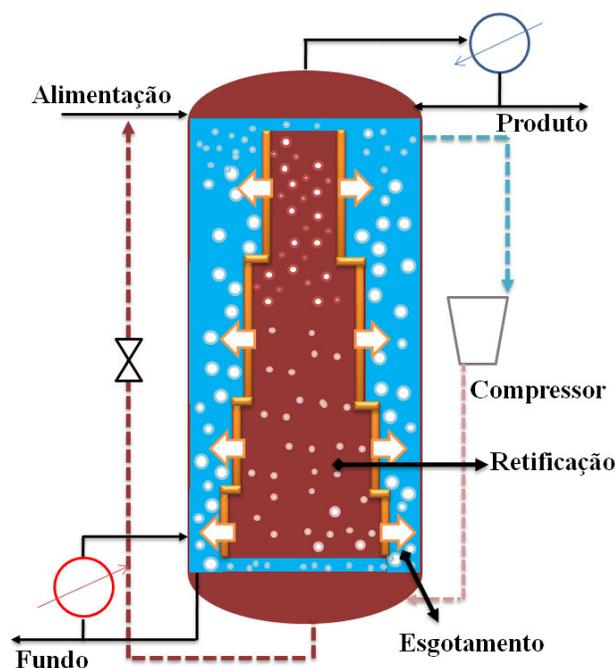


Figura 18. Projeto da coluna CDIIC

Desta forma, pode ser visto que o aproveitamento de energia presente no processo pode ser disposta por meio de arranjos internos, os quais foram amplamente estudados e apresentados os mais representativos para o presente trabalho [58-60].

Para garantir as condições de operação, um compressor e uma válvula são usadas entre as duas seções, desta forma as pressões são manipuladas por meio destes equipamentos. O vapor comprimido é alimentado à seção de retificação enquanto o fundo da mesma seção é levado como alimentação à seção de esgotamento. O produto de topo da seção de retificação e o fundo da seção de esgotamento são o componente refinado e o componente mais pesado, respectivamente.

A corrente de alimentação é introduzida no topo da seção de esgotamento, obtendo-se vapor como produto de topo da seção. O vapor é comprimido e alimentado à seção de

retificação enquanto o fundo líquido da mesma seção é reciclado por meio de uma válvula à seção de esgotamento. O produto destilado é obtido no topo da seção de retificação, enquanto o produto de fundo se obtém no último prato da seção de esgotamento.

Para melhorar a troca de calor, alguns grupos de pesquisa propõem a instalação de painéis, os quais permitem trocar calor nas áreas mais distantes da parede da seção. Para melhorar a troca de calor, o grupo de pesquisa da TU Delft na Holanda fez estudos de configurações com painéis.

Projeto de Coluna CDIIC

No projeto de coluna CDIIC, é necessário o conhecimento das variáveis fundamentais tais como o número teórico de estágios em equilíbrio, a quantidade mínima de energia trocada entre as seções, especificações da coluna (diâmetro, comprimento, tipo de prato), condições de operação do refeedor, o trabalho do compressor, etc. Não existe um protótipo ideal de coluna, por isto o único caminho para validar um novo processo é a construção de uma unidade numa escala considerável para a validação por meio da experimentação.

O projeto da unidade de coluna CDIIC inclui uma relação de compressão (aumento da pressão no fluxo de vapor alimentado à seção de retificação) entre a seção de retificação e esgotamento.

De fato, a energia requerida pelo compressor é uma limitante do processo devido ao fato que a energia total do processo deve ser menor à energia usada no processo convencional, levando em consideração a energia do compressor.

Os estudos de pesquisa desenvolvidos no Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação - LDPS da UNICAMP permitiram encontrar que esta configuração pode ser simulada de forma aproximada nos simuladores convencionais e apresenta grande potencial na diminuição do consumo de energia em processos de destilação.

Todavia, mais estudos em relação à configuração interna da coluna são necessários para avançar no desenvolvimento desta coluna e sua aplicabilidade na indústria Brasileira.

Efeitos da Configuração

Um problema potencial que possui a configuração de coluna CDIIC é a distribuição simétrica de pratos, pois no momento não existem trabalhos que apresentem de forma detalhada a disposição dos estágios (estágios simétricos, estágio da seção de retificação que troca energia com dois estágios da seção de esgotamento, estágios da seção de retificação que trocam energia com um estágio da seção de esgotamento).

Os estudos publicados especificam diferentes possibilidades de integração interna na coluna, mas ainda os estudos do *design* interno se encontram em avaliação; uma das questões com respeito à configuração é a quantidade de estágios na seção de esgotamento e retificação da coluna CDIIC, conseqüentemente o projeto está em função da mistura a separar e suas condições de operação.

O efeito da compressão do vapor feito pelo compressor é fundamental para o desenvolvimento do processo, dado a que a energia requerida pelo refulvador deve ser relativamente menor à requerida pelo processo convencional. Além disso, nas seções acontecem efeitos hidráulicos como a queda de pressão, isto gera diferenças de temperatura baixas para a troca de energia entre as seções.

Pelo contrário, baixas quedas de pressão na seção interna fazem com que a transferência de calor aconteça da seção externa para a interna o que não representa a configuração de coluna CDIIC.

O desenvolvimento de novos arranjos internos requer uma distribuição simétrica dos estágios (pratos) em relação à seção interna (retificação) com respeito à seção externa (esgotamento). Estas condições de disposição dos estágios (pratos) muda parâmetros como a posição ótima de alimentação, a qual é em função das condições térmicas e de composição da alimentação e das especificações do produto.

É importante ressaltar que a coluna CDIIC não apresenta diferença na forma de alimentar e a posição ótima é desenvolvida da mesma forma que o projeto convencional. Uma das questões mais significativas é como vai se desenvolver o arranjo interno da coluna e a necessidade de incluir um maior número de estágios na seção de retificação em relação à de esgotamento. Propostas em relação às possibilidades de arranjo interno da coluna foram descritas por Aris DE RIJKE [41], como se apresenta na Figura 19.

A configuração *CDIIC - alimentação ótima*, parte do mesmo princípio de troca de energia entre a seção de retificação e a seção de esgotamento levando a alimentação do sistema no estágio ótimo da seção de retificação. Nesta configuração a corrente de saída do fundo da seção de retificação entra nos primeiros pratos da seção de esgotamento.

A configuração da *CDIIC – Total* se diferencia da *CDIIC - alimento ótimo* pela forma como é alimentada à coluna; na configuração total, a corrente de alimentação e a corrente de fundo da seção de retificação são introduzidas no primeiro prato da seção de esgotamento.

A configuração de coluna *CDIIC – de Topo* apresenta uma diminuição do número de estágios da seção de esgotamento, o qual limita a troca de calor da seção de retificação só nos estágios superiores onde o calor latente, não têm a maior temperatura da seção. No entanto, a configuração da *CDIIC – de Fundo* limita a troca de calor da seção de retificação nos estágios inferiores onde a seção de retificação é mais quente, contudo, novos estudos para avaliação destes arranjos ainda estão em andamento.

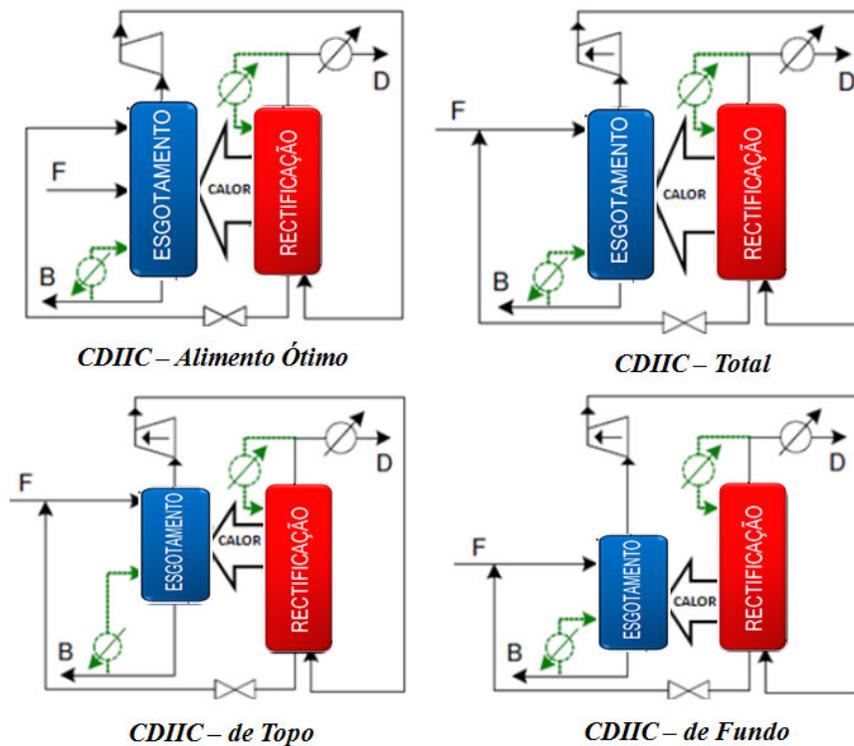


Figura 19. Possíveis Arranjos Internos de Coluna CDIIC (Reijke, 2007)

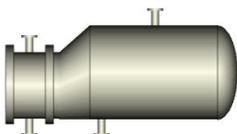
Assim, distintos tipos de configurações de coluna são possíveis; estes dependem do tipo de mistura a separar, portanto o arranjo interno da coluna até hoje não têm uma forma estabelecida. O conceito das seções concêntricas se mantém, contudo, outros possíveis arranjos entre as duas seções podem ser desenvolvidos, como por exemplo: seções concêntricas com a mesma área de troca de calor entre as seções, pratos internos da coluna de retificação simétricos com a seção de esgotamento, pratos internos não simétricos com a seção de esgotamento, pratos com diferente área de troca ao longo da coluna, dentre outros.

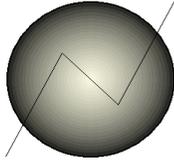
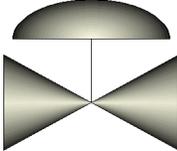
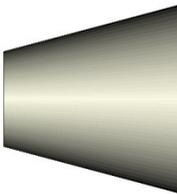
4.4 Equipamentos Associados à Coluna - CDIIC

Na unidade de destilação CDIIC, condições de operação são necessárias para o desenvolvimento do processo; para isto, se encontram associados equipamentos que permitem o funcionamento e garantem as condições de operação da configuração. Estes, em princípio, também são usados para o projeto de coluna convencional e em adição a coluna CDIIC inclui uma válvula e um compressor para garantir as condições de operação.

A seguir, na Tabela 2, se especificam os equipamentos usados na configuração de coluna CDIIC, fazendo uma descrição do equipamento e sua aplicação na coluna; a seguir se encontram comentários em relação ao projeto.

Tabela 2. Equipamentos Associados à Coluna CDIIC

<i>EQUIPAMENTO</i>	<i>DESCRIÇÃO</i>	<i>Outros</i>
<p>Coluna</p> 	<p>Unidade destiladora composta por duas seções dispostas de forma concêntrica.</p>	<p>O projeto de coluna está em função da mistura de estudo e as condições de operação estabelecidas.</p>
<p>Refervedor</p> 	<p>Unidade que gera a vaporização da mistura na seção de esgotamento.</p>	<p>Na atualidade, são muito usados duas classes de refervedores; para efeito da coluna CDIIC é usado o modelo tubo e carcaça.</p>

Condensador		Unidade de troca de calor usada para a condensação do produto de topo da seção de retificação.	O trocador de calor usado para o processo é geralmente com condensador total, condensando o produto de topo da seção de retificação.
Válvula		Diminui a pressão de descarga do líquido que vem da seção de retificação.	Permite garantir as condições de operação da coluna em relação à diferença de pressões.
Compressor		Permiti a compressão do vapor de topo da seção de esgotamento, para sua posterior alimentação no fundo da seção de retificação.	Trabalha de forma isentrópica o qual permite a operabilidade do processo.

A configuração da coluna CDIIC inclui os conceitos da recompressão direta de vapor onde o produto de topo da seção de esgotamento é usado para aquecer o refeedor e o projeto de coluna diabática onde se inclui a troca direta sem perdas com o meio das unidades de troca de calor com a coluna. Os resultados destas configurações compõem a coluna CDIIC e seus equipamentos os quais foram descritos anteriormente.

4.5 Operação da Coluna CDIIC

Sabe-se que o início das operações em escala industrial é fundamental para a obtenção de produtos nos limites estabelecidos. Uma descrição da unidade construída no Japão permite estabelecer o procedimento de operação de uma coluna.

O procedimento será exposto para o conceito de coluna CDIIC com refeedor e condensador:

- Verificação que a configuração CDIIC se encontre vazia e limpa.
- Introdução da alimentação na seção de esgotamento. Geralmente, para a configuração de coluna CDIIC, a alimentação é introduzida no primeiro prato.
- A mistura alimentada vai ao fundo da coluna, deve ser considerado o tempo de carga ou *holdup* e logo esta é aquecida pelo refeedor, levando os componentes mais voláteis até o topo da coluna.
- O vapor da seção de esgotamento é comprimido pelo compressor especificado para uma relação de compressão entre as duas seções.
- Seguidamente, a coluna de retificação é carregada na pressão e temperatura pré-estabelecidas no compressor; esta pressão é mantida pelo calor do condensador e as condições de controle. O processo inicialmente é focado para um refluxo total.
- O produto de fundo da seção de retificação é alimentado a uma válvula de estrangulamento que diminui a pressão da seção de retificação e posteriormente alimentado no topo da seção de esgotamento.
- Um interruptor no fundo da coluna diminui gradualmente a quantidade de energia requerida pelo refeedor à medida que a operação acontece.
- Continua a operação a um fluxo de alimentação estabelecido.

Os estudos apresentados por grupos de pesquisa japoneses relatam as dificuldades no início da operação, esta pode tardar até mais de 10 horas para estabilizar o processo e a troca de calor entre as seções.

4.6 Eficiência da coluna CDIIC

Devido ao fato de que não se tem grande quantidade de informação numa escala suficientemente grande, no presente estudo, foram realizados cálculos da eficiência de pratos na coluna fazendo uso do conceito da eficiência e Murphree e de eficiência global, estes são usados devido a que permite obter informação em função das composições no processo de destilação.

Desta forma, diferentes conceitos de eficiência de prato em colunas de destilação foram levados em consideração para o estudo da eficiência, estes são apresentados seguidamente.

4.6.1 Estágios de Equilíbrio em Colunas de Destilação

O modelo de estágios de equilíbrio é bem conhecido. Este foi estudado por King [61], Henley e Seader [62], Holland [63] e supõe que a corrente líquida e vapor que deixam um estágio em particular estão em equilíbrio termodinâmico. Neste modelo, são resolvidas equações conhecidas como MESH (*Mass, Equilibrium, Summation, Heat*) que consistem em balanço de massa por componente, equações para equilíbrio de fases, equações de somatório (restrições) e balanço de energia.

O esquema de uma etapa de equilíbrio se apresenta na Figura 20, considerando que as correntes de vapor e líquido que deixam o estágio se encontram em equilíbrio, o vapor proveniente do estágio $j+1$ entra em contato com o líquido proveniente do estágio $j-1$ no estágio j , além de outras correntes como alimentação e reciclo.

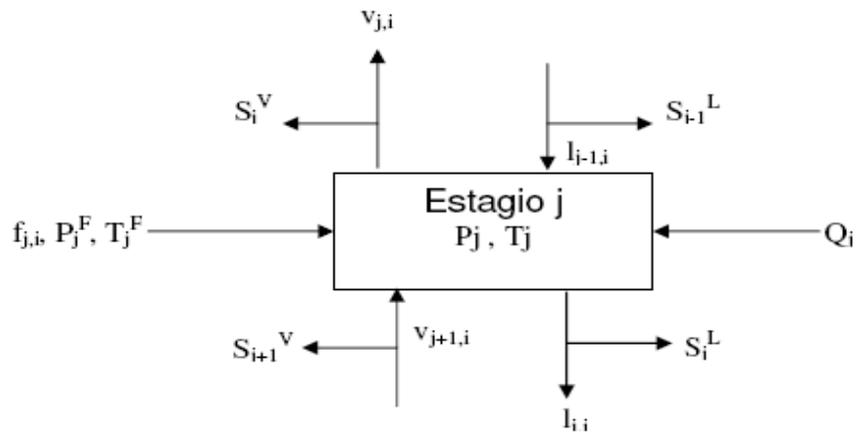


Figura 20. Esquema de um Estágio de Equilíbrio

Na realidade, em uma operação real, os estágios raramente ou mesmo nunca operam em equilíbrio apesar das tentativas para se atingir essa condição através de um projeto apropriado e escolha das condições adequadas de operação. O meio usual de se considerar

o desvio do equilíbrio é a incorporação do conceito de eficiência nas relações de equilíbrio segundo Krishnamurthy e Taylor [64].

4.6.2 Eficiência em Colunas de Destilação

Na atualidade, na literatura aberta, encontram-se diferentes conceitos de eficiência, como os apresentados por Pescarini [65], Barros [3] e Soares [66]. No presente estudo são expostos modelos em relação ao projeto de coluna CDIIC e seguidamente serão aprofundados os tidos em conta para o desenvolvimento do trabalho.

Eficiência global de coluna: foi definido por Lewis [67], o conceito de eficiência dispõe uma relação entre o número de estágios teóricos e o número de estágios reais necessários para uma dada separação. Devido à generalização do conceito de eficiência em todo o estágio sua aplicação é pouco realista, além disso, a abordagem matemática para todos os estágios torna o processo pouco prático.

Eficiência de Murphree [68]: foi definida por Murphree no ano 1925, foi desenvolvida para um estágio só; o modelo apresenta uma relação do comportamento de um estágio ideal com um estágio real levando em consideração a contato entre a fase líquida e vapor. Na realidade, a eficiência para a fase líquida e vapor em geral conduzem a valores numéricos, em operação estes são diferentes para cada fase no mesmo estágio.

Eficiência no Ponto: foi desenvolvida por West et al.[69] como uma modificação à eficiência geral de Murphree; esta usa a concentração de um componente na fase vapor e o líquido circulante no mesmo ponto.

A eficiência de Murphree esta descrita pela Equação 22.

$$\eta_{i,j} = \frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \quad (22)$$

Onde η é a eficiência de Murphree, i é o número de estágio, j é o componente na mistura, y é a fração molar na fase vapor e y asterisco (*) denota a fração molar na fase vapor em equilíbrio.

As separações multicomponentes apresentam complicações para o cálculo da eficiência de Murphree, devido à quantidade de componentes que aumentam a complexidade matemática. A eficiência está nos limites comuns de 0 e 1; estes limites foram estabelecidos por estudos desenvolvidos para sistemas binários como o descrito por Taylor and Krishna [70]. Deste modo, estudos apresentados por Lee e Dudukovic [71] indicam que a predição convencional da eficiência de Murphree pode não ser confiável para misturas multicomponentes.

Diferentes modificações à eficiência de Murphree como Colburn [72], de Holland [73], entre outras, foram apresentadas; nestas é incluído o conceito original de relação entre frações molares.

Barros no ano 1997 observou que a eficiência de vaporização não alcança o valor zero, sempre tende a um valor finito e positivo mesmo em situações onde não ocorre separação [3].

A estimativa dos valores e a definição do conceito de eficiência apresentam dificuldades na aplicação desta na análise de colunas reais. Propostas como a de eficiência global ao longo da coluna podem gerar resultados pouco confiáveis, precisando de uma abordagem mais detalhada do sistema.

4.6.3 Conceito de Correlações de Eficiência

As correlações de eficiência empíricas e semi-empíricas na atualidade são muito restritas a sistemas em particular. Estas, em geral, dependem das características de transferência de massa e calor do processo. Em seguida, são apresentadas as principais correlações publicadas na literatura aberta.

Os primeiros cálculos de eficiência foram apresentados por Drickamer e Bradford [74] em referência à correlação descrita por eles, posteriormente O'Connell [75] estendeu o trabalho a uma faixa de operação de colunas fracionadoras.

Rousseau [76] desenvolveu o método de predição inicialmente para campânulas, onde envolvia a estimativa de número de unidades de transferência nas fases líquida e vapor. Mas, foi o estudo publicado pela AIChE [42] que lançou as bases para um entendimento mais profundo do cálculo da eficiência.

Uma nova correlação, mais realista, foi desenvolvida por Barros e Wolf [77]; esta foi obtida através do ajuste de parâmetros de mistura que variam com a eficiência. Barros e Wolf-Maciel descreveram equações para a destilação convencional e a extrativa. A equação descrita para o cálculo de eficiência (Eff) para um prato i na destilação convencional é:

$$\text{Eff}(i) = 38,5309 \left[\frac{k(i)\rho(i)D(i)MW(i)}{Cp(i)\mu^2(i)} \right]^{-0.04516} \quad (23)$$

Nesta correlação, são utilizadas as seguintes propriedades da mistura na fase líquida: condutividade térmica (k), massa específica (ρ), difusividade (D), massa molecular (MW), capacidade calorífica (Cp) e viscosidade (μ).

Pode-se substituir os parâmetros da mistura pelos dos componentes puros na fase líquida, nesta forma pode ser obtido o cálculo da eficiência de componente no prato - Eff (i,j).

O estudo apresentado por Pescarini et al. [65] expõe, que devido à particularidade da eficiência de estágio, as propriedades físicas, características geométricas e condições de operação, conclusões em relação à eficiência somente podem ser extrapoladas se todas as condições forem iguais às do caso estudado.

Além disso, as imprecisões e as incertezas presentes no conceito de eficiência na modelagem de estágios de equilíbrio remetem à necessidade de modelagens mais realistas, utilizando métodos matemáticos mais rigorosos que levem em conta a transferência simultânea de massa e energia.

4.6.4 Eficiência de ponto

Faz referência à relação de equilíbrio entre a concentração do vapor de saída do prato e a composição de líquido neste ponto, portanto o ponto pode variar ao longo do prato. A eficiência de ponto (OG) para um prato ou estágio n foi definida por Reijke como:

$$E_{OG} = \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{y_n^* - y_{n-1}} \right)_{point} \quad (24)$$

Onde y_n^* é a fração molar do componente vapor em equilíbrio com a concentração de líquido x e y_n é a fração molar do componente vapor que sai do estágio n . Este conceito é baseado em dados específicos num ponto do prato.

4.6.5 Eficiência Total de Prato

A equação de Murphree (E_{mv}) é descrita na medida em que o vapor e o líquido deixam o prato, por isto devido à sua definição, sua eficiência pode ser maior a 100%. A diferença entre a eficiência de ponto e a eficiência de Murphree depende do comportamento da mistura. Para o caso do líquido em mistura completa, a eficiência se descreve como:

$$E_{mv} = E_{OG} \quad (25)$$

Para o caso, que o líquido no estágio não cumpra as condições este cálculo deve ser realizado por meio do cálculo da eficiência de ponto de Lewis [67].

$$E_{mv} = \frac{(\exp(\lambda E_{OG}) - 1)}{\lambda} = \frac{\text{número de pratos ideais}}{\text{número de pratos reais}} \quad (26)$$

Onde λ é uma relação entre as curvas de equilíbrio e a linha de operação [cte]. As equações de eficiência global de prato representam a mistura completa nas fases líquida e vapor, respectivamente.

Dos estudos de simulação desenvolvidos no Capítulo 5 foram avaliados o comportamento da coluna convencional e a coluna CDIIC em relação aos fluxos de vapor e líquido, condições de pressão e temperatura que permitam comparar o potencial da coluna CDIIC em relação com a coluna convencional. Com a finalidade de avaliar eficiência do prato na configuração de coluna CDIIC, foi estabelecido o cálculo das eficiências de

Murphree e eficiência global no Capítulo 5. É importante ressaltar que por se tratar de uma nova configuração é necessário o desenvolvimento de correlações que permitam um melhor ajuste ao comportamento da coluna y suas condições de operação, no presente estudo se realizam cálculos e relação às curvas de equilíbrio das misturas publicados na literatura aberta.

4.7 Avaliação Termodinâmica

A avaliação termodinâmica é desenvolvida partindo da primeira e segunda lei, estabelecendo a condição termodinâmica em relação aos estudos apresentados por Nakaiwa et al, (2003). A formulação das equações foi constituída em relação aos estudos publicados na literatura aberta e foram levadas considerações em relação aos estudos de simulação desenvolvidos.

4.7.1 Descrição Termodinâmica da Coluna Convencional

Para a análise termodinâmica foi estudada a proposta apresentada por Nakaiwa et al. (2003), sendo especificada a modelagem para o projeto convencional e de coluna CDIIC.

Partido da primeira e segunda lei da termodinâmica descrita por Kojima (1996) foram apresentadas as seguintes equações em relação ao projeto de coluna convencional, a energia requerida em forma de calor é levada em consideração para o refeedor e o condensador:

$$Q_R - Q_C + FH_F - DH_D - BH_B = 0 \quad (27)$$

$$\Delta S = \frac{Q_C}{T_C} - \frac{Q_R}{T_R} - FS_F + DS_D + BS_B \geq 0 \quad (28)$$

Onde o calor trocado no refeedor e no condensador são Q_R e Q_C , respectivamente.

A energia dissipada W_{Loss} é a energia perdida devido à irreversibilidade do processo na transferência de calor e massa, ΔS é a diferença de entropia do sistema em kJ/K e T_0 a temperatura inicial. Esta energia é descrita pela equação:

$$W_{Loss} = T_0 \Delta S \quad (29)$$

$$W_{Loss} = Q_R \left(1 - \frac{T_0}{T_R}\right) - Q_C \left(1 - \frac{T_0}{T_C}\right) + F(H_F - T_0 S_F) - D(H_D - T_0 S_D) - B(H_B - T_0 S_B) \quad (30)$$

$$W_{Loss} = Q_R \left(1 - \frac{T_0}{T_R}\right) - Q_C \left(1 - \frac{T_0}{T_C}\right) - W_{min} \quad (31)$$

O W_{min} é a mínima quantidade de energia requerida para realizar a separação a umas condições de operação estabelecidas. Desta forma W_{min} está descrito como:

$$W_{min} = (DH_D + BH_B - FH_F) - T_0(DS_D + BS_B - FS_F) \quad (32)$$

$$W_{min} = \Delta H - T_0 \Delta S \quad (33)$$

Para melhorar a eficiência energética é necessário diminuir a energia dissipada W_{Loss} . Para isto, uma área efetiva de troca pode ser controlada por meio de projetos de transferência de calor e arranjos na estrutura interna da coluna. As outras perdas de energia são causadas pela baixa transferência de massa e por a energia usada no contato entre as fases líquida e vapor.

A eficiência termodinâmica para a energia numa coluna convencional pode ser definida como:

$$\eta_{CC} = \frac{W_{min}}{(W_{Loss} + W_{min})} \quad (34)$$

$$\eta_{CC} = \frac{W_{min}}{[Q_R (1 - T_0/T_R) - Q_C (1 - T_0/T_C)]} \quad (35)$$

$$\leq \frac{W_{min}}{(Q_R - Q_C)} \quad (36)$$

Sendo η_{cc} a eficiência da coluna convencional. Desta forma, é possível avaliar o comportamento termodinâmico em função do calor trocado no refeedor e no condensador em relação à energia perdida.

No presente estudo, todos os casos simulados não apresentam perdas de energia com o meio, é dizer a quantidade de energia trocada no sistema da coluna CDIIC é transferida em sua totalidade e para as duas configurações estas trabalham sem perdas de energia com o meio.

Desta forma como foi escrito na Equação 29 o W_{Loss} deve ser levado em consideração para a modelagem, no caso particular do presente trabalho as unidades foram simuladas adiabáticas, porém não possuem perda de energia com o meio. A energia dissipada nas simulações é nula o qual faz que da equação 31 seja obtido que a quantidade mínima de energia W_{min} requerida para realizar o processo seja a energia requerida pelo refeedor e pelo condensador, este depende das condições de operação do processo e as especificações dos produtos.

Desta forma, as simulações desenvolvidas são estabelecidas para o cálculo da quantidade de energia necessária na operação em relação às condições estabelecidas; a quantidade de calor no refeedor e no condensador é obtida por meio do simulador comercial Aspen Plus V 7.2, este contém a descrição dos balanços de massa e energia para o modelo *radfrac* o qual modela de forma mais rigorosa a coluna.

A coluna convencional no simulador inclui no estágio 1, a quantidade de energia requerida pelo condensador e no estágio n a quantidade de energia requerida pelo refeedor, em razão às condições estabelecidas.

A análise termodinâmica será realizada da mesma forma para a coluna CDIIC a partir dos estudos de simulação realizados no Capítulo 5. Nestes é especificada a quantidade de calor trocada de uma seção para a outra.

4.7.2 Descrição Termodinâmica da Coluna CDIIC

A análise termodinâmica da coluna CDIIC pode ser abordada por meio da eficiência energética como foi apresentada anteriormente para a coluna convencional. Desta forma, a partir dos conceitos fundamentais da coluna convencional e coluna CDIIC, se encontra que os projetos de coluna apresentam similaridade no comportamento dos fenômenos de transferência de massa e calor. A eficiência termodinâmica para a coluna CDIIC é similar ao projeto de coluna convencional, esta foi descrita por Nakaiwa et al., (2003) para a coluna convencional e a coluna CDIIC.

Desta forma a eficiência pode ser descrita para a coluna CDIIC como:

$$\eta_{\text{CDIIC}} = \frac{W_{\text{min}}}{(W_{\text{L,oss}} + W_{\text{min}})} \quad (37)$$

$$\eta_{\text{CDIIC}} = \frac{W_{\text{min}}}{[W + Q_F(1 - T_0/T_F) - Q_1(1 - T_0/T_1)]} \quad (38)$$

Onde Q_F e Q_1 são o calor da alimentação pré-aquecida e o calor latente do fluxo de produto no estágio 1 e W_{min} é a energia mínima requerida para realizar o processo. Para facilitar o entendimento, serão apresentadas as seguintes desigualdades que descrevem em termos de calor a energia presente na operação:

$$Q_1 \geq Q_F \text{ e } T_1 \geq T_F \quad (39)$$

Desta forma, partindo do conceito de coluna CDIIC, a quantidade de energia presente no sistema é maior na seção de retificação em comparação com a seção de esgotamento, isto foi verificado nos estudos de simulação desenvolvidos no Capítulo 5. A superioridade de eficiência energética foi apresentada por Nakaiwa et al.(2003), eles especificaram a necessidade de estudo econômicos e o desenvolvimento de tecnologia para avaliar o potencial na indústria.

Sabe-se que a eficiência depende das especificações do projeto da coluna, no presente estudo foram usados os resultados obtidos nos trabalhos de simulação para as diferentes

misturas de estudo (misturas binárias: hidrocarbonetos e compostos químicos) em diferentes configurações de coluna CDIIC. Na operação da coluna, em todos os casos simulados os valores de Q_1 corresponderam à maior temperatura da unidade, isto devido a que no primeiro estágio é localizado o calor latente presente no fundo da seção de retificação (seção que opera a maior pressão e temperatura), este, também é transportado na corrente de refluxo e entra no estágio 1 da seção de esgotamento, sendo assim que o calor presente neste estágio representa a maior quantidade de energia contéuda no sistema.

As condições de alimentação usadas nas simulações foram estabelecidas para misturas pré-aquecida em todos os casos, assim a temperatura é estabelecida próxima ao ponto de ebulição do componente mais volátil. A energia contéuda na corrente de alimentação possui uma quantidade menor energia em relação à presente no sistema. Desta forma, foi corroborado o descrito na equação 39.

Para a descrição do trabalho mecânico é determinada a quantidade de energia requerida pela seção retificação e pela seção de esgotamento como se apresenta na equação 40, para a coluna CDIIC deve ser levada em consideração a energia requerida pelo refeedor.

Geralmente em processos de destilação são usadas as seguintes relações:

$$W = Q_S - Q_R \approx Q_R - Q_C - Q_F \quad (40)$$

Da equação 40 é possível observar que a energia requerida no processo de destilação pode ser descrita como a energia requerida pelo refeedor para levar o líquido à fase vapor, a energia requerida pelo condensador e a energia requerida pelo compressor para o aumento da temperatura e alimentação da seção de retificação. Estudos do consumo energético foram desenvolvidos para determinar o potencial de diminuição energética da coluna CDIIC em comparação com a coluna convencional.

Desta forma, é descrita a desigualdade para as eficiências entre a coluna convencional e a coluna CDIIC:

$$\eta_{CDIIC} \approx \frac{W_{min}}{(W)} > \frac{W_{min}}{(Q_R - Q_C)} \approx \eta_{CC} \quad (41)$$

Os estudos apresentados por Nakaiwa et al. [35] em relação à eficiência termodinâmica apresentam a coluna CDIIC com maior eficiência energética que a coluna convencional. No presente trabalho foi realizada uma análise da descrição termodinâmica em relação às simulações desenvolvidas para a coluna CDIIC e a coluna convencional.

Os estudos de simulação realizados foram desenvolvidos para sistemas sem perdas de energia com o meio ambiente, desta forma o termo W_{Loss} para as simulações é zero, encontrando que a eficiência termodinâmica nos dois casos é função da quantidade mínima de energia necessária para realizar o processo. Assim, a eficiência termodinâmica é 1 para os sistemas simulados. No caso real, o sistema tem perdas com o meio e as condições de operação como condições de alimentação e temperaturas do sistema podem diminuir a eficiência. A hidráulica do prato e condições de operação são fatores que influenciam a eficiência.

4.8 Comentários e Conclusões

O conceito e coluna CDIIC é um conceito muito novo que está sendo desenvolvido por diferentes grupos de pesquisa no mundo. Inicialmente, o conceito de Coluna CDIIC-ideal representa uma solução definitiva para a eliminação dos sistemas de aquecimento e resfriamento em colunas de destilação, embora o sistema precise de estas unidades para iniciar o processo. O conceito de coluna CDIIC apresenta a possibilidade de diminuição do consumo de energia. Para isto, a unidade precisa da inclusão de um compressor e de uma válvula para a operação do sistema.

O projeto de coluna CDIIC não se encontra estabelecido na atualidade, pois cada grupo de pesquisa está desenvolvendo formas distintas no arranjo interno da coluna, o conceito de coluna pode ser aplicado a diferentes configurações de coluna. O estudo da eficiência no prato representa limitações no fato de não se ter dados numa escala suficientemente grande para a avaliação dos estudos desenvolvidos. Foi observado o possível uso de diferentes tipos de correlações em relação à eficiência da coluna, mas estas só podem ser avaliadas pelo meio de dados experimentais. A avaliação termodinâmica apresentada por Nakaiwa et al. (2003), permite estabelecer o estudo da eficiência da coluna partindo do princípio da primeira e segunda leis da termodinâmica.

No caso do presente estudo, os cálculos foram desenvolvidos para o estado estacionário e foi concluído em relação aos estudos de simulação apresentados no Capítulo 5. A partir da equação 37, as simulações foram desenvolvidas sem perdas de energia, por tanto a quantidade de calor mínima requerida pelo sistema para todos os casos estudados foi menor para a coluna CDIIC em comparação com a coluna convencional. Nas simulações desenvolvidas, a equação 37 torna-se 1, isto é obtido devido à caracterização das simulações como ideais. No caso real, as perdas de energia devem ser consideradas. Estes estudos deverão ser baseados nos resultados obtidos por uma unidade experimental. Nos casos de estudo desenvolvidos para o presente projeto, o processo de coluna CDIIC foi estabelecido ideal com o objeto de focalizar os estudos ao fenômeno de troca de energia, tornando o sistema termodinamicamente eficiente.

***Capítulo 5– Estudos de
Simulação da Coluna CDIIC***

5.1 Resumo

Atualmente, existem diferentes estudos de simulação com respeito ao controle, configuração e estratégias de convergência da coluna CDIIC. As dificuldades são referentes à pouca informação com relação a dados experimentais, o que dificulta a proposta e construção de projetos da coluna. O presente estudo apresenta uma comparação da coluna CDIIC com a coluna Convencional para as misturas benzeno-tolueno, metanol-água e uma mistura etanol-água. Esta permite o estudo da configuração da coluna CDIIC para efeitos de análise do arranjo no simulador e sua posterior caracterização na simulação da mistura etanol-água a qual é de grande interesse para a indústria Brasileira. Os estudos foram desenvolvidos usando a ferramenta de simulação Aspen Plus V7.2. É importante ressaltar que as simulações desenvolvidas descrevem uma forma rápida e aproximada de simular colunas CDIIC em simulador de processos comerciais sem a necessidade da modificação das equações fundamentais destes.

5.2 Procedimento para a Simulação de Colunas CDIIC no Software Aspen Plus V7.2

Para o desenvolvimento das simulações, um procedimento descritivo dos passos foi realizado; neste se estabelece uma descrição aproximada da configuração de coluna CDIIC no simulador comercial Aspen Plus V 7.2 .

Parâmetros iniciais como vazão de fluxo de alimentação, número de estágios, condições de operação do compressor e condições de alimentação (composição equimolar) foram obtidos da literatura (Naito et al. [27], Huang et al. [83], Gadalla et al. [48], Suphanit [84] e Gadalla [85]) para a validação da simulação, isto, devido a que não se conta com dados experimentais para a avaliação.

Para a separação foi usado o modelo *radfrac* do *model library* do simulador. Esta operação permite o estudo rigoroso para uma separação multiestágios. Uma representação do digrama usado pelo simulador é apresentado na Figura 21.

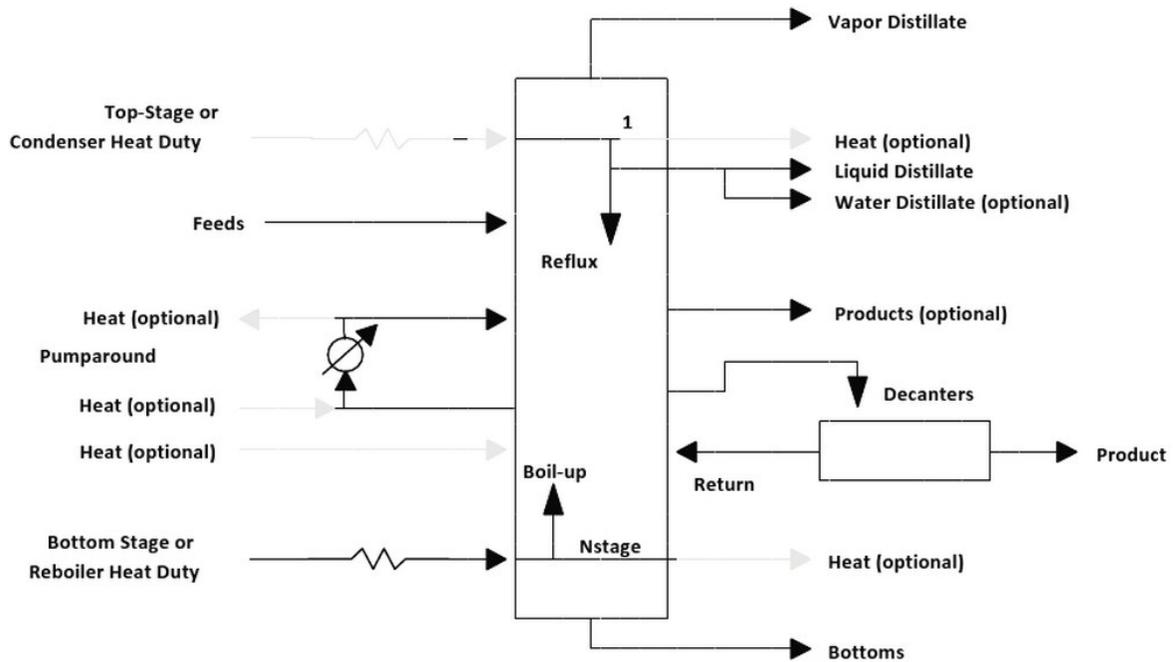


Figura 21. A) Esquema de Conexão do Modelo Radfrac em Aspen plus (Aspen Plus library, V7.2)

Sabe-se que a coluna CDIIC é um conceito de coluna novo, porém, esta configuração não se encontra disposta nos modelos contidos no simulador. Desta forma, o uso deste modelo *radfrac* permite simular de forma aproximada e detalhada uma coluna CDIIC, fazendo uso deste modelo, um como seção de retificação e outro como seção de esgotamento, interconectados de forma que a modelagem no simulador seja a mais similar à configuração de coluna CDIIC real.

O procedimento para a simulação de uma coluna CDIIC no simulador precisa dos seguintes passos:

Passo 1. Estabelecer os componentes a serem estudados e seguidamente, desenvolver estudos das propriedades dos componentes puros e das misturas binárias ou multicomponentes. (Estudo do equilíbrio líquido-vapor das misturas)

Passo 2. Determinar as condições da alimentação, descrevendo a vazão de alimentação, condições de pressão e temperatura da corrente e a composição da alimentação. A operação

da coluna depende das condições iniciais; se deve levar em consideração que a alimentação da coluna é feita no primeiro estágio da seção de esgotamento; neste primeiro estágio, também é alimentado o refluxo que vem da coluna de retificação. Consequentemente, as correntes devem entrar a igual pressão e temperatura na seção, evitando quedas de pressão na seção.

Passo 3. Fazer a escolha do método termodinâmico a ser usado para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor da mistura. O modelo termodinâmico escolhido para o desenvolvimento da simulação deve incluir propriedades que caracterizem a mistura (como mistura de hidrocarbonetos, mistura de eletrólitos, entre outros), além de representar da forma mais semelhante os dados experimentais da mistura estudada.

Passo 4. Inserir no *flow sheet* (área de trabalho) duas colunas *Radfrac*, uma opera como seção de retificação e a outra como seção de esgotamento; também, adicionar um compressor e uma válvula para a modelagem do conceito de coluna CDIIC.

Passo 5. Interconexão de correntes; inicialmente a corrente de alimentação é inserida no topo da primeira coluna (isto faz com que a unidade opere como seção de esgotamento) junto com a corrente de refluxo a qual vem da válvula. A corrente do topo da seção de esgotamento é conectada ao compressor e esta posteriormente é alimentada ao fundo da seção de retificação. As correntes de fundo da seção de esgotamento e a corrente de topo da seção de retificação são os produtos do processo.

Passo 6. Estabelecer os parâmetros dos blocos (operações) inseridos no *flowsheet*. Nas seções de retificação e esgotamento, o projeto interno da coluna (uma trabalha sem refeedor e a outra sem condensador respectivamente), número de pratos das seções, a relação de compressão do compressor e finalmente a relação de diminuição de pressão da válvula.

Passo 7. Incluir a interconexão térmica entre as duas seções; estas são descritas como correntes de energia; a interconexão destas correntes é feita estágio a estágio; desta forma,

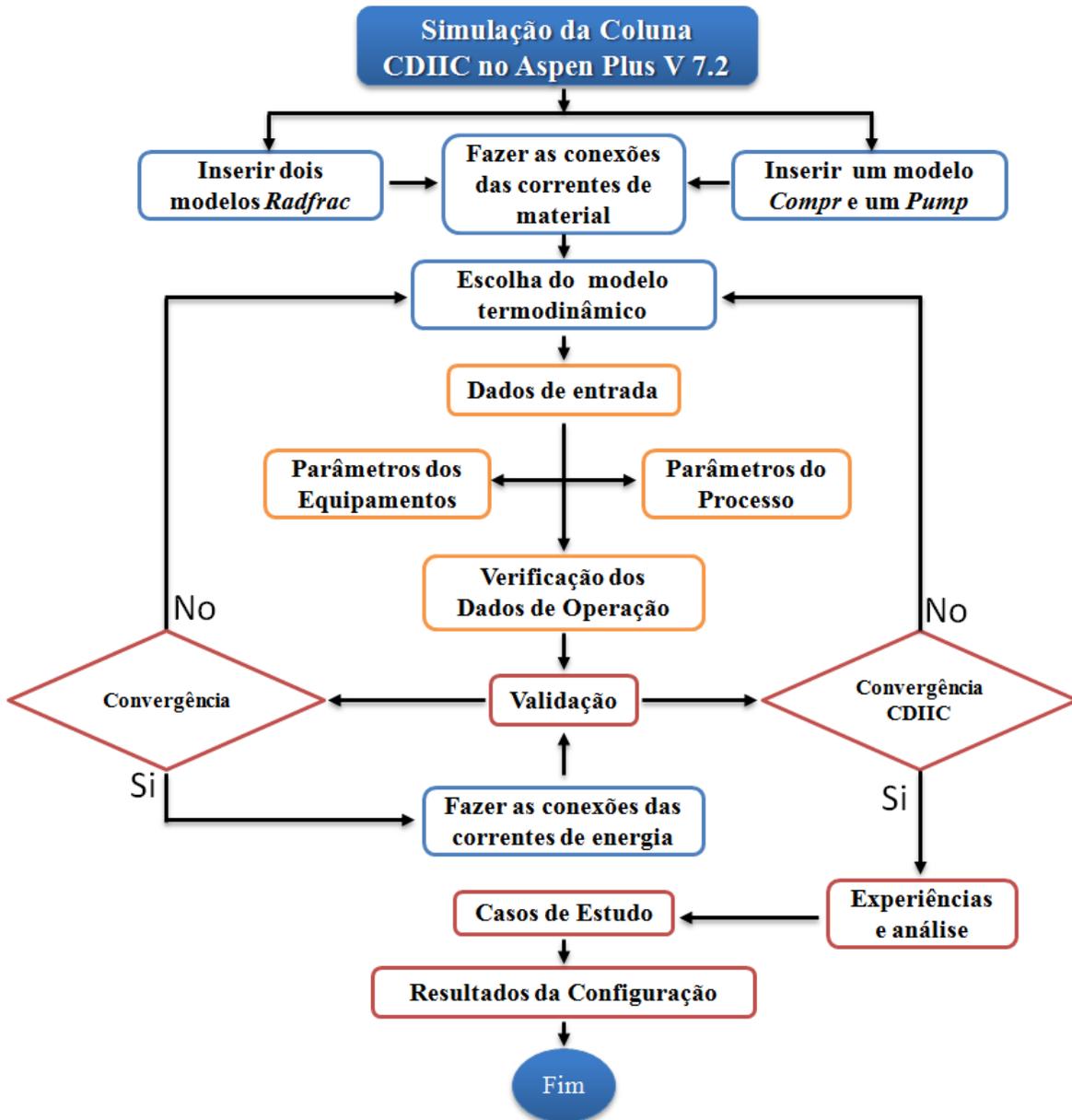
uma corrente de energia interconecta o estágio 1 da seção de retificação com o estágio 1 da seção de esgotamento, o estágio 2 da seção de retificação com o estágio 2 da seção de esgotamento e assim para cada estágio ao longo da configuração de coluna CDIIC.

Passo 8. Rodar a simulação; uma vez realizados os passos descritos anteriormente podem ser calculados os perfis de temperatura, energia consumida pelo refeedor, condensador e compressor para a avaliação da diminuição do consumo de energia.

Desta forma, levando em consideração o procedimento descrito é possível simular uma coluna CDIIC no software Aspen Plus V7.2 de forma aproximada ao processo numa unidade real.

Sabe-se que as características e condições de operação da coluna são especiais para cada tipo de mistura, no entanto, o procedimento permite desenvolver de forma aproximada a configuração da coluna CDIIC no simulador; as condições de operação são obtidas para cada processo em particular.

Um fluxograma do procedimento desenvolvido é apresentado seguidamente no Fluxograma 2, este encontra-se organizado por cores (azul, laranja e vermelho) os quais representam a fase em desenvolvimento. A etapa de set da simulação e desenvolvimento do *flowsheet* do simulador é representada em azul; a etapa de inserção de dados e caracterização dos equipamentos se encontram em laranja e finalmente em vermelho a etapa de validação e convergência da coluna. Também é importante ressaltar que a eficácia dos resultados esta em função do estudo e escolha dos modelos termodinâmicos que melhor representem a mistura e seu comportamento.



Fluxograma 2. Procedimento Simulação Coluna CDIIC no simulador Aspen Plus V

7.2

5.3 Determinação de Parâmetros e Estudos de Simulação

A configuração interna da coluna CDIIC não é um projeto estabelecido na atualidade, porém as diferentes possibilidades de interconexão térmica são objeto de avaliação.

Conseqüentemente, projetos de troca de calor foram desenvolvidos visando à possibilidade de transferência de energia entre a seção de retificação e a de esgotamento.

Embora, a modelagem desenvolvida seja uma aproximação à configuração de coluna, esta conta com duas colunas. Na coluna de esgotamento, a corrente de alimentação é inserida no topo da coluna no primeiro estágio o que faz desta unidade uma seção de esgotamento e na coluna de retificação a alimentação é inserida no fundo da coluna o qual faz com que esta unidade opere como retificação. A coluna CDIIC ideal opera sem condensador e sem refeedor. No presente trabalho, as simulações foram desenvolvidas fazendo uso de um refeedor e um condensador nas seções de esgotamento e retificação, respectivamente.

Para o estudo da configuração de coluna CDIIC, foram estudadas três misturas binárias: benzeno-tolueno, metanol-água e etanol-água definidas como 1, 2 e 3 respectivamente. Os estudos foram estruturados como:

- Separação da mistura Benzeno-Tolueno na coluna CDIIC.
- Separação da mistura Metanol-Água na coluna CDIIC.
- Separação da mistura Etanol-Água na coluna CDIIC.

No primeiro dos casos para a mistura benzeno-tolueno foram planejados três casos de estudo, pois esta mistura apresenta comportamento de sistema ideal e facilita os estudos de modelagem no simulador (sendo usado o termo modelagem ao arranjo desenvolvido por meio das unidades e operações contidas no software; isto devido ao fato de que a configuração de coluna CDIIC não é uma operação unitária para o simulador de processos).

Seguidamente, é estudada a mistura 2 para o aprimoramento da configuração de coluna CDIIC no simulador, criando estratégias de convergência que permitam obter resultados da configuração de coluna com troca de energia.

Finalmente, é estudada a mistura 3 a qual é de grande interesse no Brasil, neste é levado em consideração o azeótropo contido na mistura, obtendo resultados desta e comparando a configuração de coluna CDIIC com o projeto convencional.

Para o desenvolvimento das simulações, o calor presente em cada estágio é estabelecido por meio da diferença de entalpias ΔH (Equação 12); a forma como foi transferido o calor é

por meio de interconexões térmicas diretas entre as seções. Estas são feitas prato a prato especificando uma quantidade de calor constante, fundamentada no perfil de entalpia. A área de transferência A e o coeficiente global de transferência de calor não são usados para os cálculos e são assumidos como constantes em relação à energia em forma de calor estabelecido previamente pelas diferenças de entalpia nos estágios.

Os estudos foram estabelecidos a 1 atmosfera de pressão, descritos para perfis de troca de energia constantes entre as duas seções, tendo em consideração que o sistema é desenvolvido no equilíbrio e sem perdas de calor com o meio.

As especificações usadas no compressor foram mantidas para todos os casos de estudo, a inserção das especificações no simulador foi realizada para condições de pressão de descarga, operação na fase vapor e tipo de compressor isentrópico, estas especificações permitem o cálculo da energia usada pelo compressor para estas condições de operação.

Todas as simulações foram baseadas numa simulação padrão, esta foi validada através de resultados apresentados por grupos de pesquisa japoneses e holandeses [27, 83, 48, 84, 85]. Desta forma, uma análise dos resultados foi realizada para verificar a credibilidade das respostas do simulador.

5.4 Estudo Termodinâmico de Equilíbrio de Fases Binário dos Sistemas Envolvidos

Para o estudo da configuração e validação do desenho da coluna, foram propostos três tipos de misturas de estudo, benzeno-tolueno e metanol-água para efeitos de caracterização e ajuste da configuração; posteriormente é estudada a mistura etanol-água a qual é de grande interesse na atualidade. Seguidamente, é apresentada a caracterização dos componentes e estudo das misturas. As propriedades dos componentes usados (benzeno, tolueno, metanol, etanol e água) para a simulação são descritos no Apêndice I.

Para o desenvolvimento das simulações e facilidade na chamada das misturas será tomada a notação de mistura 1 (benzeno-tolueno), mistura 2 (metanol-água) e mistura 3 (etanol-água); é importante avaliar o desempenho dos modelos termodinâmicos, principalmente da fase líquida.

Foram construídos diagramas de equilíbrio líquido-vapor binários dos compostos envolvidos empregando os modelos termodinâmicos PENG-ROB, NRTL e UNIQUAC para o cálculo dos coeficientes de atividade da fase líquida.

O diagrama binário obtido pelo simulador para a mistura 1 usando o modelo termodinâmico escolhido (pelo meio da ferramenta *Property Method Selection Assistant* do simulador) PENG-ROB (*Peng-Robinson*) é apresentado na Figura 22. O modelo foi escolhido baseado no ‘*property method selection*’ do simulador Aspen Plus V 7.2.

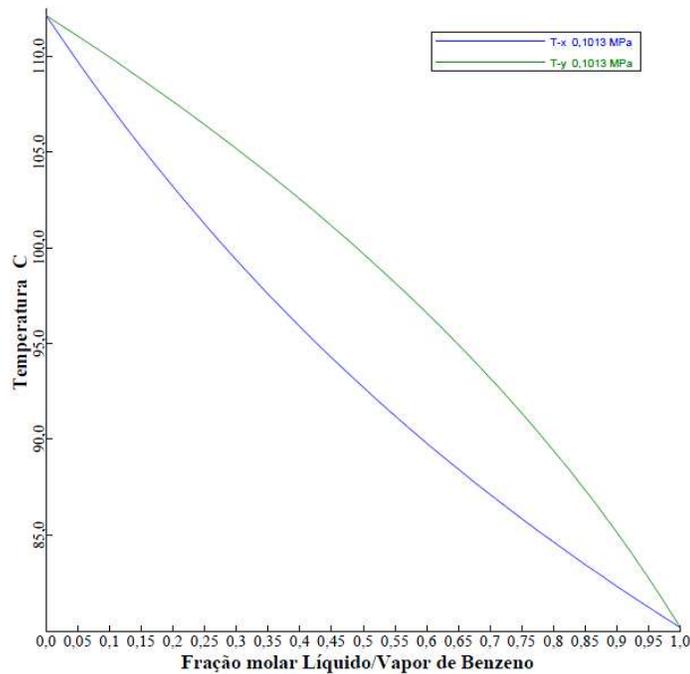


Figura 22. Diagrama T-xy do Sistema Benzeno – Tolueno.

O diagrama binário obtido pelo simulador para a mistura 2 usando o modelo termodinâmico escolhido (pelo meio da ferramenta *Property Method Selection Assistant* do simulador) NRTL (*Non-Random Two Liquid*) é apresentado na Figura 23.

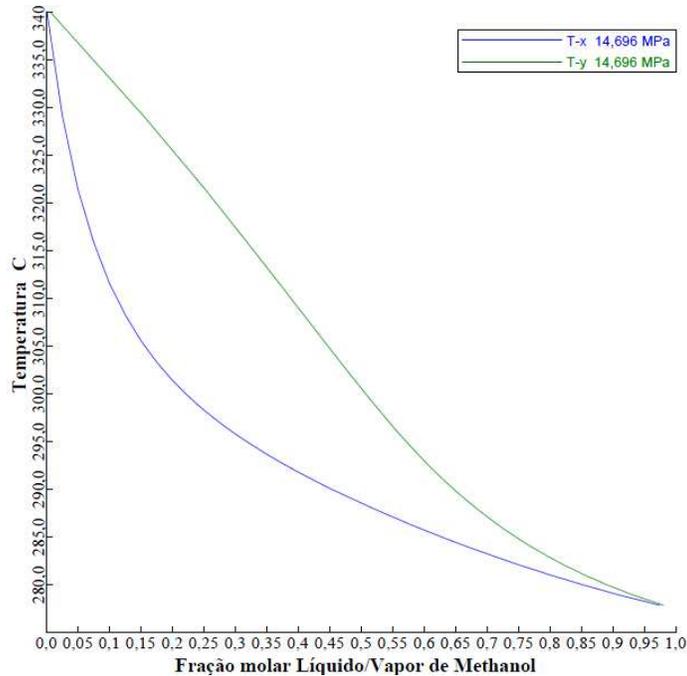


Figura 23. Diagrama T-xy de Sistema Metanol – Água.

Para o sistema etanol-água o qual é de maior importância para o presente estudo, foi obtido o diagrama binário por meio do simulador e com dados experimentais encontrados no DECHEMA [89]. Seguidamente, na Tabela 3, são apresentados os valores das frações do componente mais volátil a uma atmosfera de pressão.

Tabela 3. Dados de Equilíbrio do Sistema Etanol-Água

NRTL		UNIQUAC		DECHEMA	
FracMolar Vapor	FracMolar Líquido	FracMolar Vapor	FracMolar Líquido	X	Y
Y	X	Y	X		
0	0	0	0	0,0210	0,1990
0,2169245	0,025	0,2155941	0,025	0,0330	0,2720
0,3301712	0,05	0,328406	0,05	0,0500	0,3530
0,3993766	0,075	0,3970661	0,075	0,0850	0,4110
0,4458045	0,1	0,4429792	0,1	0,1050	0,4580
0,4790423	0,125	0,4757977	0,125	0,1250	0,4880
0,5040535	0,15	0,5005126	0,15	0,1350	0,4840
0,5236768	0,175	0,5199641	0,175	0,3150	0,5710
0,5396568	0,2	0,5358864	0,2	0,3210	0,5720

0,5531266	0,225	0,5493978	0,225	0,4030	0,6190
0,5648546	0,25	0,5612504	0,25	0,4030	0,6250
0,575381	0,275	0,5719687	0,275	0,5560	0,6750
0,5850967	0,3	0,5819289	0,3	0,6020	0,6950
0,594292	0,325	0,5914079	0,325	0,6430	0,7130
0,6031874	0,35	0,6006143	0,35	0,6890	0,7410
0,6119537	0,375	0,6097086	0,375	0,8050	0,8140
0,620726	0,4	0,6188168	0,4	0,9260	0,9170
0,6296133	0,425	0,6280402	0,425	0,9870	0,9850
0,6387054	0,45	0,6374616	0,45		
0,6480775	0,475	0,6471509	0,475		
0,6577944	0,5	0,657168	0,5		
0,667913	0,525	0,6675659	0,525		
0,6784845	0,55	0,6783927	0,55		
0,6895563	0,575	0,6896932	0,575		
0,7011728	0,6	0,7015101	0,6		
0,7133771	0,625	0,7139233	0,625		
0,7262507	0,65	0,7268887	0,65		
0,7397499	0,675	0,7404979	0,675		
0,7539668	0,7	0,7547941	0,7		
0,7689463	0,725	0,7698227	0,725		
0,7847352	0,75	0,7856314	0,75		
0,8013829	0,775	0,8022708	0,775		
0,8189419	0,8	0,8197953	0,8		
0,8374684	0,825	0,8382632	0,825		
0,8570228	0,85	0,8577375	0,85		
0,8776702	0,875	0,8782867	0,875		
0,8994812	0,9	0,8999849	0,9		
0,9225325	0,925	0,9229129	0,925		
0,9469073	0,95	0,947159	0,95		
0,9726967	0,975	0,9728195	0,975		
1	1	1	1		

Os modelos termodinâmicos foram comparados com os dados experimentais descritos anteriormente; com isto, foi construída a curva de equilíbrio para a mistura etanol-água, visando avaliar o comportamento dos métodos termodinâmicos e, desta forma, a escolha para sua aplicação na simulação de coluna CDIIC no simulador comercial Aspen Plus V 7.2. A curva obtida é apresentada na Figura 24.

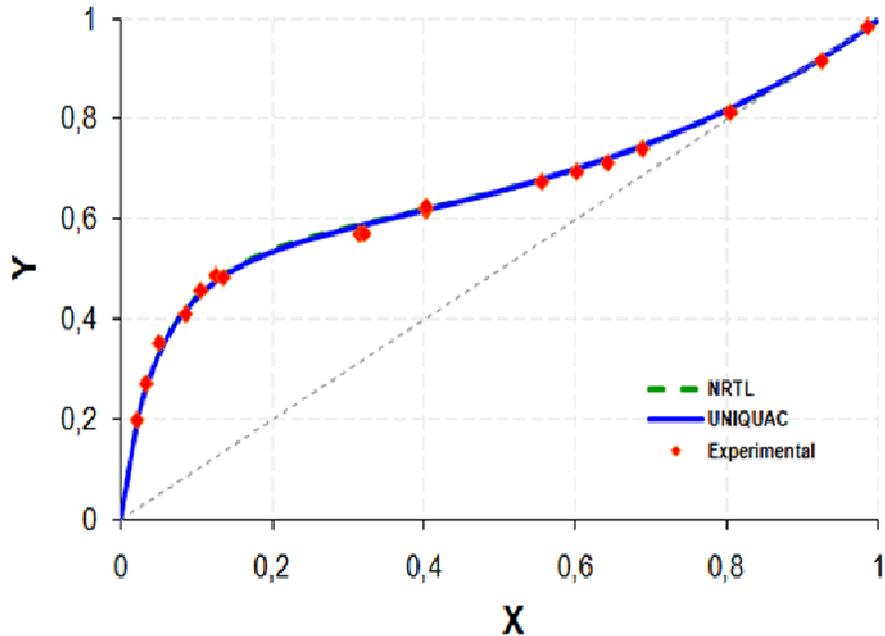


Figura 24. Curva de Equilíbrio Líquido-Vapor para o Sistema Etanol-Água.

Foi encontrado que os modelos termodinâmicos NRTL (*Non-Random Two Liquid*) e UNIQUAC se ajustam aos dados experimentais do DECHEMA, em relação ao estudo da curva de equilíbrio da mistura 3.

No presente estudo, será considerado o modelo NRTL para a solução das equações devido a que este apresenta maior concordância com o comportamento experimental segundo a Figura 24.

Da curva de equilíbrio líquido-vapor apresentada para o sistema etanol-água, é possível observar que a curva para uma composição maior a 0,8 atravessa a linha de equilíbrio, este fenômeno descreve um ponto azeotrópico da mistura. Conseqüentemente, o dígrama da fração molar do líquido e do vapor é apresentado na Figura 25 para uma pressão no sistema de 1atm.

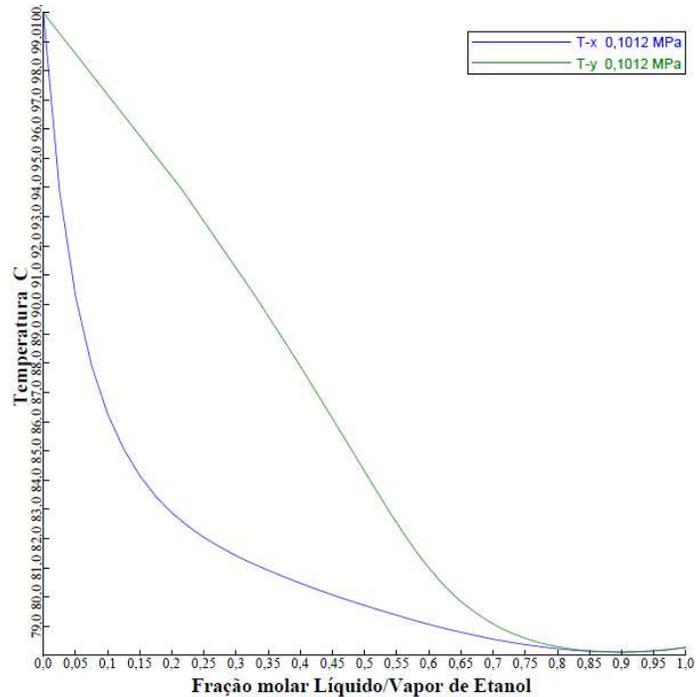


Figura 25. Diagrama T-xy de Sistema Etanol – Água.

Verifica-se que o sistema etanol-água a 1,0 atm de pressão apresenta comportamento azeotrópico. O diagrama de temperatura T-xy para a mistura 3 representa o comportamento ideal com formação de azeótropo.

Levando em consideração a presença do azeótropo, é obtido o diagrama T-x, este permite observar de forma mais detalhada o comportamento do ethanol na fase líquida, isto permite estudar de forma mais precisa o comportamento do azeótropo. Na Figura 26 é apresentado o diagrama para o sistema 3, este foi obtido mantendo as condições de uma pressão contante de 1 atm. Desta forma, devido à característica da mistura azeotrópica presente, se encontra azeótropo de mínimo ponto de ebulição, é importante ressaltar que o azeótropo foi calculado para uma atmosfera de pressão; na configuração de coluna CDIIC, a seção interna (retificação) trabalha a uma pressão maior em relação à seção externa (esgotamento), esta diferença de pressão apresenta uma modificação no comportamento do azeótropo na seção interna da coluna CDIIC devido a que se encontra a uma pressão maior de 1 atm.

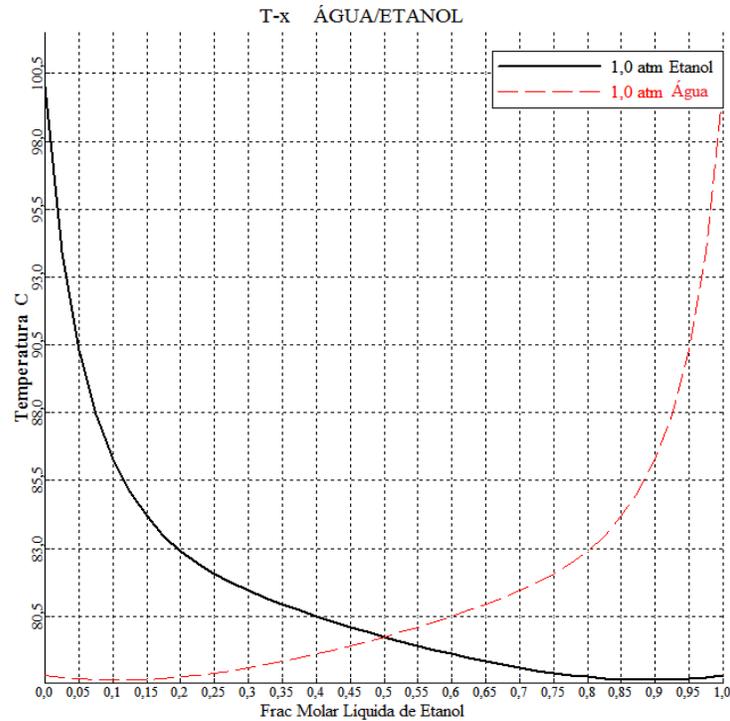


Figura 26. Diagrama T-x de Sistema Etanol – Água.

Fazendo uso da ferramenta *Aspen Split Analysis* foi estudado o comportamento do azeótropo para o modelo termodinâmico NRTL e uma pressão de 1 atm; os resultados obtidos são apresentados na Figura 27.

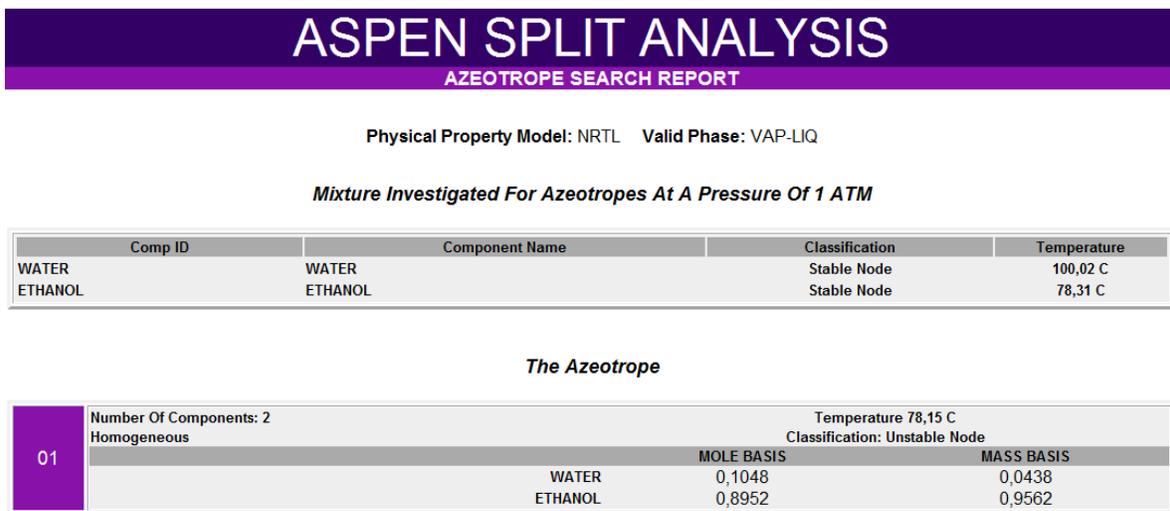


Figura 27. Análise do Azeótropo da Mistura Etanol - Água (1atm). (*Aspen Plus*, V7.2)

Desta forma, foi corroborada a presença do azeótropo conforme o apresentado no estudo termodinâmico da mistura.

O azeótropo é encontrado a condições de 1 atm de pressão, na temperatura de 78,15 °C. Nestas condições, apresenta-se um ponto singular de 0,8952 e 0,1048 composição em base molar de etanol e água, respectivamente.

A presença do azeótropo dificulta a obtenção do componente etanol numa concentração de produto maior a 89,52% nas condições convencionais de separação; processos de separação alternativos como: não convencionais, devem ser usados para aprimorar a eficiência de separação desta mistura.

Sendo determinados os modelos termodinâmicos para as diferentes misturas e estabelecendo condições ideais de pressão (1 atm), foram obtidos os diagramas de equilíbrio líquido vapor. As misturas em estudo têm seu comportamento no diagrama de equilíbrio x-y mostrado nas Figuras 28-30.

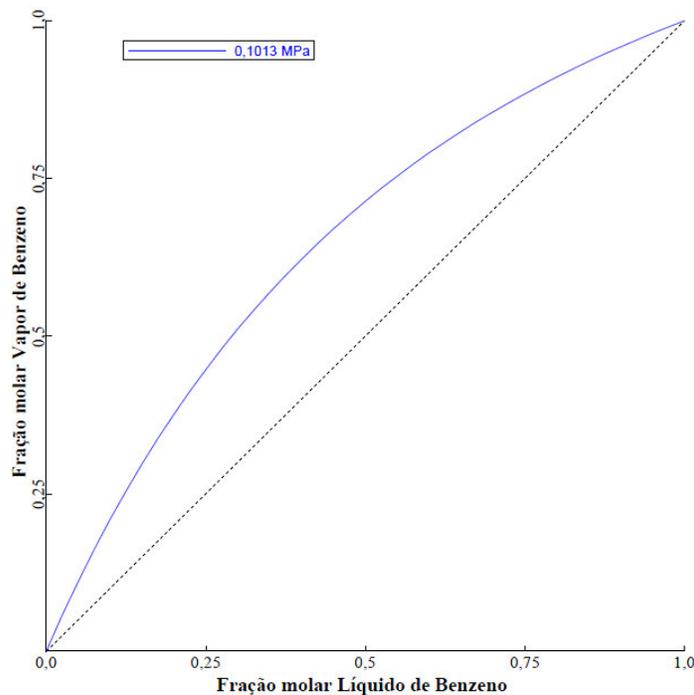


Figura 28. Diagramas x-y Benzeno – Tolueno

As propriedades físico-químicas para cada componente das misturas 1, 2, 3 são apresentadas no Apêndice I. Levando em consideração os pontos de ebulição e as pressões de vapor para cada componente, foi encontrado que para as mistura 1,2 e 3 os componentes mais voláteis são Benzeno, Metanol e Etanol, respectivamente, as pressões de vapor para cada componente são especificadas na Tabela 4.

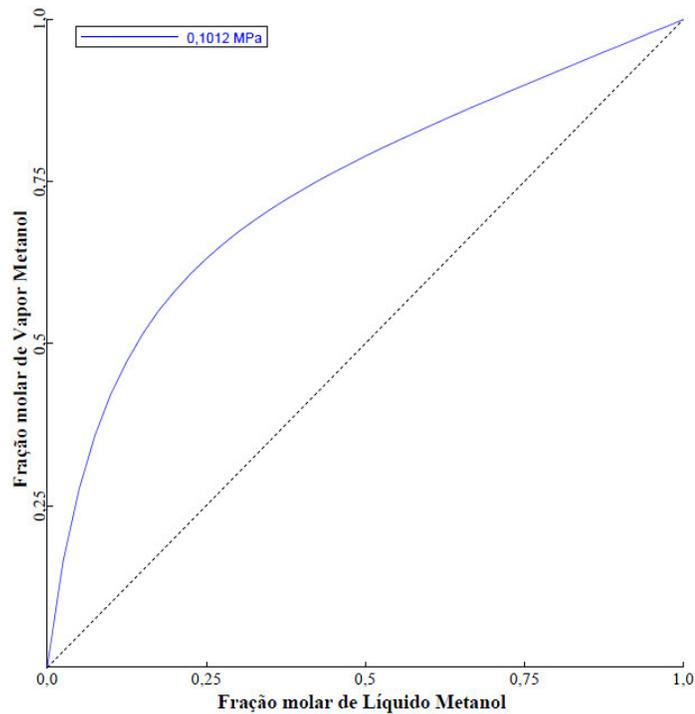


Figura 29. Diagramas x-y Metanol – Água

Pode-se observar que a mistura benzeno-tolueno não apresenta patamar ou azeótropo, mostrando ser um sistema com comportamento ideal. O mesmo comportamento acontece para o sistema metanol-água. Isto é verificado mesmo utilizando-se o modelo para coeficiente de atividade.

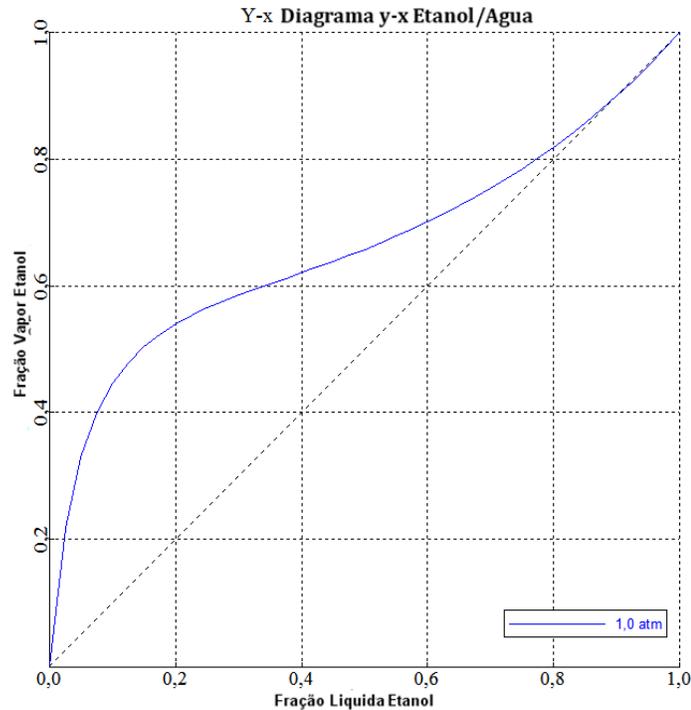


Figura 30. Diagramas x-y Etanol – Água

A equação de Raoult poderia, inclusive, ser usada. Estudos da mistura benzeno-tolueno foram aprofundados por Ohe [90] quem apresentou o estudo da mistura a pressão atmosférica com modelo de líquido e vapor ideais.

A Tabela 4 foi construída com o objetivo de verificar a pressão de vapor estimada pelo simulador e as obtidas na literatura. A pressão de vapor é apresentada para os componentes puros e os modelos termodinâmicos já apresentados.

Tabela 4. Pressão de Vapor dos Componentes (P_v) da literatura (1) e obtida pelo Simulador (2)

Componente	Temperatura (°C)	P_v 1 (KPa)	P_v 2 (KPa)	Referência
Benzeno	25	12,6839	12, 678	[93]
Tolueno	25	3,7957	3,789	[94]
Metanol	25	16,9151	16,899	[93]
Etanol	25	7,8700	7,796	[92]
Água	25	3,1680	3,169	[91]

A maior diferença entre o valor da pressão de vapor obtido na literatura e o estimado pelo simulador são menores a 1%. Desta forma, é possível verificar que o simulador é capaz de prever com grande precisão o valor da pressão de vapor dos principais componentes da simulação fazendo uso dos modelos termodinâmicos estabelecidos.

Desta forma é verificado, que o simulador é capaz de prever com grande precisão o valor de pressão de vapor dos componentes, para os modelos termodinâmicos estabelecidos. Estes pacotes termodinâmicos foram usados ao longo da simulação.

Para efeitos da simulação da coluna CDIIC, é muito importante o uso das misturas 1 e 2 para a validação do modelo proposto de simulação (entenda-se como modelo a configuração desenvolvida no simulador), devido ao fato de que ambas não apresentam complicações para a separação, podendo ser usadas para o estudo e validação da simulação de coluna CDIIC.

Finalmente, foram estudadas as três misturas de estudo estabelecidas para o presente trabalho por meio do simulador de processos Aspen Plus V7.2; os métodos termodinâmicos permitem a formulação e desenvolvimento das equações, permitindo uma análise das fases de equilíbrio por meio de cálculos.

5.5 Simulação da coluna CDIIC na Separação da Mistura Benzeno-Tolueno

Estudos de simulação para três misturas binárias diferentes foram desenvolvidos, nas mesmas condições de operação, estes foram especificadas no item 5.4. Para as simulações desenvolvidas, a modelagem apresentada na Figura 31 expõe os diagramas de blocos usados no simulador Aspen Plus V7.2 para a coluna convencional e a coluna CDIIC.

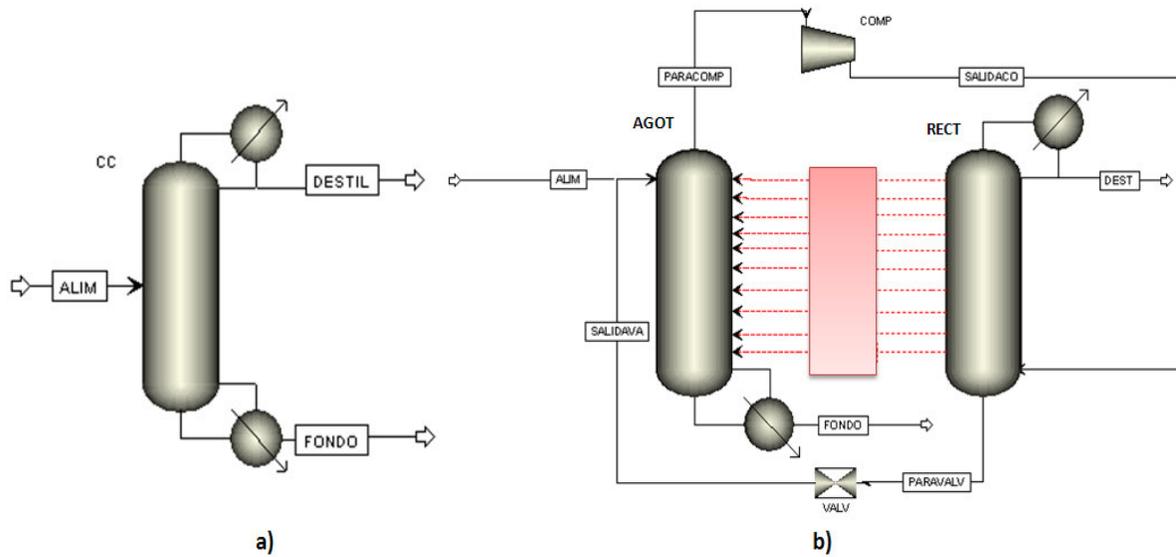


Figura 31. a) Coluna Convencional, b) Coluna CDIIC

Diferentes estudos em relação à simulação da coluna foram desenvolvidos por grupos de investigação Japoneses e Holandeses [53-60] apresentando sua viabilidade e aplicação no simulador, estes estudos foram levados em consideração para o desenvolvimento de todas as simulações, focalizando o interesse sobre a diminuição da energia da coluna CDIIC comparada com a Convencional.

A mistura benzeno-tolueno apresenta-se como uma mistura que permite o estudo da coluna, devido a que não apresenta azeótropo ou baixa volatiade realtiva. Assim, diferentes configurações de coluna são estudadas por meio de casos, estes permitem modelar o comportamento da coluna de forma aproximada à real e estudar sua operabilidade.

Os casos de estudo estabelecidos nesta dissertação para a mistura 1 permitem avaliar três tipos de arranjos para a troca de energia; esta troca acontece da seção de retificação para a seção de esgotamento como foi desito no Capítulo 5. Os casos de estudo são:

- Caso 1: *transferência de calor constante ao longo da coluna*. Neste estudo, è trocada uma quantidade constante de energia entre as duas seções. Este caso representa de forma similar o comportamento de uma coluna concêntrica onde a seção de retificação e esgotamento possui o mesmo diâmetro e comprimento ao

longo da coluna (sendo a seção de esgotamento de diâmetro maior que a seção de retificação), transferindo a mesma quantidade de calor prato a prato entre as duas seções. As condições de operação são as estabelecidas na Tabela 4 e o número de estágios é igual para as duas seções.

- *Caso 2: perfil de transferência de energia ao longo da coluna.* Neste estudo, é estabelecido um perfil de energia ao longo da coluna. Este caso representa de forma similar uma seção de retificação que modifica o diâmetro da seção ao longo da figura (geometria cônica). O número de estágios é igual nas duas seções.
- *Caso 3: perfil em escada.* Neste estudo, é estabelecido um perfil de energia em escada para a seção de retificação, sendo assim, a energia trocada da seção de retificação ao longo da coluna é dividida em três intervalos diferentes de transferência de energia. Estes aumentam em forma de escada nos três intervalos. As condições de operação são as mesmas dos casos anteriores e o número de pratos é igual para as duas seções.

Cabe destacar que a transferência de calor é direta entre as seções, de modo que se despreza a resistência do material e perdas com o meio ambiente.

No estudo desenvolvido para o equilíbrio líquido-vapor da mistura 1, a corrente de alimentação é introduzida a 70 °C e 0,1023 MPa; a composição da carga é realizada em fração molar e de forma equimolar.

A inserção dos componentes no simulador foi feita como tipo convencional, esta é apresentada na Tabela 5, a partir das quais o simulador realiza a estimativa das propriedades dos compostos.

O trabalho do compressor é isoentrópico e para todas as simulações foi estabelecida uma simulação do 80%.

Tabela 5. Categoria dos Componentes da Mistura 1 no Simulador.

Componente	Nome no Simulador	Categoria	Tipo	Fórmula
Benzeno	Benzene	Hidrocarboneto Aromático	Convencional	C6H6
Tolueno	Toluene	Hidrocarboneto Aromático	Convencional	C7H8

Anteriormente à implantação do processo no simulador foi feito um estudo dos parâmetros usados na literatura para a simulação de misturas binárias na coluna CDIIC [27, 48, 83, 84, 85], a partir destes foram desenvolvidas as simulações, estabelecendo o processo da forma mais aproximada à realidade.

Os parâmetros estabelecidos para as simulações dos três casos da mistura 1 são apresentados na Tabela 6 a seguir. Como o objetivo é comparar a coluna CDIIC com a convencional foi estabelecidas as mesmas condições de operação (alimentação, número de pratos, não queda de pressão no sistema), como o presente trabalho esta focalizado à transferencia de calor e simulação da coluna CDIIC no software comercial para a facilidade do estudo da nova configuração de coluna.

Tabela 6. Parâmetros da Simulação do Sistema Benzeno-Tolueno

Ítem	Coluna Convencional	CDIIC
Número de pratos	26	26
Pressão de Retificação (MPa)	0,1013	0,25
Pressão de Esgotamento (MPa)	0,1013	0,1013
Vazão de Alimentação (Kmol/h)	100	100
Composição de Benzeno na Alimentação (Fração molar)	0,5	0,5
Prato de Alimentação	11	11-Retificação, 1-Esgotamento

A operação da unidade convencional foi simulada a partir dos mesmos parâmetros estabelecidos para a coluna CDIIC. O processo de destilação simulado para a coluna CDIIC é semelhante ao observado nos processos convencionais na indústria, isto em relação ao

equilíbrio líquido-vapor. Dados de número de estágios, posição de alimentação e operação foram baseados nos estudos apresentados por grupos de pesquisa japoneses [27, 48, 83, 84, 85] nas unidades já construídas.

O processo foi implementado de maneira semelhante ao descrito no Capítulo 5 para a coluna CDIIC. No entanto alguns itens devem ser ressaltados como o trabalho da seção interna, a qual opera ao duplo da pressão de esgotamento a qual trabalha à mesma pressão da coluna convencional (relação 1:2).

Na Tabela 7 são apresentadas as configurações da coluna convencional e da coluna CDIIC e as especificações necessárias para a simulação. A numeração dos estágios é crescente no sentido do fundo.

Tabela 7. Especificações do processo simulado para a mistura 1

Coluna CDIIC	
Queda de Pressão (MPa)	0
Posição de alimentação (Esgotamento)	1
Posição de alimentação (Retificação)	13
Vazão de refeedor (Esgotamento em base molar)	2,1
Vazão de refluxo (Retificação em base molar)	1,20
Tipo de refeedor (Esgotamento)	<i>kettle</i>
Tipo de Condensador (Retificação)	total
Tipo de Compressor	Isoentrópico
Coluna Convencional	
Queda de Pressão (MPa)	0
Posição de alimentação	14
Vazão de refeedor (Base molar)	2,1
Vazão de refluxo (Base molar)	1,21
Tipo de refeedor	<i>Kettle</i>
Tipo de condensador	Total

O processo de destilação convencional foi simulado por meio do mesmo método termodinâmico determinado para a coluna CDIIC. O diagrama de blocos usado para a simulação é o mesmo apresentado na Figura 31.

5.5.1 Caso 1

No caso 1, foi simulado um perfil de transferência de energia constante ao longo da coluna, acontece da seção de retificação para a seção de esgotamento. O cálculo da quantidade de energia trocada foi determinado por meio dos fluxos de entalpia na fase vapor e líquido; estes são apresentados nas Figuras 32 e 33, respectivamente. Assim, da equação 12 é calculada a máxima quantidade de energia a ser trocada.

A relação de compressão entre a seção de esgotamento e a seção de retificação é de 1:2, respectivamente. O compressor realiza um trabalho isentrópico e garante o fluxo de vapor comprimido e aquecido na entrada da seção de retificação.

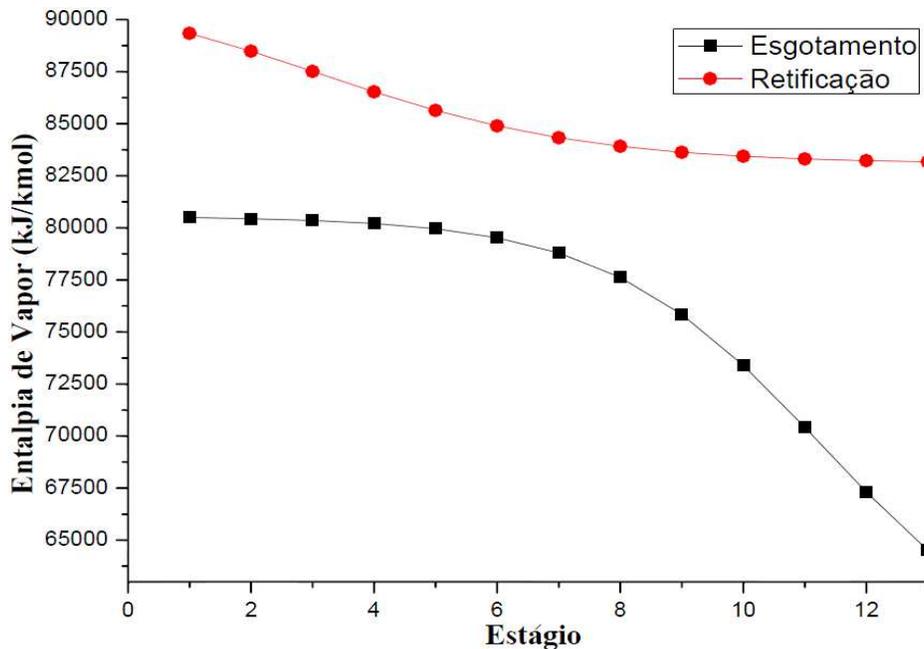


Figura 32. Entalpia na Fase Vapor da Coluna CDIIC Caso 1

Na coluna CDIIC, a menor quantidade de entalpia se apresenta no fundo das seções como pode ser observado nas Figuras 32 e 33. Para garantir a convergência das simulações,

a quantidade de energia trocada é calculada a partir da menor quantidade de energia presente na seção de retificação. Na seção de esgotamento, o mínimo valor de entalpia na fase vapor é de 83170,3 kJ/kmol e 41725,6 kJ/kmol na fase líquida.

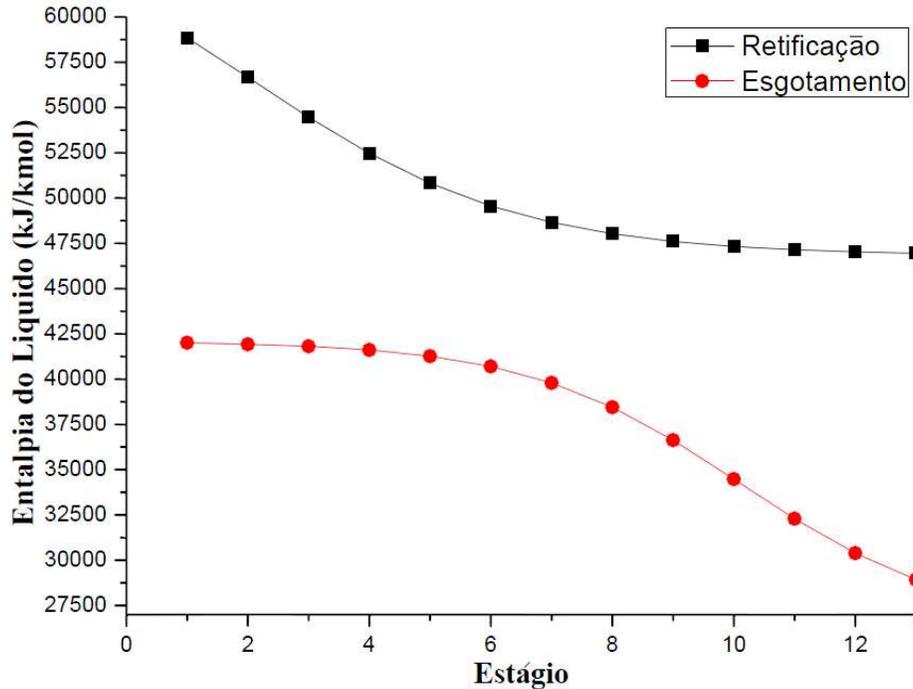


Figura 33. Entalpia na Fase Líquido da Coluna CDIIC Caso 1

Das Figuras 32 e 33, é possível verificar diferenças nas condições da entalpia nas seções. É observado que para os primeiros estágios, as diferenças entre as entalpias de líquido e vapor entre as duas seções é maior em comparação com os estágios finais. Assim, a maior quantidade de energia presente no sistema se encontra disposta nestes estágios.

O cálculo da quantidade de energia disponível na seção de retificação é realizada pelo meio da entalpia presente no sistema. A simulação foi realizada considerando o uso de 40 % da energia disponível no estágio n (fundo da seção de retificação) da seção de retificação. A quantidade de energia calculada para o fundo da seção de esgotamento é de 129,36 kJ/kmol, o valor da energia foi calculada por meio da equação 12, a partir dos mínimos valores de entalpia do sistema, sendo 35651 kJ/kmol e 35521,64 kJ/kmol nas fases vapor e líquida, respectivamente. Sabese que a quantidade de energia disponível no estágio

não pode ser retirada em sua totalidade, em consequência, uma inconsistência termodinâmica devido ao fato de retirar toda a energia presente no estágio leva à não convergência da coluna.

Para efeitos de simulação, e visando a convergência, é estabelecida uma troca máxima de 40% da energia contida no estágio de menor quantidade de energia da seção de retificação. Desta forma, é estabelecida uma troca de 50 kJ/kmol da seção de retificação para a seção de esgotamento, esta quantidade é trocada prato a prato sem perdas de energia no meio.

O caso 1 foi simulado uma configuração aproximada de coluna CDIIC concêntrica com transferência de calor constante ao longo da coluna; este representa um projeto uniforme nas dimensões das seções, o mesmo diâmetro ao longo das seções da coluna (diâmetro da seção de retificação menor ao diâmetro da seção de esgotamento).

Na coluna é transferida a mesma quantidade de energia ao longo dos estágios. Os resultados obtidos para o perfil de temperatura na coluna CDIIC são apresentados na Figura 34.

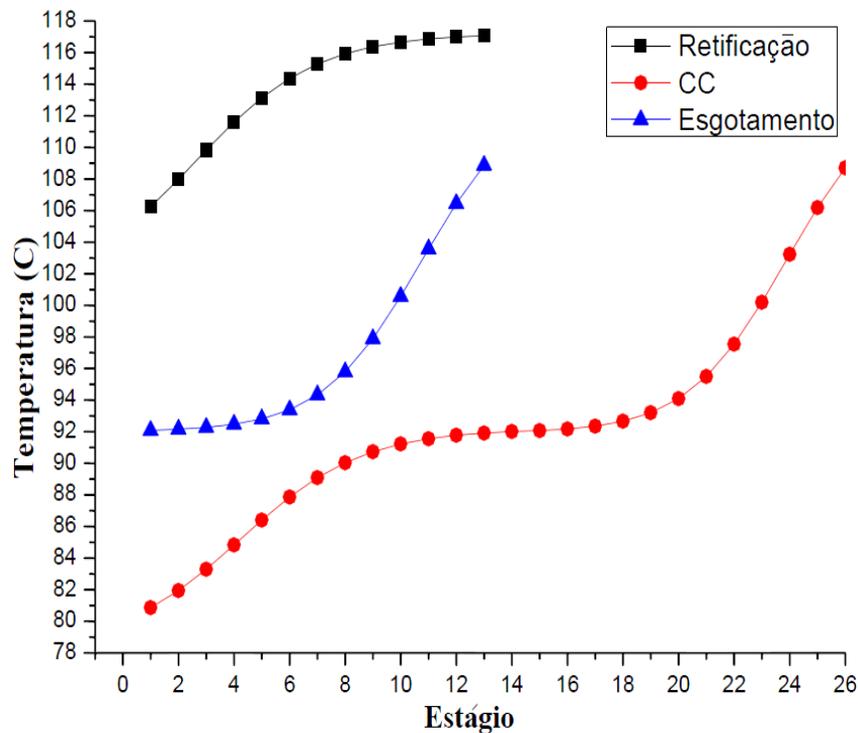


Figura 34. Perfil de Temperatura da Coluna CDIIC Caso 1

Os perfis de calor foram obtidos para a troca de calor entre as seções de 50 kJ/kmol na coluna CDIIC. Do gráfico, pode-se observar que devido à diferença de temperatura entre as seções, o fenômeno de transferência de calor e o princípio da coluna CDIIC é aplicável.

O perfil da coluna convencional (CC) apresenta temperaturas na faixa de operação nos estágios superiores em comparação com a coluna CDIIC.

A coluna CDIIC apresenta perfis de temperatura maiores à coluna convencional devido à compressão do vapor produzido na seção de esgotamento, em consequência, a coluna convencional encontra a mínima temperatura de operação da coluna CDIIC aos 92 °C aproximadamente no estágio 13; a mesma temperatura é obtida na coluna CDIIC no estágio 1.

Fazendo uso do simulador Aspen Plus V7.2 foram calculados os parâmetros da coluna CDIIC. É importante ressaltar que devido a que os simuladores comerciais não contêm esta configuração como modelo, uma modelagem aproximada da coluna foi simulada para o estudo desta nova configuração, resultando possível a representação desta configuração no simulador comercial.

Os resultados foram comparados com uma unidade convencional e os casos estabelecidos, com parâmetros de alimentação e condições iguais de operação.

A quantidade de energia requerida no compressor é calculada pelo simulador fazendo uso de curvas de rendimento em relação às especificações de eficiência do equipamento, estas são descritas para uma compressão isoentrópica no bloco Compr block sendo preestabelecida a pressão de descarga.

Para uma eficiência de 0,8, a quantidade de energia requerida na operação do sistema foi calculada por meio do simulador Aspen Plus V7.2; a eficiência mecânica é de 1 e a energia obtida é de 80,08 kW. Os resultados obtidos para o compressor são apresentados na Tabela 8.

O compressor faz parte do conceito de coluna; este permite o aumento da pressão e da temperatura da mistura de vapor; o calor latente presente nesta seção é o fator fundamental para a troca de calor entre as seções, embora uma grande quantidade de energia requerida pelo compressor faria do projeto de coluna CDIIC inviável; a quantidade de energia requerida pelo sistema incluindo o compressor deve ser menor que a requerida pelo processo convencional.

Tabela 8. Resultados do Compressor Caso 1.

Tipo de Compressor	Compressor Isoentrópico
Fase do cálculo	Calculado para a Fase Vapor
Energia Isentrópica Requerida (kW)	64,06
Eficiência	0,8
Pressão de saída (MPa)	0,21
Temperatura de Saída (°C)	117,87

A discussão e os resultados para os 3 casos são apresentados no final do estudo da mistura benzeno-tolueno.

5.5.2 Caso 2

No caso 2, se estabelece uma transferência de energia ao longo da coluna em forma de perfil. O cálculo da quantidade de energia disponível na seção de retificação é baseada no caso 1, assim, o perfil de energia decresce a razão de 5 kJ/kmol no sentido do topo da coluna; a máxima quantidade de energia trocada é de 50 kJ/kmol no fundo da coluna e de 5 kJ/kmol no topo da coluna.

A relação de compressão entre a seção de esgotamento e a seção de retificação é mantida de 1:2, respectivamente. O compressor realiza um trabalho isentrópico e garante o fluxo de vapor comprimido na entrada da seção retificação. O potencial máximo de transferência atinge o 40% da energia contida no estágio do fundo da seção de retificação.

Na Figura 35, é apresentado o comportamento da entalpia nas duas seções da coluna, devido à troca de calor determinada por um perfil de energia; a operação da coluna muda em comparação com a configuração de troca de energia constante ao longo da coluna.

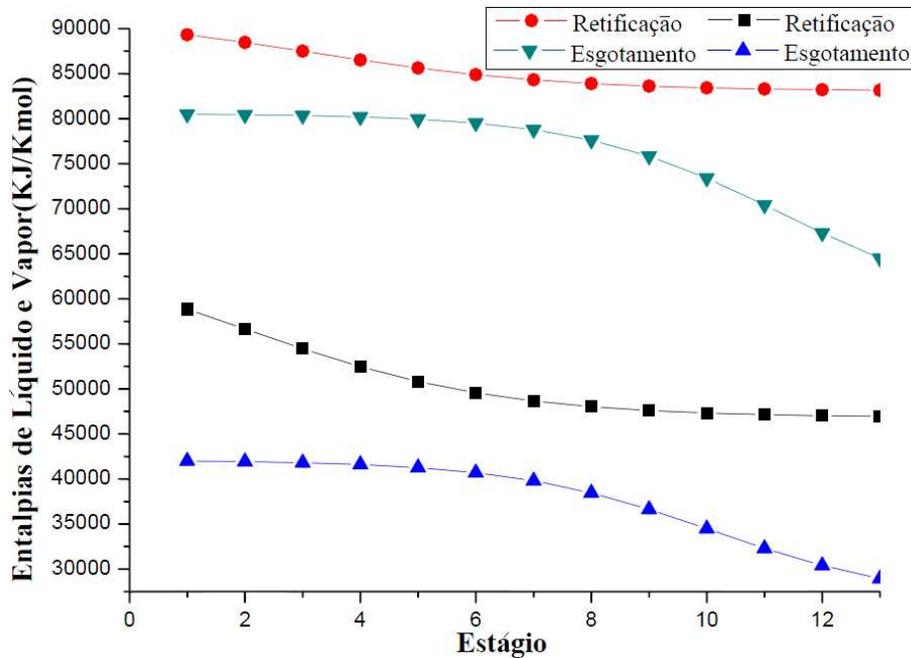


Figura 35. Entalpia da Coluna CDIIC Caso 2

Da Figura 35, pode-se observar o potencial de troca térmica entre as duas seções em função das entalpias de líquido e vapor. Devido à diferença de pressão entre as duas seções, os perfis na seção de retificação são maiores em relação aos obtidos para a seção de esgotamento; desta forma, é possível a troca de energia entre as duas seções. Os perfis superiores em vermelho e verde representam a entalpia de vapor e os perfis preto e azul representam a entalpia do líquido.

Do gráfico é possível observar que os perfis de entalpia do sistema apresentam a mesma tendência para uma troca de calor tipo perfil ao longo da coluna, isto é devido a que a diferença de temperatura entre o topo e o fundo da coluna varia ao redor de 16°C e 11°C na seção de esgotamento e retificação, respectivamente. Devido a que o perfil de temperatura não varia significativamente ao longo das seções, as vazões molares de líquido e vapor permanecem constantes para cada seção.

Os perfis de calor obtidos para o caso 2 são apresentados na Figura 36.

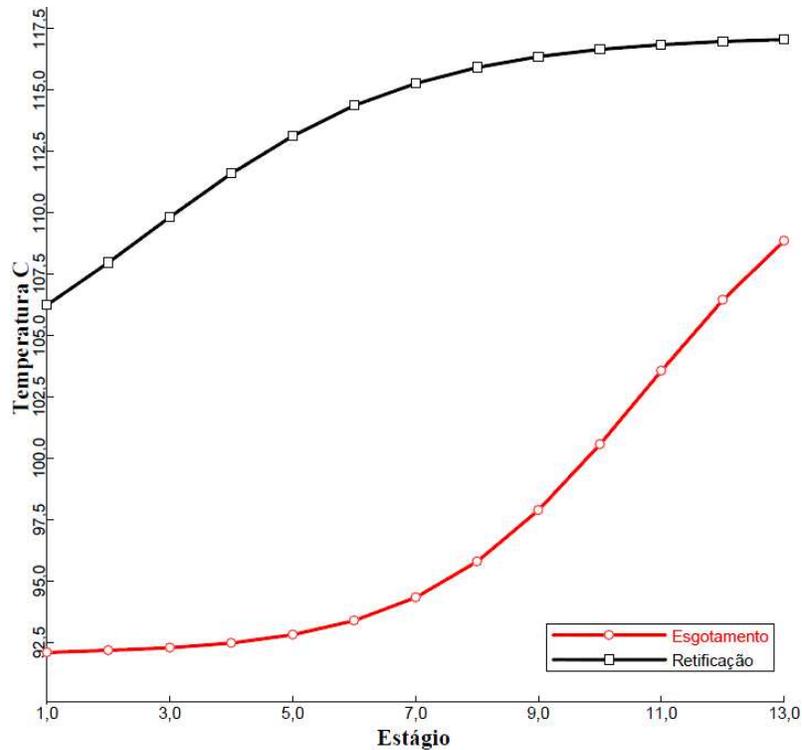


Figura 36. Perfil de Temperatura da Coluna CDIIC - Caso 2

Pode-se observar que nos pratos intermediários a temperatura presente é maior no perfil da seção de retificação em relação com o perfil de temperatura da seção de esgotamento, em consequência, é possível observar que nestes estágios a diferença de temperatura é um pouco maior comparado com o caso 1; para o estágio 7, no caso 1 se apresenta uma temperatura de 114,97 °C e no caso 2 se apresenta uma temperatura de 115,87 °C. Desta forma, o perfil de temperatura apresentado no caso, aumenta em 1 °C aproximadamente em comparação com o perfil de temperatura do caso 1. O potencial de transferência observado no caso 2 para os estágios intermediários é devido à quantidade de energia transferida do estágio da seção de retificação para a de esgotamento, consequentemente, a temperatura presente nos primeiros estágios é maior em relação aos estágios dispostos no caso 1.

A temperatura presente no estágio 1 da seção de retificação é igual ou menor que a temperatura presente no estágio 13 da seção de esgotamento da coluna CDIIC. A simulação do perfil de energia estudado no caso 2 mostra a forma como a temperatura dos estágios

intermediários e do topo apresentam temperaturas mais elevadas que permitem a troca do calor.

Na prática, a operação da coluna é afetada pelas razões de vapor e líquido presentes nos estágios, desta forma, a hidráulica é fundamental para manter as condições de operação dos fluxos de líquido e vapor.

Temperaturas maiores às simuladas implicam a possibilidade de arraste de líquido ao longo da coluna o que dificulta a separação, sabe-se que para as condições de operação estabelecidas a coluna consegue operar, mais os estudos de simulação encontrados apresentaram não convergência para temperaturas muito elevadas, superiores a 50 °C de diferença entre o topo e fundo das seções. Estas considerações devem ser tidas em conta na prática para garantir a operabilidade da coluna.

Os cálculos obtidos para o compressor são expostos na Tabela 9.

Tabela 9. Resultados do Compressor Caso 2.

Tipo de Compressor	Compressor Isoentrópico
Fase do cálculo	Calculado para a Fase Vapor
Energia Isoentrópica Requerida (kW)	64,06
Eficiência	0,8
Pressão de saída (MPa)	0,21
Temperatura de Saída (°C)	117,87

A quantidade de energia requerida no compressor é calculada pelo simulador fazendo uso de curvas de rendimento em relação às especificações de eficiência do equipamento, da mesma forma como foi descrito para o caso 1.

A quantidade de energia requerida calculada por meio do simulador Aspen Plus V 7.2 para uma eficiência de 0,8 é de 64,04 kW, sendo a mesma requerida para o caso 1 (transferência constante ao longo da coluna), a eficiência mecânica é de 1 e 80,08 kW cavalos de potência. Em consequência, foi observado que o compressor requer a mesma quantidade de energia para operar no caso 1 e 2.

5.5.3 Caso 3

Uma vez estabelecidos os casos 1 e 2 (transferência de energia constante e em perfil, respectivamente), onde foram simulados situações de troca térmica que permitem determinar possíveis arranjos internos na coluna CDIIC. No caso 3, é simulado um *perfil* em escada, este representa uma configuração de coluna concêntrica onde a seção de retificação troca energia em forma de escada ao longo da coluna (troca de três quantidades de energia diferentes em três passos), esta troca diminui no sentido do fundo ao topo da coluna.

A relação de compressão entre as seções é mantida igual aos casos de estudo 1 e 2, sendo de 1:2, respectivamente, para cada seção. As condições de trabalho do compressor também são mantidas (isentrópico) e garante a relação de compressão para a alimentação da seção de retificação.

A quantidade de energia a ser trocada é a mesma calculada para o caso 1, desta forma foi estudado o comportamento da coluna CDIIC em comparação com a convencional modificando os perfis de energia trocada entre as seções, para a quantidade máxima de energia a trocar.

O potencial de transferência máximo foi estabelecido como o 40% da energia contida no fundo da seção de retificação; desta forma a quantidade de energia máxima a transferir é 50 kJ/kmol como foi especificado no caso 1.

No caso 3, a transferência em forma de escada é representada pela troca de três quantidades diferentes de calor ao longo da coluna, uma de 50 kJ/kmol no fundo da coluna, outra de 30 kJ/kmol nos estágios intermediários da coluna e finalmente 10 kJ/kmol no topo da coluna. Cada passo representa uma série de 8 estágios, transferindo a mesma quantidade de energia 50 , 30 e 10 kJ/kmol , respectivamente.

Na Figura 37, são apresentados os perfis de entalpia da coluna CDIIC; a operação da coluna é feita para as mesmas condições de alimentação estabelecidas para os casos 1 e 2 estudados anteriormente.

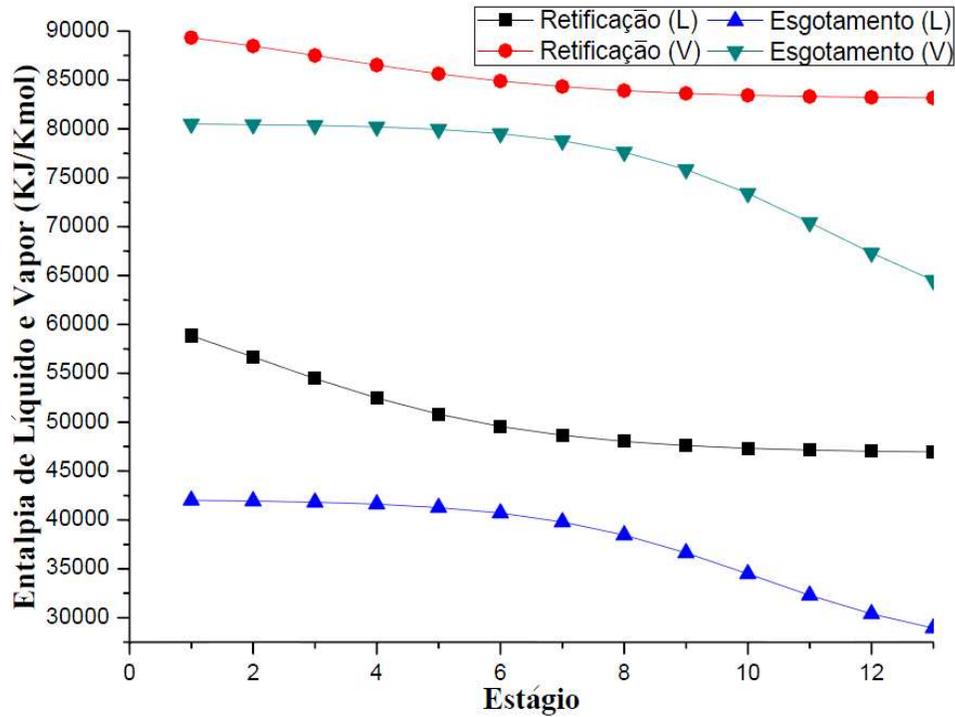


Figura 37. Entalpia da Coluna CDIIC Caso 3

Nesta figura, é representado o potencial de troca térmica entre as duas seções em função das entalpias de líquido e vapor em kJ/kmol. Da mesma forma, os perfis na seção de retificação são maiores em relação com os obtidos para a seção de esgotamento, o qual permite a troca de energia entre as duas seções.

O comportamento dos perfis é diferente em relação ao apresentado nos outros casos, uma vez que as entalpias ao longo da coluna é quase uniforme, ao contrário dos outros casos de estudo onde algumas seções da coluna apresentam grande diferença de entalpia com respeito a outros estágios da coluna. Este arranjo permite obter diferenças de entalpias menores entre o topo e o fundo das seções isto é de grande importância no sentido prático devido a que facilita a operabilidade da coluna. Foi encontrado que na é necessária uma quantidade de energia de 83170,34 kJ/kmol e 64509,22 kJ/kmol na fase vapor das seções de retificação e esgotamento, respectivamente. Os perfis de calor obtidos para o caso 3 são apresentados na Figura 38.

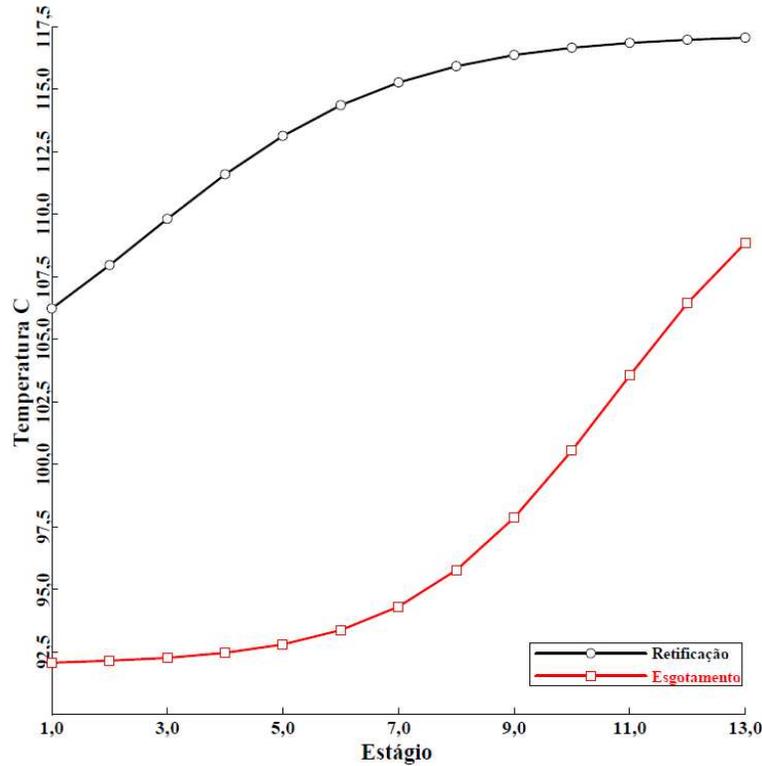


Figura 38. Perfil de Temperatura da Coluna CDIIC Caso 3

Observou-se que o perfil de calor apresenta as condições que permitem a troca de calor (perfil de temperatura da seção de retificação maior ao perfil de temperatura da seção de esgotamento). O perfil de temperatura não apresenta modificações drásticas em relação ao perfil de temperatura obtido para o caso 2. Neste caso, o perfil de temperatura nos estágios 4-9 apresentam um potencial máximo de transferência de energia em comparação com os casos 1 e 2, esta diferença de temperatura maior, expõe a possibilidade de aproveitamento de uma maior quantidade de calor nestas seções, em comparação com os outros casos de estudo para a simulação estabelecida da mistura benzeno-tolueno.

Os cálculos do compressor foram feitos com as mesmas especificações dadas para os três casos de estudo, encontrando que para uma eficiência de 0,8 a energia isoentrópica requerida é de 64,04 kW, Em consequência, é possível concluir que para as condições estabelecidas o compressor requer a mesma quantidade de energia para operar nos três casos de estudo da mistura benzeno-tolueno.

5.5.4 Análise e Resultados do Sistema Benzeno-Tolueno

O simulador Aspen Plus V 7.2 é capaz de simular a transferência de energia entre as seções, esta foi estudada através dos 3 casos para mistura benzeno-tolueno. No caso 1, uma troca de calor uniforme ao longo da coluna é simulada para a configuração aproximada de coluna CDIIC, esta representa de forma aproximada uma unidade concêntrica real com diâmetros constantes na seção de esgotamento e retificação (diâmetro da seção de retificação menor ao diâmetro da seção de esgotamento).

No caso 2, é simulada uma configuração aproximada de coluna CDIIC, nesta, um perfil de energia decrescente no sentido do fundo para o topo da coluna. Esta simulação representa de forma aproximada uma unidade concêntrica real onde a seção interna de retificação diminui o diâmetro ao longo da coluna, o análise do diâmetro é feito em relação à área de transferência como se descreve na equação 4.

Finalmente, no caso 3, é simulada uma configuração aproximada de coluna CDIIC om troca de energia em escada, a quantidade de energia decreece no sentido do fundo apra o topo da coluna. Este caso representa de forma aproximada uma configuração da coluna com diminuição em tres passos do diâmetro da seção de retificação.

Na Figura 39, é possível visualizar o perfil de calor apresentado para cada um dos casos de estudo desenvolvidos para o sistema benzeno-tolueno.

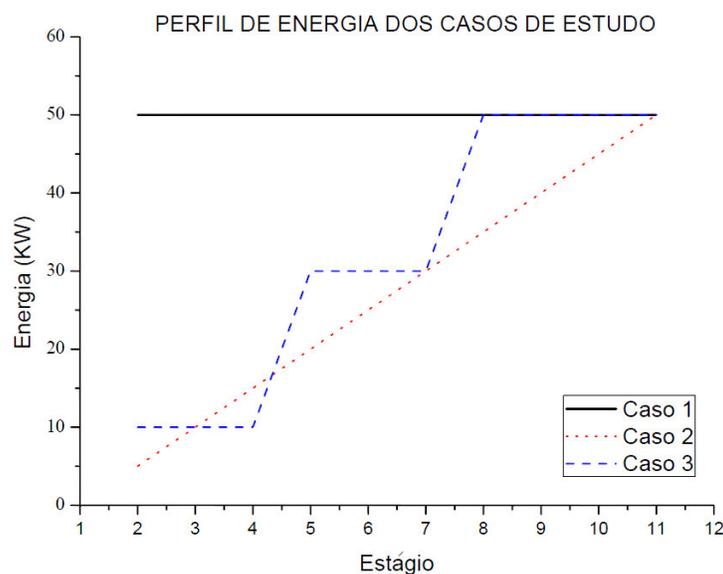


Figura 39. Perfil de Energia dos Casos de Estudo

Podem ser observados os perfis definidos para cada caso de estudo na Figura 39; é importante esclarecer que o perfil do caso 1 representa 40 % do potencial da energia disponível na seção de retificação. Uma vez determinada a quantidade máxima de energia a ser trocada, os casos de estudo 2 e 3 expõem situações onde a quantidade de energia muda descendentemente ao longo da coluna (caso 2) e, no outro, o perfil de energia é diferente em três passos da seção de retificação (caso3), este caso apresenta diminuição significativa da quantidade de energia trocada.

Os casos de estudo desenvolvidos permitiram avaliar três tipos de possibilidades de troca de energia. No caso 1, a troca de energia constante ao longo da coluna permite representar de forma aproximada a troca numa coluna CDIIC concêntrica onde o diâmetro das seções internas é o mesmo ao longo da coluna; no caso 2, o perfil de energia decresce ao longo da coluna (no sentido fundo ao topo) isto representa uma diminuição no diâmetro da seção de retificação em relação à proporcionalidade na área de troca de calor descrita pela equação 4, no caso puntual a diminuição é feita a razão de 5 kJ/kmol ao longo da coluna sendo a anergia máxima trocada de 50 kJ/kmol. O caso 3, da transferencia de energia em escada, apresenta uma simulação aproximada de coluna CDIIC na qual a seção de retificação contém três passos de energia ao longo da colluna. A relação do perfil de energia trocado e o diâmetro da coluna é fundamentada na modelagem da coluna e o fenômeno de transferencia de energia; da equação 4 é possível observar a proporcionalidade da taxa de calor com a área de trasnferencia, por isso, o arranjo interno da coluna é fundamental para o aproveitamento do calor no novo conceito de coluna.

Os resultados obtidos do consumo energetico para os casos de estudo e o projeto de coluna convencional são apresentados na Tabela 10.

Tabela 10. Resultados Casos de Estudo para Mistura Benzeno - Tolueno.

Resultados Sistema Benzeno-Tolueno				
<i>Item</i>	Convencional	CDIIC	CDIIC	CDIIC
		Caso 1	Caso 2	Caso 3
Q Refervedor (kW)	1115,52	982,22	982,12	979,63
Q Condensador (kW)	-920,13	-899,49	-898,25	-887,17
Fração molar de Benzeno Destilado	0,95	0,95	0,95	0,95
Energia isoentrópica do Compressor (kW)	-		64,06	

Pode-se observar que a quantidade de energia requerida pelo refeedor e pelo condensador diminui significativamente na coluna CDIIC em relação ao projeto convencional. Também, se encontrou que para garantir às condições de operação da coluna CDIIC, a energia requerida pelo compressor é a mesma nos três casos.

Em todos os casos simulados a coluna CDIIC apresentou uma diminuição no consumo energético requerido pelo refeedor e pelo condensador em relação ao processo convencional. É importante ressaltar que para os cálculos da energia consumida pela coluna CDIIC foi considerado o consumo do compressor e desta forma o consumo de energia total calculado para as configurações foi comparado com o projeto convencional. Para a coluna convencional se encontrou que a energia requerida para as condições estabelecidas do processo é de 2035,65 kW; para a coluna CDIIC no caso 1 de 1945,77 kW, no caso 2 de 1944,43 kW e no caso 3 de 1930,86 kW.

Pode ser observado que a menor quantidade de energia requerida pelo processo se apresenta no caso 3. Pode ser observado que devido à estratégia de troca de calor a maior quantidade de energia é transferida no fundo da coluna, em consequência a carga requerida pelo refeedor diminui. No topo da coluna, devido a que a uma transferência menor de energia representa uma menor quantidade de energia requerida pelo condensador é requerida para condensar o produto de topo.

5.5.5 Conclusões

Os casos de estudo permitiram o estudo de diferentes perfis de calor, os quais foram focados no estudo da troca de calor por meio de projetos internos de coluna.

No caso do presente trabalho, a área de contato é constante, mas no desenvolvimento do projeto interno de coluna estes efeitos devem ser levados em conta, pois o aproveitamento da energia é função da área e do material usado para o projeto interno da coluna. Em relação aos critérios de alimentação e operabilidade da coluna estabelecidos no início da simulação, é calculada a energia requerida pelos equipamentos, considerando-se as mesmas condições de operação da coluna CDIIC e o projeto convencional. A eficiência do compressor é mantida a mesma para as simulações. O número de estágios usado pela

coluna CDIIC são os mesmos da coluna convencional e, assim, a configuração de coluna CDIIC pode ser comparada com a convencional.

A coluna CDIIC apresenta vantagens na diminuição do consumo de energia em relação ao projeto convencional, mantendo as mesmas condições de operação. Levando-se em consideração as unidades de troca de calor necessárias para que aconteça a separação (compressor, refeedor e condensador), foi encontrada uma diminuição de 4,41 %, 4,48 % e 5,15 % para os casos 1, 2 e 3, respectivamente. Também, o comprimento da coluna pode diminuir até a metade em relação ao projeto convencional.

O fenômeno de transferência de massa no projeto de coluna CDIIC é igual ao apresentado na coluna convencional, devido a que a diferença de pressão entre as duas seções acontece pelo trabalho do compressor e não por trabalho mecânico dentro da coluna. Os calores transferidos entre as duas seções permitem a diminuição da carga requerida pelo refeedor e pelo condensador. É importante ressaltar que a relação de compressão é uma limitação, pois razões elevadas de compressão requerem grande quantidade de energia, isto, conseqüentemente gera gastos elevados na operabilidade do compressor o qual não justifica o desenvolvimento do projeto da coluna.

Numa unidade industrial a aplicação desta configuração representa a diminuição significativa nos custos de operação requerida pelas unidades destiladoras, devido a que estas apresentam um grande consumo nas refinarias, é importante ressaltar que os trabalhos de simulação desenvolvidos não foram otimizados devido a que o foco principal foi a implementação desta configuração de forma fácil no simulador comercial e desta forma desenvolver análises que permitam apresentar a coluna CDIIC com grande possibilidade na diminuição do consumo de energia na indústria.

5.6 Simulação da Coluna CDIIC na Separação da mistura Metanol-Água

Para a análise da configuração de coluna CDIIC é de grande importância conhecer seu comportamento na separação de diferentes classes de componentes, por esta razão, foi estudada a separação do sistema metanol-água, visando a análise da coluna na separação de componentes químicos. A pressão de operação na seção de esgotamento e na seção de

retificação é de 0,1013 MPa e 0,2022 MPa, respectivamente. Estas pressões são mantidas iguais como no estudo da mistura benzeno-tolueno.

A inserção dos componentes no simulador foi feita como tipo convencional, a partir desta especificação o simulador realiza a estimativa das propriedades dos compostos, a forma de inserção é apresentada na Tabela 11.

Tabela 11. Categoria dos Componentes da Mistura 2 no Simulador

Componente	Nome no Simulador	Categoria	Tipo	Fórmula
Metanol	Methanol	Composto Químico	Convencional	CH ₄ O
Água	Water	Substância Química	Convencional	H ₂ O

A partir dos estudos desenvolvidos para a mistura benzeno-tolueno, foram realizadas várias simulações que permitiram conhecer o comportamento da coluna CDIIC, estes estudos foram realizados variando o número de estágios, vazão de refluxo e vazão do refeedor, além da realização com diferentes quantidades de energia que permitiram encontrar a convergência da coluna.

Verificou-se que não é possível aumentar a vazão de refluxo da coluna, pois pequenas alterações faziam com que a coluna não encontrasse a convergência.

Das simulações desenvolvidas se encontrou que à medida que a temperatura de alimentação da mistura aumenta, razões de refluxo baixas permitem a operação do sistema; a quantidade de energia requerida pelo compressor para uma relação de compressão de 1:2 foi a mesma requerida pelo sistema benzeno-tolueno.

Do estudo termodinâmico desenvolvido para a mistura 2 no item 5.4; encontrou-se que o modelo NRTL permite o cálculo das propriedades dos componentes por meio do simulador.

Os parâmetros do processo usados no simulador são especificados na Tabela 12.

O cálculo da quantidade de energia foi realizado a partir da diferença de entalpias no fundo da seção de retificação, sendo assim, o máximo valor de entalpia para as fases líquida e vapor desta seção de 277915,6 kJ/kmol e 234460,4 kJ/kmol, respectivamente.

Tabela 12. Parâmetros da Simulação do Sistema Metanol-Água

Ítem	Columna Convencional	CDIIC
Número de pratos	26	13/13
Pressão de Retificação (MPa)	0,1013	0,2026
Pressão de Esgotamento (MPa)	0,1013	0,1013
Vazão de Alimentação (kmol/h)	100	100
Composição de etanol na Alimentação (Fração molar)	0,5	0,5
Prato de alimentação	11	13-Retificação, 1-Esgotamento
Eficiência do Compressor		0,8

Na Tabela 13 são apresentadas as especificações simuladas para a mistura 2. A numeração dos estágios é crescente no sentido do fundo.

Tabela 13. Especificações do Processo Simulado para a Mistura 2

Coluna CDIIC	
Queda de Pressão (MPa)	0
Vazão do refeedor (Esgotamento em base molar)	5
Vazão de refluxo (Retificação em base molar)	3
Tipo de refeedor (Esgotamento)	<i>kettle</i>
Tipo de Condensador (Retificação)	total
Tipo de Compressor	Isoentrópico
Coluna Convencional	
Queda de Pressão (MPa)	0
Posição de alimentação	11
Vazão do refeedor (Base molar)	5
Vazão de refluxo (Base molar)	3
Tipo de refeedor	<i>Kettle</i>
Tipo de condensador	Total

Diferentes simulações foram desenvolvidas partindo da informação de energia obtida da entalpia calculada no simulador e da equação 12. Diferentes simulações foram desenvolvidas modificando a energia trocada ao longo da coluna; se encontrou que para as condições estabelecidas, valores de energia superiores a 500 kJ/kmol não permitem a convergência do sistema. Para garantir a convergência, foi trocado esta quantidade de energia ao longo da coluna, estágio a estágio, mediante correntes de calor.

O processo é comparado com uma unidade convencional, encontrando que a coluna CDIIC consegue separar a mistura com uma menor quantidade de energia comparada com a convencional. Nas Figuras 40 e 41 são apresentados os perfis de temperatura e os perfis de fluxo do vapor para as duas colunas.

Como a coluna CDIIC têm a alimentação no topo da seção de retificação, a temperatura no estágio 1 (topo) é maior na coluna CDIIC (97,34 °C) em relação à convencional (65,16 °C). Este efeito acontece devido a que neste estágio da coluna CDIIC a alimentação e o refluxo aquecido da seção de retificação entram neste estágio, consequentemente na coluna convencional a alimentação é feita no estágio 5; em consequência o topo da coluna possui uma temperatura menor em relação ao fundo (98,49 °C).

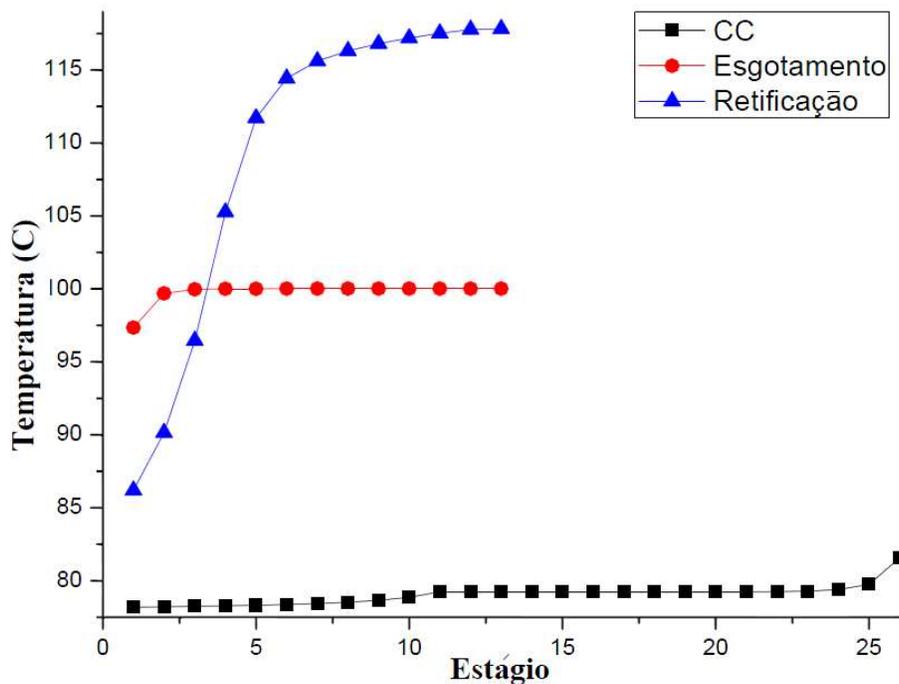


Figura 40. Perfil Temperatura das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 2.

Da Figura 40, pode-se observar que o perfil da seção de esgotamento e o perfil da coluna convencional (CC) apresentam um comportamento semelhante, onde ao longo da coluna não se experimentam variações de temperatura significativas. A diferença de temperatura encontrada ao longo da coluna convencional é de 3,36 °C e para a seção de esgotamento é de 2,67 °C, desta forma, o perfil de temperatura nas duas unidades é quase constante, não entanto, para a seção de retificação a diferença de temperatura ao longo da seção é de 31,66 °C.

A coluna convencional apresenta perfis de temperatura mais baixos em relação com a coluna CDIIC, e no prato de alimentação apresenta um aumento considerável da temperatura em relação ao comportamento do perfil; apesar de que as condições de alimentação do processo sejam as mesmas, a coluna CDIIC apresenta perfis de temperatura maiores em relação com a convencional, isto é devido à dinâmica do processo e a troca de energia entre as seções.

Também é possível observar que nos primeiros estágios (Temperaturas menores a 98 °C) o potencial de troca de energia é invertido, da seção de esgotamento para a seção de retificação; esta energia transferida da seção de esgotamento para a seção de retificação diminui a quantidade de energia requerida pelo condensador.

Este fenômeno, também foi observado no caso de estudo 3 da mistura benzeno-tolueno, onde a configuração em escada, diminui a troca de energia em relação à seção de esgotamento ao longo da configuração, esta configuração apresenta menor consumo de energia para a operação.

Em todos os casos, o perfil de temperatura na coluna CDIIC pode ser manipulado com uma razão de compressão maior, tendo como critério, que a quantidade de energia requerida pelo sistema, mais o trabalho do compressor, não deve ser maior à energia usada na coluna convencional para a separação (refervedor, condensador).

O comportamento do fluxo de vapor nas colunas é apresentado seguidamente.

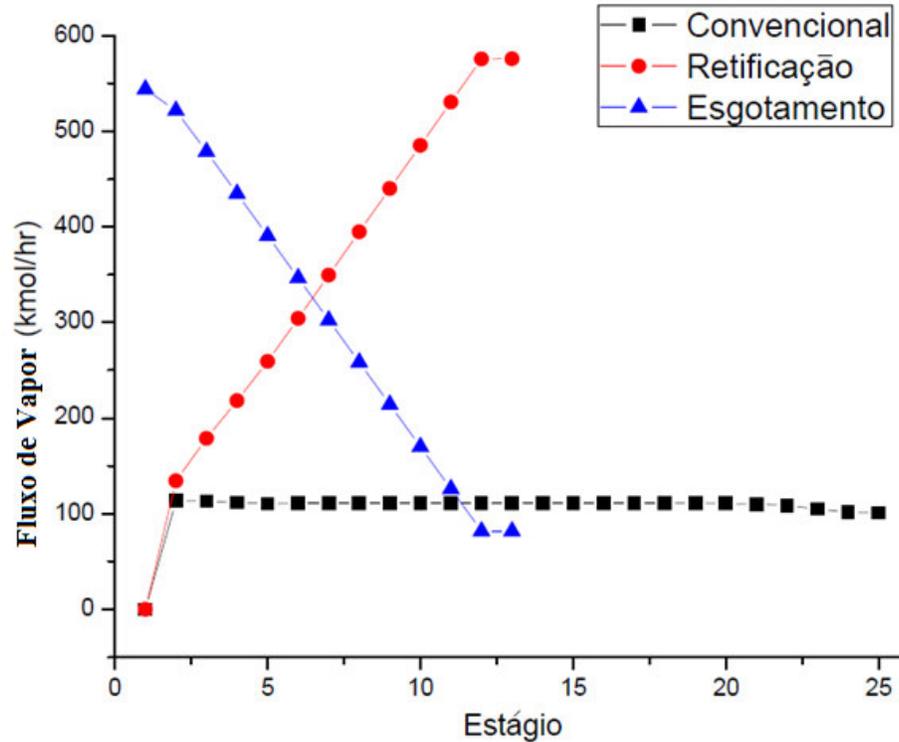


Figura 41. Perfil de Fluxo de vapor das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 2.

Os perfis do fluxo de vapor foram estudados devido ao comportamento dos perfis de temperatura para as seções da coluna CDIIC e a coluna convencional. Os fluxos de vapor apresentam o comportamento esperado em relação aos perfis de calor; na coluna convencional o fluxo de vapor aumenta gradualmente ao longo da coluna sendo maior no topo da torre (por efeitos de simulação o estágio 1 representa o condensador).

Na coluna CDIIC se encontrou que o fluxo de vapor apresenta mudanças maiores em relação ao projeto convencional; isto gera maior movimento dos componentes nos estágios. Conseqüentemente, devido à compressão a maior quantidade de fluxo de vapor se encontra no prato 10 da seção de retificação como se pode observar na Figura 41.

É notório que o fluxo de vapor na coluna convencional não apresenta grandes modificações ao longo da coluna; este fenômeno não é igual na coluna CDIIC devido ao arranjo interno e a troca de energia em cada estágio, assim, o fluxo de vapor é maior e

depende da energia trocada no estágio, à troca térmica gera uma evaporação do líquido presente no estágio o que ocasiona fluxos maiores.

Um estudo fluidodinâmico do comportamento da mistura é importante para o projeto da coluna, desta forma pode ser estudado o possível arraste do líquido por altos fluxos de vapor e as condições da hidráulica do prato que poderiam diminuir possíveis problemas de arraste.

5.6.1 Resultados e Conclusões

A separação na coluna CDIIC da mistura 2 é possível nas mesmas condições de operação da convencional; no topo da seção de retificação o componente água alcança uma melhor separação no fundo da seção de esgotamento da coluna CDIIC saindo puro, enquanto o metanol no topo é de 98 % (fração molar), na mesma concentração obtida pela separação realizada na coluna convencional de 98 % (fração molar).

O estudo do presente sistema mostrou que é possível separar a mistura metanol –água por meio da coluna CDIIC, e consegue obter separações altamente eficientes, com uma menor quantidade de energia.

Os perfis de composição são apresentados na Figura 42, seguidamente. Neste, foi encontrado que a coluna CDIIC permite a separação dos componentes com as mesmas condições de operação diminuindo a quantidade de energia requerida em relação à coluna convencional.

Também é possível observar que no caso real a coluna CDIIC conseguiria fazer a separação com um projeto de coluna com a metade da altura do projeto convencional, isto devido a que a altura máxima da coluna é de 13 estágios, enquanto a coluna convencional é de 26. Na coluna CDIIC, o componente mais volátil (metanol) se encontra em maior concentração na seção de retificação e o componente menos volátil (água), se encontra em maior concentração na seção de esgotamento.

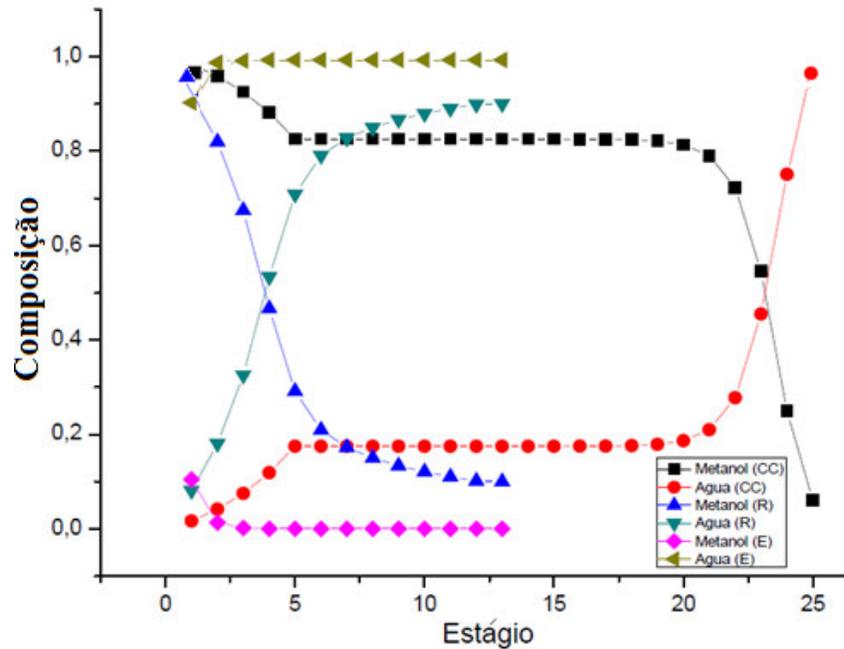


Figura 42. Perfil de Composição (fração molar) na Fase Vapor das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 2.

Os perfis de composição foram especificados como (CC) para a coluna convencional, (E) para a seção de esgotamento e (R) para a seção de retificação. A simulação corroborou que a coluna separa misturas químicas e misturas de hidrocarbonetos, permitindo a troca de energia e, assim, diminuir a quantidade energética requerida pelo refeedor e pelo condensador devido ao arranjo da coluna.

Os resultados obtidos para o sistema 2 são apresentados na Tabela 14; nesta se inclui a energia requerida pelo compressor, por o condensador e por o refeedor da coluna CDIIC e a energia requerida pelo compressor e pelo refeedor para o projeto de coluna convencional.

Tabela 14. Resultados Sistema Metanol - Água.

Item	Convencional	CDIIC
QRefeedor (kW)	1158,29	928,28
QCondensador (kW)	-1323,24	-998,25
Fração molar de Etanol no Destilado	0,98	0,98
Energia Isoentrópica do Compressor (kW)	-	369,8

Na coluna convencional foi encontrado que a separação da mistura experimenta um crescimento maior nos estágios superiores ao prato 5, para o componente metanol, enquanto, o perfil apresentado pelo componente metanol na seção de retificação, apresenta um crescimento progressivo ao longo da seção; nos dois casos foi encontrado uma concentração de metanol de 98 % em fração molar. O componente água foi separado numa composição de 98% para as duas colunas; foi observado que o perfil de composição apresentado para a coluna convencional não apresenta mudanças significativas nos estágios intermediários, nos estágios 1 ao 5 um aumento da composição até o 20% em base molar, no fundo da coluna se encontra a maior composição, apresentando se um aumento da composição nos estágios 22 ao 26. Na coluna CDIIC o perfil apresenta um aumento da composição no estágio 3 no qual se encontra a concentração de produto de fundo.

Pode-se concluir que a quantidade de energia requerida pelo refulvador e pelo condensador diminui significativamente na coluna CDIIC em relação ao projeto convencional. Também, se encontrou que para garantir as condições de operação da coluna a energia requerida pelo compressor aumentou para o sistema 2, sendo de 369,8 kW e 462,2 cavalos de potência, mais ainda, a coluna apresenta uma diminuição energética de 7,5 % com respeito ao projeto de coluna convencional. Outro estudo da mistura metanol-água foi apresentado por León et al. [95] encontrando a coluna CDIIC com grande potencial na diminuição do consumo de energia.

Estudos de fluidodinâmica são necessários para determinar o comportamento dos fluxos de vapor e avaliar possíveis arrastres do líquido presente na coluna. A coluna CDIIC permite a separação da mistura metanol-água e diminui o consumo de energia em relação ao projeto convencional, isto acontece, devido à troca de energia entre as seções da configuração de coluna CDIIC.

5.7 Simulação da Coluna CDIIC na Separação do Sistema Etanol-Água

Baseado nas experiências obtidas para os sistemas binários apresentados anteriormente, foram desenvolvidas simulações para a mistura etanol-água a qual é de grande interesse para a indústria alcooleira do Brasil.

A inserção dos componentes no simulador foi feita como tipo convencional esta é apresentada na Tabela 15, a partir das quais o simulador realiza a estimativa das propriedades dos compostos.

Tabela 15. Categoria dos Componentes da Mistura 3 no simulador.

Componente	Nome no Simulador	Categoria	Tipo	Fórmula
Etanol	Ethanol	Composto Químico	Convencional	C ₂ H ₆ O-2
Água	Water	Substância Química	Convencional	H ₂ O

Dos estudos realizados no item 5.4, se encontrou que o sistema apresenta azeótropo nas condições de 1atm, sendo de 0,895 fração molar de etanol.

O processo consiste na separação do sistema por meio de um arranjo à coluna convencional. Este arranjo inclui duas seções (uma de retificação e outra de esgotamento) que compõem o conceito de coluna CDIIC; para a operação da unidade é incluído um compressor e uma válvula para manter as condições de operação.

O estudo foi desenvolvido no estado estacionário, fazendo uso do modelo termodinâmico NRTL para a resolução dos cálculos da coluna e interação dos componentes nas colunas CDIIC e convencional. A corrente de alimentação é introduzida a 70 °C e uma pressão de 0,1023 MPa para as duas colunas, a composição em fração molar é estabelecida de forma equimolar. Os parâmetros descritos na Tabela 16 foram usados para o desenvolvimento das simulações.

Tabela 16. Parâmetros da Simulação Sistema Etanol - Água

Ítem	Columna Convencional	CDIIC
Número de pratos	36	13/13
Pressão de Retificação (MPa)	0,1013	0,2012
Pressão de Esgotamento (MPa)	0,1013	0,1013
Vazão de Alimentação (kmol/h)	100	100
Composição etanol na Alimentação (Fração molar)	0,5	0,5
Prato de alimentação	20	13-Retificação, 1-Esgotamento
Eficiência do Compressor	-	0,8

Na simulação, o estágio n da seção de esgotamento é o refervedor e o estágio 1 da seção de retificação é o condensador.

A quantidade de energia requerida pelo compressor para uma relação de compressão de 1:2 entre as seções de esgotamento e retificação, respectivamente, foi calculada pelo meio do simulador, este usa curvas de desempenho em relação às condições de operação estabelecidas para a unidade.

Na Tabela 17 são apresentadas as especificações da coluna convencional e da coluna CDIIC para a simulação. A numeração dos estágios é crescente no sentido do fundo.

Tabela 17. Especificações do Processo Simulado para a Mistura 3

Coluna CDIIC	
Queda de Pressão(MPa)	0
Vazão do refervedor (Esgotamento em base molar)	3
Vazão de Refluxo (Retificação em base molar)	2,3
Tipo de refervedor(Esgotamento)	<i>kettle</i>
Tipo de Condensador (Retificação)	total
Tipo de Compressor	Isoentrópico
Coluna Convencional	
Queda de Pressão (MPa)	0
Posição de alimentação	Acima do prato
Vazão de refervedor (Base molar)	3
Vazão de Refluxo (Base molar)	2,3
Tipo de refervedor	<i>Kettle</i>
Tipo de condesador	Total

O processo de destilação convencional foi simulado por meio do mesmo método termodinâmico determinado para a coluna CDIIC.

Verificou-se que não é possível diminuir a vazão de refluxo de vapor na etapa final em relação ao líquido que volta ao fundo da seção; isto levou a que a simulação não encontrasse a convergência. Das simulações desenvolvidas se encontrou que à medida que a temperatura de alimentação da mistura aumenta, o sistema opera com razões de refluxo baixas. Também, razões de refluxo em base molar maiores a 2,5, às mesmas condições de operação levam a que a coluna convencional não encontre a convergência.

A quantidade de energia transferida da seção de retificação para a seção de esgotamento é dada em forma de escada devido aos resultados obtidos das simulações dos casos anteriores, neste, foi observado que o arranjo apresenta maior potencial de diminuição do consumo de energia.

Para a simulação, foi transferida como máxima quantidade de energia, a mínima energia disponível na seção de retificação, esta quantidade de energia representa o 100% da energia trocada nos estágios do fundo da seção de retificação; esta foi calculada a partir do perfil de entalpia pelo meio da equação 12.

Diferentes simulações foram feitas para avaliar a máxima quantidade de calor possível para trocar mudando a quantidade de energia transferida. Desta forma, a máxima quantidade de energia trocada é de 145 kJ/kmol nos estágios do fundo da coluna, valores superiores induz à não convergência da simulação; nos estágios intermediários é trocado 60kJ/kmol e 15 kJ/kmol nos estágios superiores da coluna.

É importante ressaltar que para o estudo, são usadas interconexões térmicas estágio a estágio ao longo da coluna e a quantidade de energia trocada é menor que a quantidade total disponível, de modo a evitar inconsistências termodinâmicas que não permitam a convergência da coluna.

Os perfis de temperatura para o sistema são apresentados na Figura 43 a seguir.

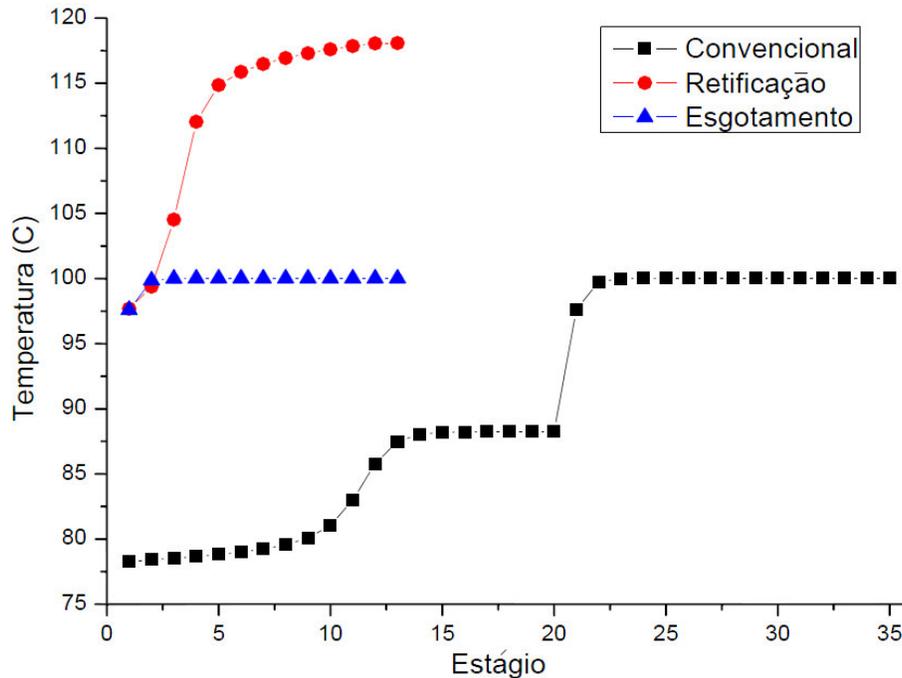


Figura 43. Perfil de Temperatura das Colunas CDIIC e Convencional do Sistema 3.

Do gráfico é possível observar que na coluna convencional o perfil de calor apresenta uma perturbação significativa no estágio 20, isto é devido a que a alimentação desta coluna acontece neste estágio. O perfil do calor encontra o maior valor de temperatura no estágio 36 de 100,02 °C a uma pressão de 0,1013 MPa para a coluna convencional e de 118,67°C no fundo da seção de retificação. Na Coluna CDIIC apresenta similaridade de temperatura nos primeiros estágios da seção de esgotamento em comparação com a convencional; isto devido a que os primeiros estágios se encontram localizados no topo da seção de esgotamento onde o perfil de temperatura diminui devido à troca de energia do processo. Para os estágios localizados no fundo da coluna CDIIC, é possível observar o potencial de troca de energia disposta nas seções.

O perfil de composição em base molar do vapor é apresentado na Figura 44.

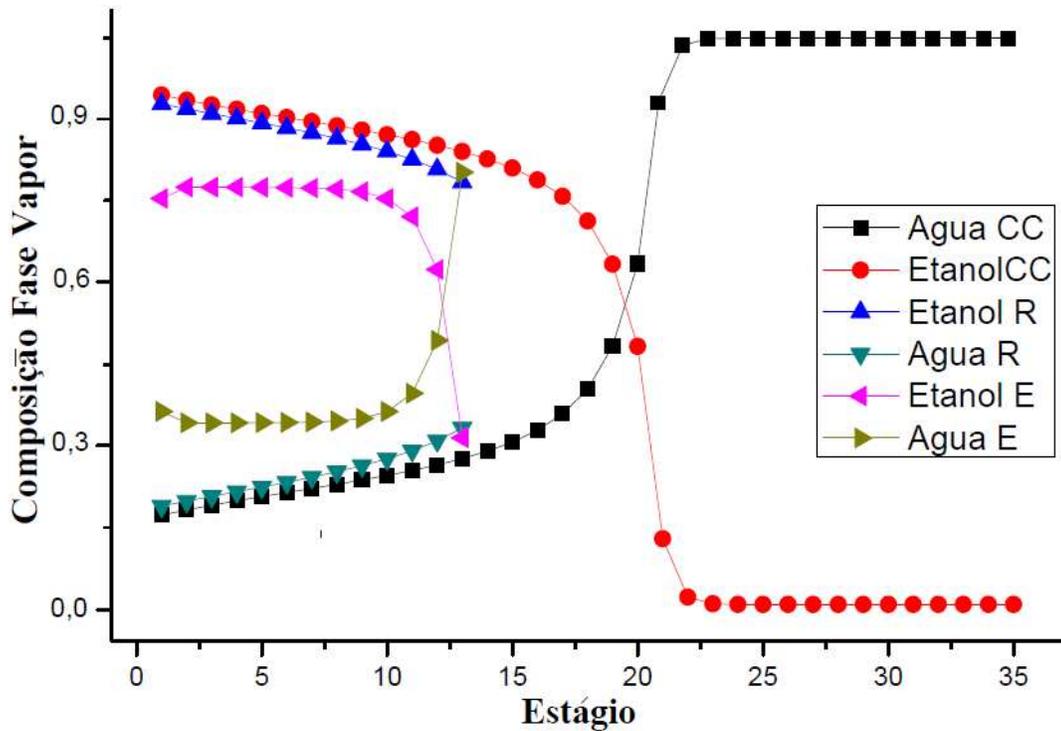


Figura 44. Perfil de Composição na fase Vapor das Colunas CDIIC e Convencional para o Sistema 3.

Para o entendimento dos perfis de composição foi especificado (CC) para a coluna convencional, (E) para a seção de esgotamento e (R) para a seção de retificação. A coluna convencional apresenta composições de etanol de 0,93 em base molar na fase vapor para a coluna convencional e de 0,91 para a coluna CDIIC. Este resultado concorda com a análise realizada para a mistura, onde a separação convencional da mistura por destilação está limitada devido à presença do azeótropo.

Da Figura 43 foi observado o potencial de troca de energia entre as duas seções, assim, a coluna CDIIC apresenta a possibilidade de diminuir a quantidade energia usada no processo. No entanto, foi observado que a separação do componente pesado (Água) apresenta um melhor comportamento na coluna convencional.

Pode-se observar que o perfil de composição para a água na coluna convencional apresenta uma separação de 0,99 em base molar, enquanto na coluna CDIIC para as mesmas condições é de 0,78 em base molar. Desta forma foi observado que o efeito do

azeótropo e a configuração da coluna CDIIC apresentam influência no processo de separação.

Devido ao comportamento da mistura na coluna CDIIC, uma análise do comportamento do azeótropo nas seções de esgotamento e retificação as quais trabalham a 0,1012 MPa (1 atm) e 0,2012 MPa (2 atm), respectivamente. O comportamento da mistura é apresentado na Figura 45 a seguir.

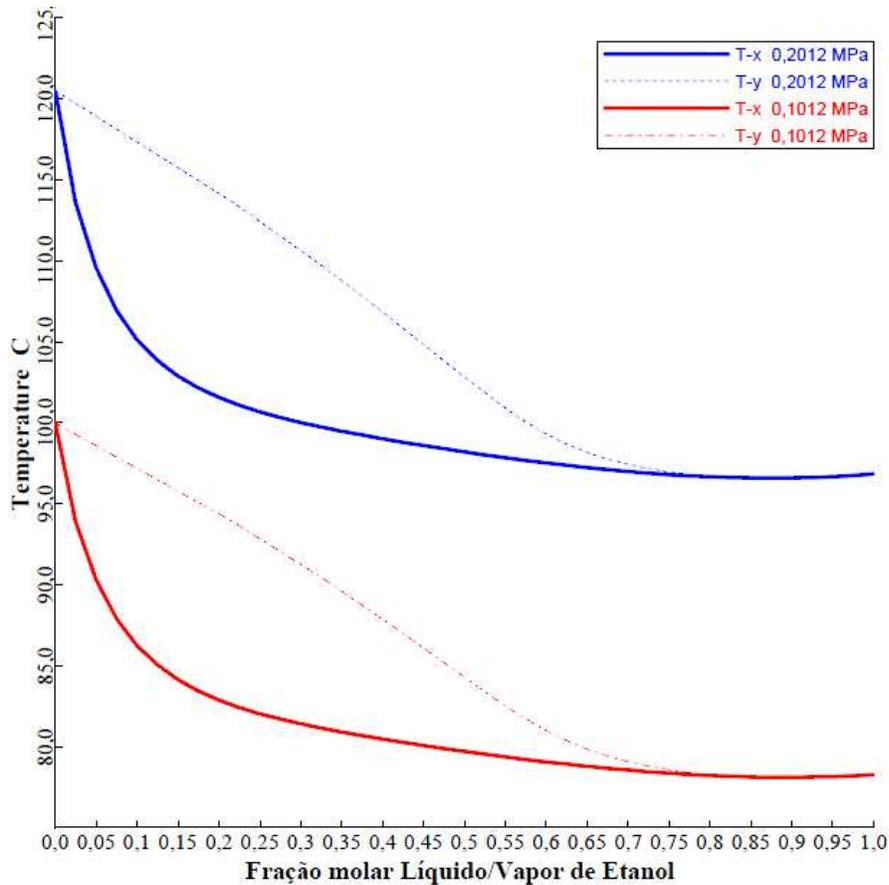


Figura 45. Fração molar do Sistema 3 a 0,1012 MPa e 0,2012 MPa.

Na Figura 45, é possível observar que a diferença de pressão a qual é maior na seção de retificação comparada com a seção de esgotamento numa relação 1:2 para a coluna CDIIC desfavorece a separação da mistura 3. Devido ao ponto azeotrópico, o sistema etanol-água apresenta condições limites para a obtenção dos produtos refinados, na temperatura de

78,15 °C é possível obter o etanol a 0,9562 em base mássica para 1 atm de pressão e 0,9475 em base mássica de etanol para uma temperatura de 96,79 °C e 2 atm de pressão. Esta análise foi realizada fazendo uso da ferramenta *Aspen Split Analysis* como é apresentado na Figura 46.

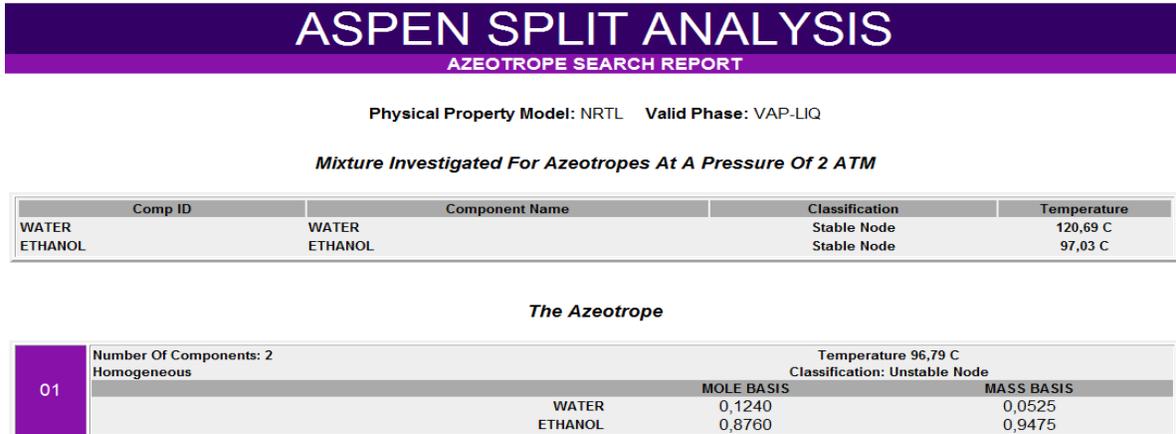


Figura 46. Análise do Azeótropo da Mistura Etanol - Água (2 atm). (Aspen Plus, V7.2)

Desta forma, foi observado que com o aumento da pressão o azeótropo é encontrado numa temperatura maior e a concentrações menores. Uma análise da tendência do azeótropo em relação à pressão foi realizada a partir da ferramenta *Aspen Split Analysis* para diferentes pressões. Esta ferramenta permite localizar azeótropos homogêneos e heterogêneos presentes em misturas multicomponentes, esta permite realizar a análise pelo meio da base de dados *Aspen Distillation Synthesis*, a qual permite estudar o comportamento da mistura a partir das especificações do modelo termodinâmico e dos componentes puros da mistura.

Os resultados obtidos para a mistura 3 a diferentes pressões indicam que a menores pressões é possível encontrar uma maior concentração de etanol. Desta forma um aumento da pressão de operação na unidade destiladora diminui o potencial de separação da mistura, estes estudos são apresentados na Tabela 18.

Tabela 18. Comportamento do Azeótropo a Diferentes Pressões da Mistura Etanol - Água.

Pressão (atm)	Temperatura (°C)	Fração molar de Etanol	Fração Mássica de Etanol
0,1	29,29	0,9471	0,9786
0,5	61,58	0,9123	0,9638
1	78,15	0,8952	0,9562
2	96,79	0,8760	0,9475
3	108,82	0,8634	0,9417

5.7.1 Comentários e Conclusões

Os estudos desenvolvidos mostraram que o azeótropo do sistema etanol-água é afetado diretamente por o aumento de pressão experimentado pela mistura, da seção de esgotamento para a seção de retificação, movendo o azeótropo para a esquerda da Figura de fração molar vs temperatura o qual dificulta a separação.

O processo pode ser melhorado em termos de separação por uma unidade que trabalhe a uma menor pressão a qual mude o azeótropo para a direita, isto, em consequência, permite a obtenção dos componentes numa concentração maior, este efeito foi observado na Tabela 18 onde a pressões menores à atmosférica, as frações molares e mássicas aumentam devido ao movimento do ponto azeotrópico.

Em termos energéticos a coluna CDIIC consegue separa a mistura etanol-água e apresenta grande potencial na diminuição do consumo energético requerido pelo processo comparado como o convencional.

O calor do refeedor e do condensador é calculado por meio do simulador da mesma da mesma forma que nas simulações anteriores; o simulador, pelo meio das equações de

balanço de massa e energia descritas para a coluna no *model library RadFrac* e as especificações fixadas, calcula os dados das colunas de destilação.

Os resultados obtidos para as especificações do processo são apresentados na Tabela 19 a seguir.

Tabela 19. Resultados das Simulações Mistura Etanol - Água.

Item	Coluna Convencional	CDIIC
Q Refervedor (kW)	1834,63	1670,81
Q Condensador (kW)	-1846,32	-1761,09
Fração molar de Etanol no Destilado	0,93	0,91
Energia Isoentrópica requerida pelo Compressor (kW)	-	128,23

O calor do refeedor e do condensador é calculado por meio do simulador da mesma da mesma forma que nas simulações anteriores; o simulador, pelo meio das equações de balanço de massa e energia descritas para a coluna no *model library RadFrac* e as especificações fixadas, calcula os dados das colunas de destilação.

No caso da seção de esgotamento o simulador faz zero o cálculo do condensador e no caso da seção de retificação o simulador faz zero o refeedor, desta forma as duas unidades operam com um refeedor, um condensador e na coluna CDIIC com um compressor a mais.

Para o cálculo dos perfis de temperatura e quantidade de energia requerida pelas colunas, foram trabalhadas as mesmas condições de alimentação, tanto em termos de temperatura, vazão de refluxo (é a relação entre a taxa de refluxo que entra no topo da coluna e a taxa de destilado) e vazão de refeedor (é a relação entre a taxa do refeedor que entra no fundo da coluna e taxa do produto de fundo).

Desta forma, são mantidas as mesmas condições de operação da coluna e parâmetros de projeto como: o número de estágios, alimentação sobre o prato, prato de alimentação intermeio para o projeto convencional e alimentação nos pratos de topo da seção de

esgotamento e no fundo da seção de retificação para a coluna CDIIC, assim, resultados da quantidade de energia requerida para a operação nas mesmas condições são obtidos.

Pode-se observar nos resultados da Tabela 19 que a coluna CDIIC apresenta uma separação muito próxima à convencional, sendo que a coluna convencional logra separar de forma mais eficiente a mistura 3, foi estudado o efeito da pressão para o azeótropo encontrando se que um aumento da pressão faz que a separação da mistura etanol-água seja obtida a concentrações menores.

Observou-se que a coluna CDIIC apresenta diminuição na energia requerida pelo refeedor e pelo condensador comparado com o processo convencional, no caso da coluna CDIIC a quantidade de energia requerida para o processo é de 3560,19 kW incluindo a energia requerida pelo compressor e 3680,95 kW para a coluna convencional, encontrando-se uma diminuição de 3,28 % em relação à coluna convencional.

Também, foi encontrado que devido ao azeótropo, a configuração de coluna CDIIC no seu conceito de troca de calor, permite a separação da mistura etanol-água e diminui o consumo energético em comparação com a configuração convencional, embora a diferença de pressão entre as seções da coluna CDIIC muda o ponto azeotrópico para a esquerda encontrando os componentes numa concentração menor em comparação com a coluna convencional.

Desta forma, a coluna CDIIC, consegue diminuir o consumo de energia na separação da mistura 3. A transferência de energia de uma seção para a outra permite a diminuição da carga requerida pelo refeedor e pelo condensador e a energia requerida pelo compressor não sobre passa à quantidade de energia requerida no projeto de coluna convencional.

A energia requerida pelo compressor foi calculada para as condições do processo simuladas, encontrando que requer de 160 kW de potencia para comprimir o vapor até uma pressão de descarga de 0,2012 MPa, a quantidade de energia isentrópica requerida pelo compressor é de 128,23 kW, isto permite garantir as condições de operação sem sobre passar o consumo de energia total do processo em relação ao convencional.

Os resultados obtidos pelo meio do simulador para a coluna convencional, as seções da coluna CDIIC e o compressor às condições de operação estabelecidas são apresentadas a seguir na Tabela 20.

Tabela 20. Resultados da Mistura Etanol - Água.

CC	
Taxa de destilado (kmol/hr)	48,12
Taxa de refluxo (kmol/hr)	110,68
Vazão de refluxo	2,3
Taxa de produto de fundo [Bottom] (kmol/hr)	51,88
Taxa de refeedor [Boilup] (kmol/hr)	155,64
Compressor	
Calor Desenvolvido (kJ/kg)	56,8
Vazão de entrada da capacidade de calor	1,16
Taxa de fluxo volumetrico (l/hr)	entrada 6342126,96 saida 3568616,07
Temperatura de saida (°C)	120,85
Isoentropic outlet temperatura (°C)	112,8
Retificação	
Taxa de destilado (kmol/hr)	50,57
Taxa de refluxo (kmol/hr)	116,3
Taxa de produto de fundo (kmol/hr)	168,62
Taxa de refeedor (kmol/hr)	228,35
Esgotamento	
Taxa de destilado (kmol/hr)	219,19
Taxa de refluxo (kmol/hr)	103,22
Taxa de produto de fundo [Bottom] (kmol/hr)	49,43
Taxa de refeedor [Boilup] (kmol/hr)	148,28

Na Tabela 20 são apresentados as variáveis obtidas a partir dos parâmetros fixados na simulação para a coluna convencional e a coluna CDIIC. Nesta é possível observar que nas mesmas condições de alimentação e parâmetros estabelecidos do projeto de coluna, a taxa de destilado na coluna convencional é obtida quase às mesmas condições que a seção de retificação da coluna CDIIC, mais, a seção de esgotamento apresenta taxas maiores devido a que todo o produto de topo em forma de vapor é comprimido e alimentado à seção de retificação. Foi observado que a coluna convencional não alcança a convergência a vazões de refluxo maiores a 2,3 enquanto a CDIIC consegue operar a vazões maiores a 4. O compressor consegue atingir a compressão estabelecida e conseqüentemente eleva a temperatura do vapor até 120,85 °C, isto permite que a seção de retificação opere a perfis de temperatura maiores e desta forma troque calor com a seção de esgotamento.

5.8 Conclusões do Capítulo

A literatura apresenta estudos detalhados sobre a coluna CDIIC, mas não reporta dados experimentais para a validação de estudos de simulação; esta necessidade limita o desenvolvimento dos estudos de eficiência devido à falta de informação da configuração numa unidade suficientemente grande.

Baseando-se nos estudos apresentados na literatura aberta, a presente dissertação desenvolveu estudos de simulação e avaliação do conceito de coluna CDIIC para sua implementação no simulador de processos Aspen Plus V7.2. Descreveu um procedimento para a simulação deste tipo de colunas de forma aproximada no simulador, devido a que este não contém a coluna como operação unitária; o procedimento é descrito no item 5.2. Um estudo regoroso da operabilidade da coluna CDIIC estabelecendo os parâmetros e fatores a levar em consideração para o projeto de coluna foram desenvolvidos; estes foram aplicados para a simulação da configuração da coluna no simulador.

A configuração de coluna CDIIC em todos os casos estudados nesta dissertação, apresentou diminuição do consumo de energia em relação ao projeto de coluna convencional, em particular na separação do sistema etanol-água a configuração em escada apresenta uma diminuição de 3,28 % da energia em comparação com a convencional, esta separação foi encontrada uma menor quantidade de estágios da coluna CDIIC em relação com a convencional. É importante ressaltar que esta diminuição da energia inlue o requerimento energético requerido pelo compressor na coluna CDIIC.

Os parâmetros estabelecidos para a simulação permitiram observar a viabilidade da coluna CDIIC, sua possível simulação aproximada no simulador Aspen Plus V 7.2 e o potencial da coluna na diminuição do consumo energético com respeito à coluna convencional.

Foi encontrando nas simulações desenvolvidas a diminuição da carga energetica mais especificamente no refeedor em comparação com a coluna convencional, isto devido ao arranjo que aproveita o calor da seção de retificação para aquecer a seção de esgotamento.

Os estudos de simulação apresentaram perfis de fluxo da coluna altos o qual faz da coluna uma unidade muito ativa (vazões de fluxo de líquido e vapor no prato). Este ponto

deve ser tratado com maior profundidade, devido a que aplicações numa escala industrial os efeitos fluidodinâmicos devem ser aprimorados para um melhor controle da operação.

Conclui-se que é possível representar a configuração no simulador para sistemas ideais da configuração, mas no caso de projetar a coluna para a construção, uma modelagem matemática rigorosa é necessária. Esta permitirá determinar de forma mais específica os diferentes fenômenos que ocorrem no sistema, em especial o de transferência de energia entre as duas seções. A modelagem matemática deverá incluir os parâmetros determinísticos como a área de contato, o coeficiente global de calor e a hidráulica do prato que permitam a avaliação do projeto de simulação com uma unidade real.

No caso ideal, onde os trabalhos sejam focalizados a uma estimativa ou estudo da influência de parâmetros na configuração da coluna CDIIC, no caso do presente trabalho, a simulação aproximada de coluna CDIIC para misturas químicas e de hidrocarbonetos no simulador Aspen Plus V 7,2 criando estratégias de simulação que permite a representação da troca de calor e arranjo interno entre as seções da coluna CDIIC.

Os estudos de simulação foram divididos em tres sistemas: o sistema 1 para a mistura benzeno-tolueno, o sistema 2 para a mistura metanol-água e o sistema 3 para a mistura etanol-água. Assim, o sistema 1, foi subdividido em três casos que permitiram estudar possíveis arranjos internos de coluna; no caso 1, se estudou a transferência de energia por meio de um perfil constante de energia; no caso 2, foi estudado um perfil de temperatura decrescente ao longo da coluna e no caso 3, foi estudada a transferência em escada ao longo da coluna encontrando uma diminuição do 3,72%, 3,70% e 4,41 % respectivamente para cada caso em comparação ao projeto de coluna convencional.

O sistema 2 foi estudado para condições de equilíbrio e mantendo os parâmetros de compressão; foi obtida uma diminuição de 7,5 % da energia consumida no processo em relação ao processo convencional para as condições estabelecidas. Também se determinou que a coluna CDIIC consegue separar a mistura de metanol-água com menor quantidade de estágios.

Finalmente, no sistema 3, foi estudada a mistura etanol-água considerando as mesmas condições de operação e alimentando de forma equimolar. Encontrou-se que a coluna CDIIC diminui 3,28 % a quantidade de energia requerida pelo processo em relação à

convencional. Desta forma a coluna CDIIC se apresenta como uma configuração promissória para a diminuição do consumo de energia em processos de destilação.

5.9 Estudo da Eficiência de Pratos

Partindo dos estudos apresentados pela literatura foi estudada a eficiência de pratos para os sistemas envolvidos. Todas as simulações foram baseadas numa simulação padrão, esta foi validada através de resultados apresentados por grupos de pesquisa japoneses e holandeses [27, 83, 48, 84, 85]. Desta forma, uma análise dos dados simulados foi desenvolvida para o cálculo da eficiência de pratos fazendo uso do conceito de eficiência de Murphree e de eficiência global de prato.

A eficiência de pratos foi calculada por meio do conceito de eficiência global de prato apresentado na equação 26. Os resultados são apresentados a seguir:

- Sistema 1 (benzeno-tolueno): Caso 1, 2, 3; para a simulação foi estabelecida uma coluna de 26 estágios nos quais se conseguiu separar o sistema binário para as duas colunas (Coluna Convencional e Coluna CDIIC). Para as duas colunas foi calculada uma eficiência global de prato de 60%, na realidade o número de pratos aumenta em relação às condições de operação. A eficiência desta coluna foi desenvolvida em relação ao número de pratos reais estabelecidos por métodos *shortcut* no simulador sendo de 43,3 estágios.
- Sistema 2 (metanol-água): neste sistema foram estabelecidos para a coluna convencional 36 estágios e para a coluna CDIIC 26 estágios, com o objeto de verificar o potencial de separação da coluna CDIIC. Para a coluna convencional o número de estágios reais foi obtido também pelo meio dos métodos *shortcut* no simulador sendo de 76 estágios reais para a coluna convencional e 52 estágios reais para a coluna CDIIC, conseqüentemente suas eficiências são de 47 % e 52 % respectivamente.
- Sistema 3 (etanol-água): neste sistema foram estabelecidos para a coluna convencional 36 estágios e para a coluna CDIIC 26 estágios. Para a coluna

convencional o número de estágios reais foi obtido a partir de métodos *shortcut* sendo de 68 estágios reais para a coluna convencional e 52 estágios reais para a coluna CDIIC, conseqüentemente suas eficiências são de 52 % e 50 % respectivamente.

As eficiências de prato globais são resumidas na Tabela 21 seguidamente.

Figura 21. Eficiências Globais de prato

Item	CC	CDIIC
Sistema 1	60%	60%
Sistema 2	47%	52%
Sistema 3	52%	50%

5.9.1 Comentários e Conclusões

A aproximação fraccionaria entre a concentração do vapor num estágio real em relação com a concentração no equilíbrio é o conceito usado para o cálculo de equilíbrio, mas especificamente o conceito apresentado por Murphree, onde a relação acontece entre a corrente saliente no estágio em equilíbrio com a concentração real da corrente é o fundamento dos conceitos de eficiência. Estas definições no caso da coluna CDIIC, podem ser parcialmente arbitrárias devido a que nesta configuração devido a que em comparação com a verdadeira corrente de vapor que se movimenta em paralelo entre as seções da coluna, uma concentração saliente pode ser maior na fase vapor e em consequência também pode ser maior na fase líquida o qual gera erros de cálculo no uso do conceito de eficiência de Murphree.

Para o cálculo da eficiência os modelos usados para destilação permitem observar o comportamento da mistura em relação aos parâmetros de desenho, mais é necessário a modelagem de uma correlação que descreva os fenômenos presentes na unidade, no caso do presente projeto foi focalizado ao estudo da configuração e seu potencial na diminuição do consumo de energia em comparação com o projeto convencional.

È necessária a aplicação de outra correlação para o cálculo da eficiência, além de ter maior informação da coluna numa escala suficientemente grande que permita obter dados experimentais.

***Capítulo 6 – Projeto Interno
e Painéis de Calor***

6.1 Introdução

No presente capítulo, serão apresentadas diferentes tentativas de projetos internos de painéis de calor, dando ênfase no projeto proposto pela universidade de TU Delft. O projeto de inclusão de painéis de calor que permitam uma melhor transferência de energia é foco de estudo nos projetos holandeses, estes desenvolveram uma unidade piloto que permitiu o estudo desta configuração por meio de unidades externas de transferência de calor e projetos internos dispostos na seção interna da coluna de retificação e esgotamento.

Uma discussão em relação à necessidade de incluir painéis de calor é tratada, apresentando a possibilidade de aproveitamento da área de transferência de calor entre as duas seções evitando aumentar a complexidade do projeto interno de coluna e os custos associados ao desenvolvimento da configuração de coluna CDIIC numa escala suficientemente grande.

6.2 Painéis de Transferência Experimentais

O tipo de transferência usada na configuração interna da coluna é o fato mais importante para a coluna CDIIC. Os estudos apresentados até hoje em relação a painéis de calor em sua maioria foram desenvolvidos por grupos de pesquisa holandeses; estes apresentam uma melhor eficiência na transferência de calor (Reijke 2007). Estes painéis são em aço inoxidável, soldados a laser como se apresentam na Figura 47.

A configuração dos painéis formam canais de fluxo de vapor e líquido adequados para o movimento do fluido, isto eleva a pressão e a temperatura da seção. A grande vantagem do intercambiador é a flexibilidade nas dimensões do painel e a formação de canais de distribuição de energia, além disso, a construção deve ser relativamente econômica de fabricar para fazer desta proposta uma alternativa atrativa.

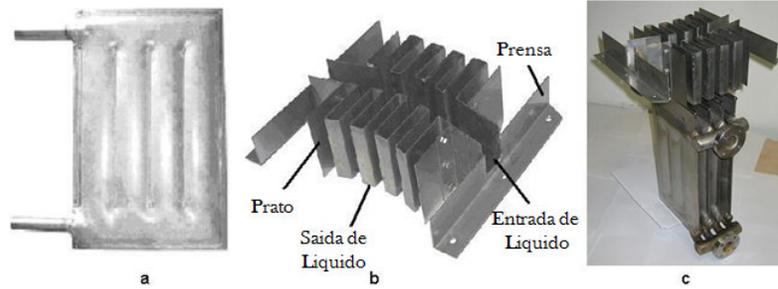


Figura 47 . a) Painel de calor, b) Bafle Distribuidor de líquido. C) Set de painéis de calor usado em seção de intercâmbio. (Reijke 2007)

O projeto de painel está limitado pelo espaçamento disponível na seção da coluna; as variáveis de desenho têm como objetivo a maior transferência de calor na área ativa do prato que facilitem a separação da mistura.

Na Figura 48, mostra-se a localização de um conjunto de painéis de calor, identificando a disposição dos painéis e o sistema de recirculação pode ser indentificado na parte superior do painel; eles são usados para a transferência de calor.

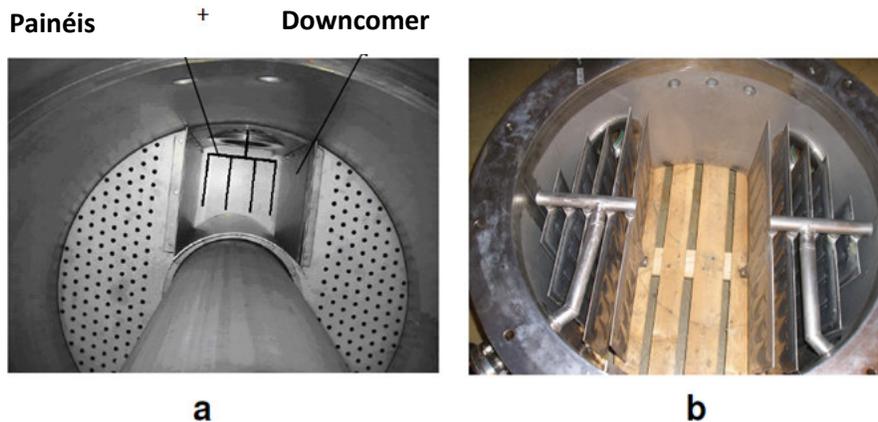


Figura 48. a) Localização dos painéis de transferência de calor em 'Downcomer', b) Desenho de conjunto de painéis de calor na seção ativa. (Reijke 2007)

Uma unidade para a avaliação dos painéis de transferência de calor foi desenvolvida para a avaliação das condições de operação, esta foi apresentada por Reijke. A unidade de estágios múltiplos foi disposta num recipiente, criando as condições similares numa unidade real. As dimensões dos painéis foram estabelecidas de 200x350 mm e para os canais de 60x13 mm. Uma representação do teste realizado é apresentada na Figura 49.

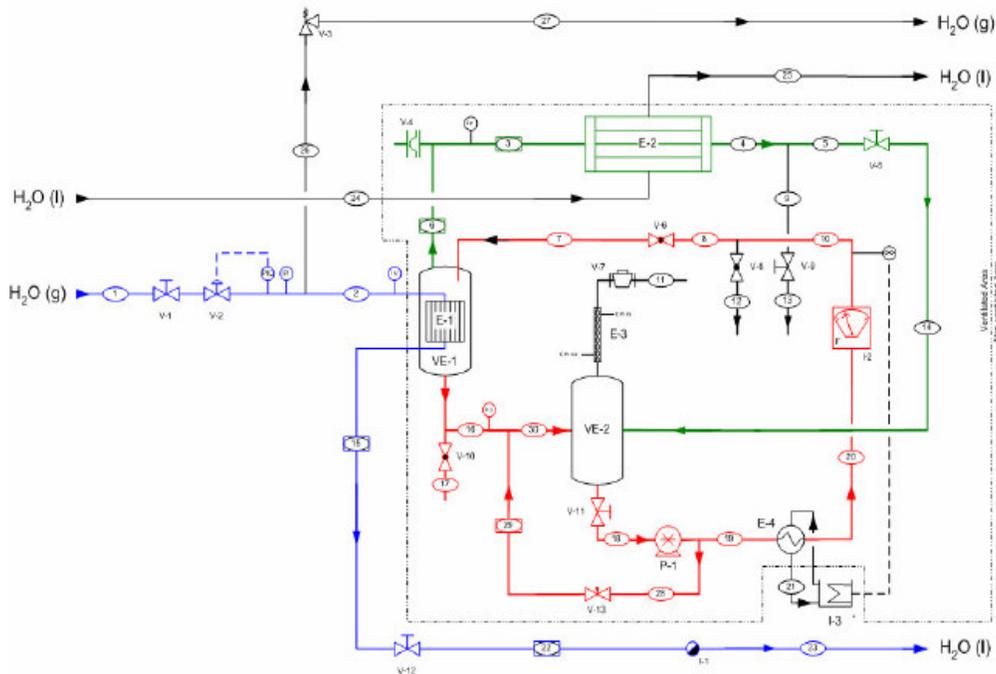


Figura 49. Representação do Teste de Painel de Calor (Reijke 2007)

O sistema estudado foi para uma mistura de ciclohexano / n-heptano. A corrente de temperatura foi controlada por meio de correntes de vapor. A pressão na unidade pode ser modificada e a alimentação é feita na parte superior do painel. Uma descrição da operação e as conexões do sistema são apresentadas no trabalho de Reijke.

As inclusões dos painéis de calor permitem claramente aumentar a transferência de energia nas áreas mais frias no prato, mas é notório que a inclusão dos painéis diminui a área de contato entre as fases líquida e vapor aumentando a perda de pressão.

6.3 Estudo do Projeto Interno de Coluna CDIIC

Estudos para um projeto de prato foram desenvolvidos neste trabalho no Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação – LDPS, em relação à transferência de energia da seção de retificação para a seção de esgotamento. Neste, foi descrito um projeto de prato interno, descrevendo a unidade concêntrica, a distribuição dos furos e o *design* dos vertedouros das seções dispostas de forma concêntrica.

Na Figura 50, é apresentado o projeto de coluna CDIIC; este estudo foi desenvolvido para a análise da transferência de calor num estágio concêntrico; o trabalho desenvolvido por Pulido et al. [78] apresenta uma configuração inédita de arranjo interno da Coluna CDIIC. A área vermelha representa a seção de retificação e a área azul representa a seção de esgotamento.

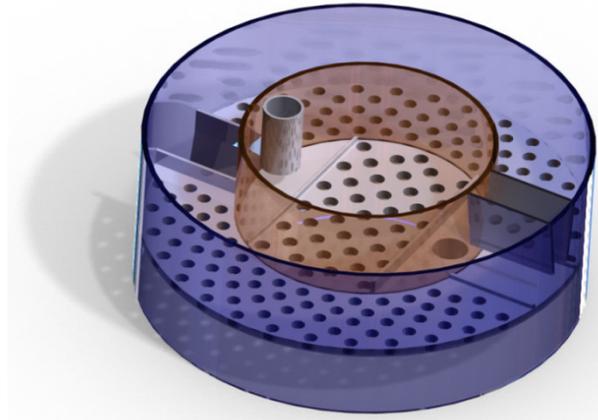


Figura 50. Estágio Concêntrico da Coluna CDIIC (Pulido et al. 2010)

Sabe-se que a maior complexidade da coluna CDIIC é a disposição interna da configuração; esta deve incluir a maior quantidade de vapor na seção de retificação para o aquecimento da seção de esgotamento. Uma configuração de prato perfurado foi estabelecida devido a que esta conta com a maior quantidade de pesquisa publicada na literatura aberta. Este tipo de configuração de estágio conta com facilidades para a interação dos componentes líquidos e vapor, os cálculos de diâmetro e dimensões da coluna foram baseados nos estudos apresentados na literatura [78, 79].

O prato foi estabelecido com uma disposição de furos tipo quadrado e triângulo; estes foram estabelecidos para a seção de retificação e esgotamento, correspondentemente.

Os conceitos apresentados por Bhatia [80] foram levados em conta para o projeto de prato, uma vista superior da configuração dos pratos é apresentada na Figura 51.

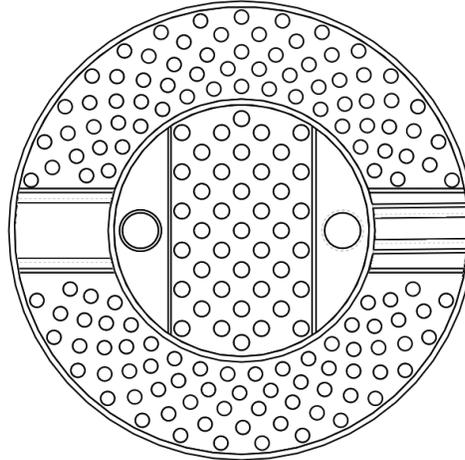


Figura 51. Projeto Interno de Prato Perfurado (Pulidoet al. 2010)

Um estudo da Fluidodinâmica Computacional – CFD, fazendo uso do software ANSYS CFX 12.0 (*of Ansys Inc., Europe*) foi usada para análise em três dimensões do estágio numa escala considerável. A simulação CFD permite a simulação rigorosa da configuração por meio da análise numérica estabelecida para o fluxo de gás da coluna. Tendo em conta a quantidade numérica e sabendo que o potencial energético se encontra no vapor, a simulação foi estabelecida em função dos fluxos de vapor e líquido da coluna.

Os estudos de simulação foram baseados no trabalho apresentado por Pulidoet al., para a mistura benzeno-tolueno. Inicialmente, uma simulação em Aspen Plus V7.2 foi desenvolvida, usando o modelo NRTL para o cálculo dos valores de equilíbrio líquido vapor. A proposta de configuração interna apresentada anteriormente foi estudada encontrando a viabilidade de troca de calor pelo meio do arranjo concêntrico.

As especificações usadas para a simulação em Aspen é apresentada na Tabela 22; nesta foram levadas em consideração as seguintes condições:

- Operação em estado estacionário;
- Condições atmosféricas;
- Compressor isentrópico;
- Mistura perfeita da alimentação.

Os parâmetros usados na simulação são especificados na Tabela 22:

Tabela 22. Especificações Simulação Aspen Plus V 7.2

Set Coluna CDIIC	
Número de Estágios	13/13
PressãoRetificação [MPa]	0,2026
PressãoEsgotamento [MPa]	0,1013
Vazão de Alimentação [kmol/h]	100
TemperaturanaAlimentação [K]	343,15
Comp. na Alimentação [Molar]	
Benzeno	0,5
Tolueno	0,5

Depois da simulação feita no simulador comercial Aspen Plus V7.2, os resultados foram usados para a simulação do comportamento do calor no prato proposto. As especificações usadas para o prato foram apresentadas por Pulido et al. (2010), as quais são descritas na Tabela 23.

Tabela 23. Especificações do Estágio da Coluna CDIIC

Seção de Retificação		Seção de Esgotamento	
Geometria	Dimensão	Geometria	Dimensão
Diâmetro	0,45 m	Diâmetro Ex.	0,80 m
		Diâmetro In.	0,47 m
Diâmetro Furo	0,028 m	Diâmetro furo	0,025 m
Área Ativa	80% da área total	Área Ativa	80% Área total
Vertedouro	10% da área total	Vertedouro	10% Área total
Altura do estágio	0,04 m	Altura do estágio	0,04 m

Para o desenvolvimento do estudo da fluidodinâmica, foi estabelecido o domínio da seção de retificação e da seção de esgotamento; o modelo de turbulência para o fluxo de gás foi aplicado para a resolução computacional e o número de elementos usados para o domínio do sólido e do fluido foi de 3749,948.

Estes são apresentados na Figura 52 e 53.



Figura 52. Seção de Retificação e Esgotamento: (a) Domínio do Fluido e (b) Domínio do Sólido. (Pulidoet al. 2010)

A vazão de alimentação na seção de retificação foi de 1 Kg/s e uma temperatura de 385,4 K. Para a seção de esgotamento, a vazão de alimentação foi de 2 Kg/s e uma temperatura de 366,5 K.

Estes estudos permitiram avaliar o comportamento do fluxo de calor dentro das duas seções. Além disso, o potencial de transferência de calor da seção de retificação apresentou áreas distantes da parede da seção de retificação onde a transferência de energia é quase zero.

Uma modificação na disposição interna da coluna permite a melhora na troca de calor; estes perfis são apresentados para a fase vapor a seguir na Figura 53.

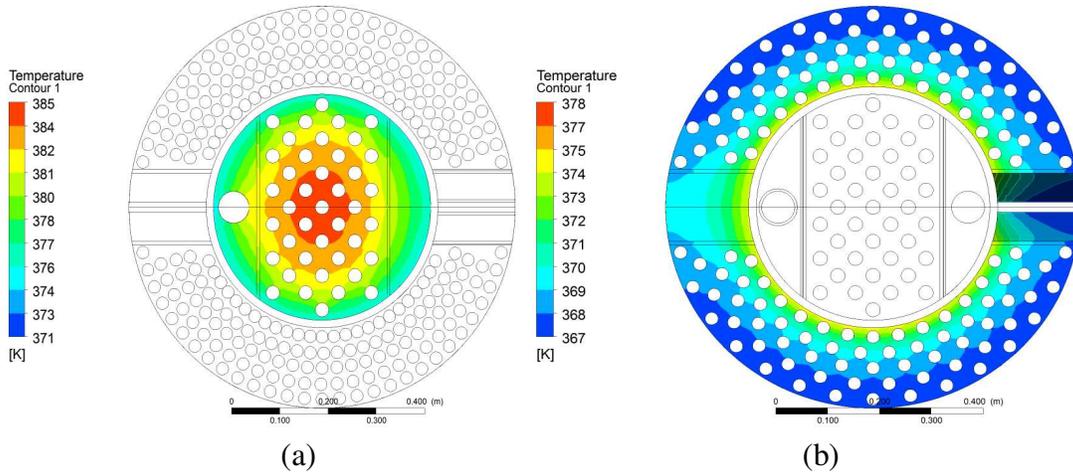


Figura 53. Perfis de distribuição de Temperatura (a) Seção de retificação (b) Seção de esgotamento. (Pulido et al. 2010)

Os resultados obtidos apresentam a possibilidade de transferência de calor de uma seção para a outra, sendo a seção de retificação a mais quente e a seção de esgotamento a mais fria. São observadas as áreas de transferência onde é observado áreas de poucas transferências as quais podem ser modificadas para atingir o problema da troca de calor e seu aproveitamento na coluna. O perfil de temperatura ao longo das seções é apresentado na Figura 54 a seguir.

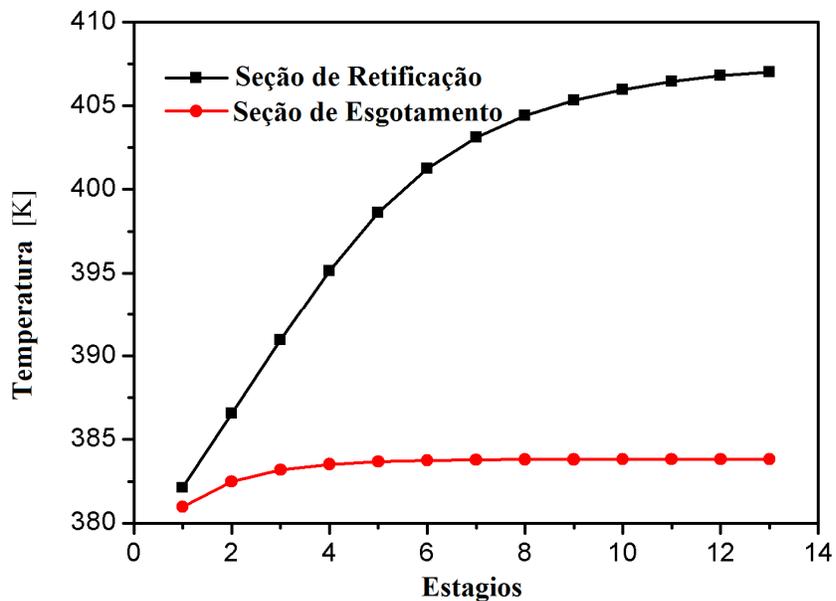


Figura 54. Perfil de temperatura ao longo das seções da coluna CDIIC

O perfil de temperatura simulado para as seções de retificação e esgotamento apresentam a possibilidade de transferência de energia entre as seções. O perfil obtido foi realizado para uma relação de compressão de 2:1 (pressão retificação/pressão esgotamento).

O fluxo de vapor para a mistura benzeno-tolueno é apresentado na Figura 55. Nesta, pode-se observar como nos primeiros estágios da seção de esgotamento a vazão de fluxo do vapor é maior em relação com a seção de retificação; no primeiro estágio da seção de retificação o fluxo de vapor aumenta significativamente devido a que neste estágio da seção de retificação se encontra a alimentação da seção de retificação sendo o último estágio do produto refinado que sai no topo da seção de retificação.

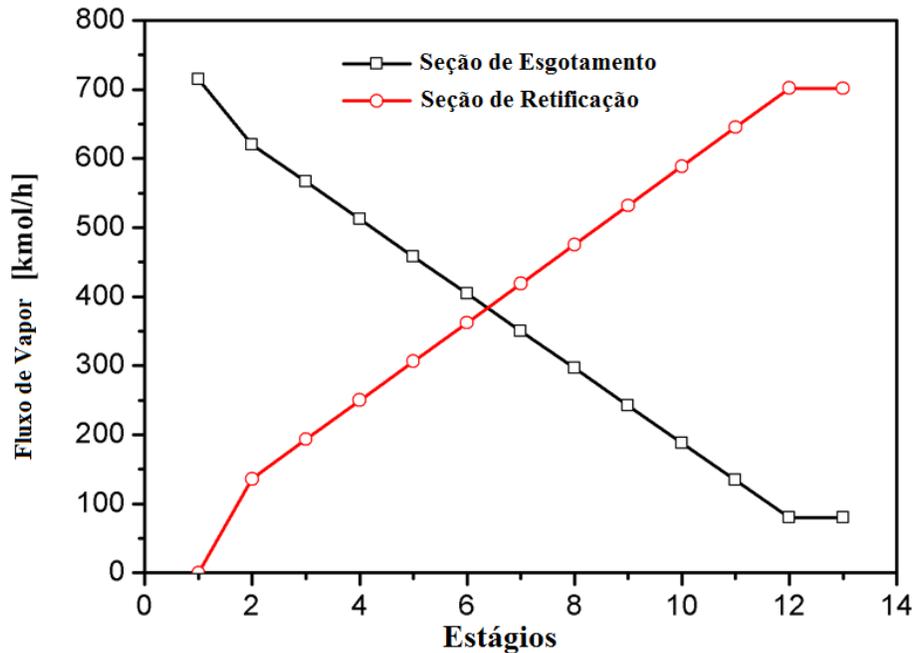


Figura 55 Fluxo de Vapor da Coluna CDIIC.

Desta forma, o calor latente presente no processo pode ser aproveitado, uma diminuição significativa da energia requerida pelo processo é dada pela troca de calor entre as duas seções. Os perfis de temperatura obtidos para o prato em estudo são apresentados para a interface sólida da coluna na Figura 56.

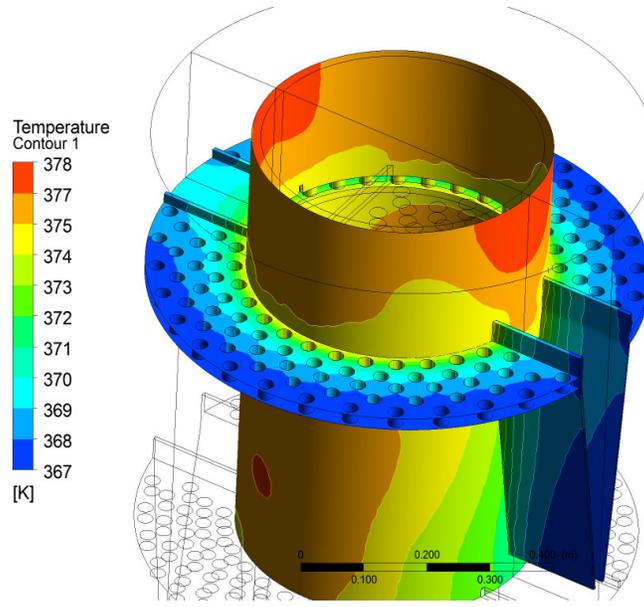


Figura 56. Perfil de Temperatura na Interface Sólida da Coluna CDIIC.

Dos resultados obtidos, foi observado que no centro da seção de retificação se encontram as temperaturas mais altas ao redor dos $111,85\text{ }^{\circ}\text{C}$ (385°K) para a seção de retificação; na seção de esgotamento é obtido um perfil de temperatura, sendo $101,85\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($375\text{ }^{\circ}\text{K}$) a maior temperatura nas proximidades da carcaza da seção de retificação e de $93,85\text{ }^{\circ}\text{C}$ ($367\text{ }^{\circ}\text{K}$) a uma distancia de 0,8 metros a qual corresponde ao diametro externo da seção de esgotamento. Para o caso teórico a mistura apresenta a temperatura necessária para encontrar os pontos de ebulição no sistema, mais na realidade a unidade se encontra com outros fenômenos como perdas de energia como o ambiente que podem diminuir o perfil de temperaturas.

Desta forma, com as temperaturas e condições de operação estabelecidas é possível operar a coluna sem a necessidade de inclusão de unidades externas para o aquecimento da coluna, foi observado que as áreas mais frias do sistema as quais se encontram no diâmetro externo da seção de esgotamento ainda têm a temperatura superior à temperatura de ebulição da mistura, por tanto a inclusão de painéis de calor não é levada em consideração para a troca de calor neste sistema. É possível observar que em termos de energia e temperatura é possível realizar uma separação por destilação na coluna CDIIC, neste caso o projeto de coluna de prato perfurado permite o desenvolvimento do processo; sabe-se que a área ativa do prato é limitada por isto a inclusão de dispositivos no prato poderia aumentar a

queda de pressão da coluna e levar a que a operação não se realize na coluna CDIIC devido a que os fluxos de vapor e líquido nesta coluna são altos.

6.4 Discussões e Conclusões

O presente estudo foi desenvolvido usando técnicas de simulação para o estudo da coluna CDIIC. Os softwares Aspen Plus V7.2 e ANSYS foram usados para o desenvolvimento das simulações. As vazões de vapor e líquido, os perfis de temperatura e a energia requerida pelo compressor, refeedor e condensador foram calculados com o simulador Aspen Plus focalizando o estudo à transferência de calor num prato concêntrico da coluna CDIIC, a separação obtida para a mistura benzeno-tolueno em fração molar foi de 81% e 99% respectivamente, estes resultados foram usados para a simulação da fluidodinâmica da coluna CDIIC.

Os estudos de fluidodinâmica computacional permitiram estudar a troca de calor em um prato concêntrico, apresentando a possibilidade de troca de energia nas seções sem a necessidade de inclusão de projetos internos como trocadores aquecedores térmicos, resistências térmicas, etc.

O estudo mais rigoroso de projeto interno de painéis de calor foi desenvolvido na Holanda (TU Delft), mas ainda hoje são necessários estudos e desenvolvimentos no que se refere à troca de calor e sua implementação. Além do projeto apresentado anteriormente visando os painéis de calor como uma alternativa para melhorar a transferência de energia, Hugill e Van Dorst [81] trabalharam na possibilidade de modelos de trocadores tipo ‘*Plate-fin*’, obtendo resultados de simulações para uma unidade de separação que mostram facilidade da transferência de calor entre os estágios, o que significa uma diminuição no consumo de energia e, portanto, nos custos devido à aplicação do painel.

Em relação aos estudos desenvolvidos por Pulido et al. [78], é clara a necessidade de aumentar o potencial de transferência de calor de uma seção para a outra sendo o projeto de painéis de calor uma alternativa razoável para a transferência do calor nas áreas mais frias do estágio. Contudo, o projeto deve levar em consideração os custos associados e a complexidade de instalação e manutenção das unidades destiladoras.

O projeto de painéis ou trocadores internos pode complicar o projeto interno da coluna, além de aumentar os custos por materiais, diminuir a área de contato das correntes líquidas e vapor na área ativa do prato, gerando quedas de pressão e possíveis inundações no estágio.

Fazendo uso do conceito da coluna CDIIC - ideal, onde a unidade é operada sem a necessidade de refeedor e condensador e baseado na proposta de uma modelagem concêntrica que diminui o diâmetro na seção interna apresentada por De Graauwet al. no 2003 [88], é estabelecida uma proposta de arranjo interno que permitiria uma troca eficiente de energia levando em consideração a quantidade de calor latente presente em cada prato em razão ao volume de mistura conteúdo.

Uma abordagem conceitual da configuração interna da coluna (configuração interna, em referência à disposição da seção de retificação em relação à seção de esgotamento) é proposta na presente dissertação. Conseqüentemente, dos estudos de simulação desenvolvidos, é proposta uma configuração nova que permite o aproveitamento do calor devido à área de contato das fases líquida e vapor (calor latente conteúdo na seção) nos estágios, com a seção correspondente como se apresenta na Figura 57.

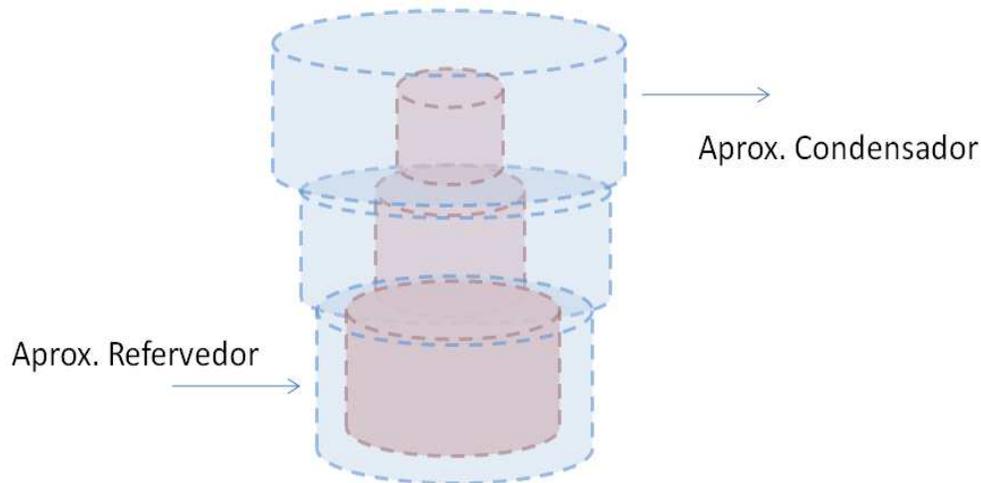


Figura 57. Nova Configuração multi-concêntrica de coluna CDIIC

Desta forma, a maneira como é distribuído um estágio em relação ao outro determina o fenômeno de transferência de calor na coluna. A configuração apresentada visa aproveitar

as áreas de contato e o calor latente disposto em cada estágio ao longo da coluna devido ao processo.

Uma configuração em forma de escada para a coluna interna (retificação), onde os estágios do fundo apresentam maior volume que os estágios superiores, enquanto, na coluna externa (esgotamento) apresenta uma configuração em escada inversa à da coluna interna, sendo o topo dessa coluna os estágios com maior volume em relação com os estágios de fundo. Fisicamente, o calor latente presente nestos estágios é função da unidade de massa contéuda e desta forma a substância deve receber ou ceder um quantidade de calor para o câmbio de fase. O arranjo no topo e no fundo da coluna apresenta uma aproximação à operação de um condensador e um refeedor, em consequência ao potencial de troca de energia entre as duas seções e o calor latente presente nos estágios da coluna.

Desta forma, a dificuldade de interação líquido-vapor nas seções apresentadas por projetos interior ou de painéis de calor pode ser resolvida levando em consideração esta nova configuração. Também, custos de materiais, projeto e montagem dos trocadores/painéis é solucionado. Esta nova configuração deve ser aprofundada em estudos posteriores. Esta proposta de conceito de coluna multi-concêntrica será abordada em estúdios posteriores de configuração de colunas CDIIC do LDPS que permitam o estabelecimento do modelo, no presente trabalho é proposto o modelo o qual foi obtido da análise dos resultados das simulações realizadas.

Sugestões para Trabalhos Futuros

O projeto de coluna com integração interna de calor CDIIC é um conceito relativamente novo, vem sendo estudado faz 12 anos, portanto, ainda está em desenvolvimento por diferentes grupos de pesquisa no mundo.

Em relação aos estudos desenvolvidos, foi estabelecida a necessidade de desenvolver outros estudos como:

- Estudos de fluidodinâmica em relação aos diferentes arranjos internos da coluna e disposição dos pratos.
- Modelagem matemática da coluna com integração interna de calor para um projeto de integração estabelecido.
- Projeto e construção do primeiro protótipo de coluna CDIIC no Brasil.
- Estimativa de dados numa escala piloto, que permitam o cálculo da eficiência nos pratos e na coluna.
- Desenvolvimento da tecnologia de destilação com integração interna de calor.
- Estudo de materiais usados para construção da coluna.

Referências Bibliográficas

1. EMTIR M.; REV E, FONYO. Rigorous simulation of energy integrated and thermally coupled distillation schemes for ternary mixture. *Applied Thermal Engineering*. 21, 1299-1317. (2001).
2. HUMPHREY, J. L.; SEIBERT, A. F.; KOORT, R. A. Separation technologies advances and priorities, Final Report for US Department of Energy, Office of Industrial Technologies, Washington DC, (1991).
3. BARROS, A. A. C. Desenvolvimento de modelo de estágio de não equilíbrio e proposição de correlações para processos de destilação convencional e extrativa. Tese de Doutorado, Unicamp, Campinas - SP, 1997.
4. VASCONCELOS, C. J. G. Simulação, otimização e controle de processos para a separação de misturas não ideais. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas - SP, 1999.
5. LINNHOFF, B. Pinch Analysis, A State of the Art Review, *Trans. I Chem E*, 71, 503-515 (1993).
6. GLENCHUR, T.; GOVIND, R., Study on a continuous Heat Integrated Distillation Column, *Separation Science and Technology*, 22(12), 2323-2338(1987).
7. LANG, L. Dynamic Behaviour and Operational Aspects of Heat-Integrated Distillation Processes, *Chem. Eng. Technol.*, 19, 498-506 (1996).
8. BRUGMA, A.J., Dutch Patent No. 41.850 (1937).
9. BRUGMA, A.J., US Patent 2,295,256 (1942).
10. PETLYUK, F.B.; PLATANOV, V.M.; SLAVINSKII, D.M., Thermodynamically Optimal Method for Separating Multicomponent Mixtures, *Intl. Chem. Eng.*, 5(3), 555-561 (1965).

11. WOLFF, E.A.; SKOGESTAD, S. Operation of Integrated Three Product (Petlyuk) Columns. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 34, 2094-2103 (1995).
12. HALVORSEN, I.J.; SKOGESTAD, S. Optimal Operation of Petlyuk Distillation: Steady State Behaviour, *J. Process Control*, 9, 407-424 (1999).
13. SHAH, P.B. Squeeze more out of Complex Columns, *Chem. Eng. Progress*, 98 (7), 46-55 (2002).
14. WRIGHT, R.O. U.S Patent 2,471,134, (1949).
15. SCHULTZ, M.A.; STEWART, D.G.; HERRIS, J.M.; ROSENBLUM, S.P.; SHAKUR, M.S.; O'BRIEN, D.E. Reduce Costs with Dividing Wall Columns, *Chem. Eng. Progress*, 98 (5), 64-71 (2002).
16. NULL, H.R., *Chem. Eng. Progress*, 78, pp. 58-64 (1976).
17. SULZER CHEMTECH, Distillation and Heat Pump Technology, Brochure 22.47.06.40-V.91-100.
18. LE GOFF, P.; CACHOT, T.; RIVERO, R. Exergy Analysis of Distillation Processes, *Chem. Eng. Technol.*, 19, 478-485 (1996).
19. RIVERO, R. Exergysimulateon and optimization of adiabatic and diabatic binary distillation, *Energy*, 26, 561-593 (2001).
20. LAVÈN, J. Internal Heat Exchange in a Concentric Tray Heat Integrated Distillation Column (CT-HIDiC), Report number: P&E-2413, Nov. 19 (2010).
21. MAH, R.S.; NICHOLAS, J.J.; WODNIK, R.B. Distillation with Secondary Reflux and Vaporization, a comparative evaluation, *AIChE J*, 23, 651-658 (1977).
22. J.D. SEADER, US Patent N0. 4,234,391 (1978/1980).

23. ASO, K.; MATSUDA, H.; NODA, T.T.; KOBAYASHI, N. US Patent No.5,783,047 (1996/1998).
24. NAKAIWA, M.; HUANG, K.; OWA, M.; AKIYA, T.; NAKANE, T.; SATO, M.; Takamatsu, T. *Energy*, 22, 621-625 (1997).
25. NAKAIWA, M.; HUANG, K.; NAITO, K.; ENDO, A.; OWA, M.; AKIYA, T.; T. NAKANE, T.; TAKAMATSU, T. A new configuration of ideal heat Integrated Distillation columns. *Computers and Chemical Engineering*. 24, 239-245. (2000).
26. NAKAIWA, M.; HUANG, M.; NAITO, K.; ENDO, A.; AKIYA, T.; NAKANE, T.; TAKAMATSU, T. *Comp. & Chem. Eng.*, 25, 737-744. (2001).
27. NAITO, K.; NAKAIWA, M.; HUANG, K.; ENDO, A.; ASO, T.; NAKANISHI, T.; NAKAMURA, T.; NODA, H.; TAKAMATSU, T. Operation of bench scale ideal heat integrated distillation column (HIDiC): an experimental study. *Computers and Chemical Engineering*, 24, 495-499. (2000).
28. DE RIJKE, A.; TESSELAAR, W.; GADALLA, M.A.; OLUJIC, A.; JANSSENS, P.J. *Distillation & Absorption*, England, UK (2006).
29. HANSELDEN, G.G. An approach to minimum power consumption in low temperature gas separation. *Trans. Instn. Chem. Eng.*, 36, 122-132 (1958).
30. FLOWER, J.R.; JACKSON, R. *Trans Inst. Chem. Eng*, 42, 249-258, (1964).
31. AGUIRRE, P.; ESPINOSA, J.; TARIFA, E.; SCENNA, N. *Ind. Eng Chem Res*, 36: 4882-4893 (1997).
32. DE KOIJER, G.M.; KJELSTRUP, S.; VAN der KOOIJ, H.; GROSS, B.; KNOCHÉ, K.F.; ANDERSEN, T.R. Positioning heat exchangers in binary tray distillation using isoforce operation, *Energy Conversion and Management*, 43, 1571-1581 (2002).

33. TONDEUR, D.; KVAALLEN, E. Equipartition of entropy-production. An optimality criterion for transfer and separation processes. *Ind. Eng. Chem Res*, 26, 50-56 (1987).
34. VILLERMAUX, J. Future challenges for basic research in chemical engineering, *Chemical Engineering Science*, 48(14): 2525-2535 (1993).
35. NAKAIWA, M.; HUANG, K.; ENDO, A.; OHMORI, T.; TAKAMATSU, T. Internally Heat integrated distillation columns: A review. *Chemical engineering research & design*, **81**, pp. 162-177 (2003).
36. LIU, X.G.; QIAN J.X. *Chem. Eng. Technol.*, 23: 235-241 (2000).
37. KELLER G.E.; HUMPHREY, J.L. Separation Process Technology, McGrawHill, New York (1995).
38. JANSSENS, P. J.; FAHKRI, F.; DE GRAAUW. J.; OLUJIC, Z. Energy saving potential heat integrated distillation column, Proceedings of the topical distillation symposium, *AIChE 2001 Spring Meeting Houston*, 22-26 April, 19-25 (2001).
39. BEGGS, S. Meng project report, University of Edinburgh UK, (2002).
40. GOVIND, R., Dual distillation columns, U.S: Patent 4,681,661 (1987).
41. DE RIJKE, A., Development of a Concentric Internally Heat Integrated Distillation Column (HIDiC), Ph.D. Thesis Research. T. University of Delft (2007).
42. American Institute of Chemical Engineers, Research Committee. Tray Efficiencies in Distillation Columns, AIChE: New York (1958).
43. CHAN, H.; FAIR, J.R. Prediction of Point Efficiencies on Sieve Trays.1. Binary Systems. *Ind. Eng. Chem. Process, Des. Dev.* 23, 814-820 (1984).
44. GARCIA, J.A.; FAIR, J.R.; *Ind. Eng. Chem. Res.* 39, 1809-1825 (2000).

45. PRADO, M.; FAIR, J.R. Fundamental Model for the Prediction of Sieve Tray Efficiency, *Ind. Eng. Chem. Res.* 29, 1031 (1990).
46. LEVENSPIEL, O. Engineering flow and Heat Exchanger. *Ed. Reverté S.A.*, Ver. Espanhol, 245-25, Espanha (1993).
47. TAKAMATSU, T.; NAKAIWA, M.; HUANG, K.; AKIYA, T.; NODA, H.; NAKANISHI, T.; ASO, K. Simulation oriented development of a new heat integrated distillation column and its characteristics for energy saving. *Comp.Chem. Eng.*, Vol 21, Suppl, S243-247 (1997).
48. GADALLA, M.; JIMENEZ, L.; OLIJIC, Z.; JANSSENS, P.J. A thermo-hydraulic approach to conceptual design of an internally heat-integrated Distillation column. *Computers and Chemical Engineering*, 31, 1346-1354 (2007).
49. NAKAIWA, M.; HUANG, K.; OWA M.; AKIYA, T.; NAKANE, T. Operating an Ideal Heat Integrated Distillation Column with Different Control Algorithms. *Computers and hemical Engineering*.22, S389-S393 (1998).
50. GADALLA, M.; OLUJIC, Z.; LAUREANO ESTELLER, L.J.; GONSÁBEZ, G.G. A desing method for internal heat Integrated Distillation columns.17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – *ESCAPE17*, 1041 (2007).
51. TAKAMATSU, T.; NAKAIWA, M.; HUANG, K.; AKIYA, T.; NODA, H.; NAKANIHI, T.; ASO, K. Simulation oriented development of a new heat integrated distillation column and its characteristics for energy saving. *Comp. Chem. Eng.*, Vol 21, Suppl,S243-247 (1997).
52. FRESHWATER, D.C. Thermal Economy in Distillation, *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 29, 149-160 (1951).
53. GADALLA, M.; OUJIC, Z.; SUN, L.; DE RIJKE, A.; JANSSENS, P. J. Pinch analysis based approach to conceptual desing of internally heat integrated distillation

columns. Institution of Chemical Engineers. *Trans IChemE*, Part A, August 2005 Chemical Engineering and Design, 83(A8): 987-993. (2005).

54. SMITH, R.; *Chemical Process Design* (McGraw-Hill New York), pp. 341-354 (1995).

55. NODA, H.; TAKAMATSU, T.; ASO, K.; NAKANISHI, T.; YOSHIDA, K.; NAKAIWA, M. T. Mukaida and N. Kuratani. Developmen on coaxial heat integrated distillation column (HIDiC). *Korean J. Chem. Eng.* 17(5), 593-596 (2000).

56. DE GRAAUW, J. US Patent No. 0121303A1 (2005).

57. RÉV, E.; EMTIR, M.; SZITKAI, Z.; MIZSEY, P.; FONYÓ, Z.. Energy savings of integrated and coupled distillation systems. *Comp. and Chem. Eng.*, 25, 119-140 (2001).

58. Huang, K.; Shan, L.; Zhu, Q.; Qian, J. Design and control of an ideal heat integrated distillation column (ideal HIDiC) system separating a close-boiling ternary mixture. *Energy*. 32, 2148-2156 (2007).

59. HUGILL, J. A. US Patent No: 7,111,673 B2 (2006).

60. GADALLA, M.; Olujic, Z.; DE RIJKE, A.; JANSENS, P. J. Reducing CO2 emissions of internally heat Integrated Distillation columns for separation of close bouling mixtures. *Energy*, 32, 2409-2417 (2006).

61. KING, C. J. *Separation Processes*. Editora McGraw-Hill, 2.^a ed., New York, 1980.

62. HENLEY, E. J., SEADER, J. D. *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. Editora John Wiley & Sons, New York, 1981.

63. HOLLAND, C. D. *Fundamentals of Multicomponent Distillation*. Editora McGraw-Hill, 2.^a ed., New York, 1981.

64. KRISHNAMURTHY, R.; TAYLOR, R. A. Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Process – Part I: Model Description and Method of Solution. *AIChE Journal*, 31(3), 449-456, 1985.
65. PESCARINI, M. H.; BARROS, A. A. C.; MACIEL, M. R. W. Development of a Software for Simulating Separation Processes Using a Nonequilibrium Stage Model. In: 6th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, 279-284, 1996.
66. SOARES, C. Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna com pratos perfurados. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas - SP, 2000.
67. LEWIS, W. K. The efficiency and design of rectifying columns for binary mixtures. *J. Ind. Eng. Chem.*, 14 (6), 492-497, 1922.
68. MURPHREE, E. V. Rectifying column calculations. *Ind. Eng. Chem.*, 17 (7), 747-750, (1925).
69. WEST, R. G., GILBERT, W. D., SHIMIZU, T. Mechanism of mass transfer on bubble plates efficiencies. *Ind. Eng. Chem.*, 44 (10), 2470-2478, (1952).
70. TAYLOR, R., KRISHNA, R. Multicomponent mass transfer. Editora Wiley, New York, (1993).
71. LEE, J. H., DUDUKOVIC, M. P. A comparison of the equilibrium and nonequilibrium models for a multicomponent reactive distillation column. *Computers and Chemical Engineering*, 23, 159-172, (1998).
72. COLBURN, A. P. Effect of entrainment on plate efficiency in distillation. *Ind. Eng. Chem.*, 28 (5), 526-530, (1936).
73. HOLLAND, C. D. Fundamentals of Multicomponent Distillation. Editora McGraw-Hill, 2.^a ed., New York, 1981.

74. DRICKAMER, H. G., BRADFORD, J. R. Overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity. *Trans. AIChE*, 39, 319-360, 1943.
75. O'CONNELL, H. E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers. *Trans. AIChE*, 42, 741-755, 1946.
76. ROUSSEAU, R. W. *Handbook of Separation Process Technology*. Ed. Wiley. New York, 1987.
77. BARROS, A. A. C., WOLF MACIEL, M. R. Desenvolvimento de uma correlação para o estudo da eficiência das colunas de destilação. 11.º Congresso de Engenharia Química, Rio de Janeiro, 271-276, 1996.
78. PULIDO, J. L.; MARTINEZ, E. L.; BINELI; A. R. R.; WOLF; M. R.; MACIEL FILHO, R.. *Proceedings of the World Congress on Engineering and Computer Science 2*, 742-747 (2010).
79. PULIDO, J. L. "Study of a New Concept of Distillation Column: Heat-Integrated Distillation Column (HIDiC)", Bachelor Thesis in Chemical Engineering, Industrial University of Santander, 2008.
80. BHATIA, M. V., *Transfer Operations in Process Industries*, Lancaster, Pennsylvania: TECHNOMIC Publishibg Co., 1983.
81. HUGILL, J.A.; VAN DORST, E.M. Design of a heat-integrated distillation column basedon plate-fin heat Exchange. *Proceedings of Sustainable (Bio)chemical Process Technology*, Netherlands, 27-29 Septembrer (2005).
82. PERR´S CHEMICAL ENGINEERS Handbook, 8e (Manual de EngenhariaQuímica, 8ª Edição. McGraw-Hill,125-623, 1230-1643 (2008).

83. HUANG, K.; SHAN, L.; ZHU, Q.; Qian, J. A totally heat-integrated distillation column (THiDiC) – the effect of feed pre-heating by distillate. *Applied Thermal Engineering*, **28**, 856-864 (2008).
84. SUPHANIT, B. Design of internally heat-integrated distillation column (HiDiC): Uniform heat transfer vs uniform heat distribution. *Energy*, **35**, 1505-1514 (2010).
85. GADALLA, M. A. Internal heat integrated distillation columns (iHiDiCs)-New systematic design methodology. *Chemical Engineering Research and Design*, **87**, 1658-1666 (2009).
86. IAN, R.Z.; CLIVE, C.; Kenneth, W. K., Swaminatham S. Unated States Patent No. 7,422,197 B2 (2008).
87. TSUNG-JEN HO. Desing and Modeling Studies of Internally Heat-Integrated Distillation Columns. Ph.D. Thesis Research. National Central University,(2010)
88. DE GRAAUW, J.; OLUJIC, Z.; JANSSENS PIETER, J. Heat integrated distillation column. Univ. Delft Tech August 2003: EP1332781.
89. GMEHLING, J.; ONKEN, U.; ARIT, W. Vapor liquid equilibrium data collection. Organic Hydroxy Components: Alcohols. Frankfort: DECHEMA, 1982.
90. OHE, S. *Vapor-liquid Equilibrium Data*, Elsevier, Tokyo (1989).
- 91 BROWN, T. L.; LEMAY, J. H. E.; BURSTON, B. E. *Chemistry: The Central Science*. Upper Saddle River, NJ: Pearson Education, Inc., 2006.
- 92 CAMBRIDGESOFT. *ChemFinder.com –Database and Internet Searching*. Cambridge, MA, 2004. Disponível online em <http://chemfinder.cambridgesoft.com/>. Acesso em Junho de 2010.
- 93 DDBT. *Dormund Data Bank Software and Separation Technology GmbH*, 2010. Disponível online em <http://www.ddbst.com/en/ddbst/Privacy.php>. Acesso em Junho de 2010.

94 SHUZO, O. *Vapor Pressure Computational*, 2009. Disponível online em http://e-data.jp/vpcal2/e/Toluene_e.cgi?temperature=25&submit=Calculate. Acesso em Junho de 2010.

95 Pulido, J. L.; WOLF, M. R.; MACIEL FILHO, R. *Simulação da coluna com Integração Interna de Calor (CDIIC) na Separação da mistura Metanol-Água*, que foi apresentado no 3º Encontro Nacional de Tecnologia Química, agosto de 2010, Rio de Janeiro. Disponível online em <http://www.abq.org.br/entequi/2010/trabalhos/1/1-20-7749.htm>. Acesso em fevereiro de 2011.

APÊNDICE I

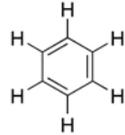
Benzeno

É um hidrocarboneto aromático que se apresenta como um líquido incolor, lipossolúvel, volátil, inflamável, de odor característico, perceptível a concentrações da ordem de 12 ppm. O benzeno é produzido industrialmente a partir da destilação do petróleo bruto, da destilação de hulha e produção de coque a partir de hidrocarbonetos lineares. Na atualidade o benzeno é classificado como um componente tóxico. Os níveis de benzeno não devem exceder a concentração de 1 % em volume de acordo a norma ASTM D3606.

O benzeno é líquido inflamável, incolor é característico por seu aroma doce, é usado com solvente e matéria prima para vários compostos orgânicos importantes como fenol, anilina trinitrotolueno, plásticos, gasolina, borracha sintética e tintas.

Algumas das propriedades físicas do benzeno são apresentadas na seguinte tabela [82].

Propriedades Físicas do Benzeno

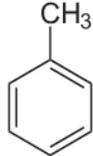
<i>Fórmula Química</i>	C₆H₆
<i>Estrutura Molecular</i>	
<i>Densidade</i>	0,8765(20) g.cm ⁻³
<i>Ponto de ebulição</i>	80,09 °C (353,24 K) a 101,3 kPa
<i>Pressão de vapor</i>	12,7 kPa (25 °C)
<i>Solubilidade</i>	levemente solúvel: H ₂ O

Tolueno

O tolueno é um líquido incolor, com odor aromático característico, similar ao benzeno. Tem alto poder de solvência. É usado para a produção de substâncias como benzeno, é muito usado como solvente para tintas, vernizes, colas, celulose, borracha, resinas entre outras aplicações.

Na indústria petrolífera é utilizado nos laboratórios para análise, está presente em derivados da destilação do petróleo. Algumas das propriedades físicas do tolueno são apresentadas na seguinte tabela [82].

Propriedades Físicas do Tolueno

<i>Fórmula Química</i>	$C_6H_5CH_3$
<i>Estrutura Molecular</i>	
<i>Densidade</i>	0,8669 g/ml
<i>Ponto de ebulição</i>	110,6 °C
<i>Viscosidade</i>	0,590 cP a 20°C
<i>Solubilidade</i>	0,47 g/l (20–25°C) em água

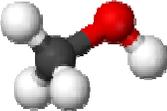
Metanol

O metanol é conhecido também como álcool metílico é o primeiro da série dos asfaltemos sendo assim uma das matérias primas mais importantes entre as substâncias químicas. Tem um odor característico, de formação polar, incolor e miscível em água, alcoóis, éteres e outros solventes orgânicos, devido a sua polaridade, ele dissolve muitas substâncias inorgânicas e sais.

A maior parte do metanol produzido é usada na síntese química dos compostos como: formaldeído, metil-terc-butil-éter, ácido acético, biodiesel e metilmetacrilato. O metanol também é usado em sistemas de refrigeração, como protetor natural de tubulações de gás. È considerado como inflamável de primeira categoria, por isto as condições de armazenamento e transporte devem ser extremas. A quantidade máxima de armazenamento de metanol no lugar de trabalho é de 200 litros.

A dose letal se encontra entre 30 ml e 100 ml por Kg de peso corporal, Este composto tem uma ação irritante sobre os olhos, pele e mucosas humanas [82]. Algumas propriedades físicas do metanol se apresentam na seguinte tabela.

Propriedades Físicas do Metanol

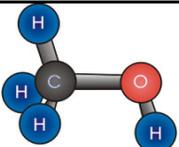
Fórmula Química	CH₃OH
Estrutura Molecular	
Densidade	0.7918 g cm ⁻³
Ponto de ebulição	64.7 °C, 148.4 °F
Viscosidade	0.59 mPa·s a 20 °C
Solubilidade	Miscível em água

Etanol

É também conhecido com álcool etílico é obtido a partir da fermentação dos açúcares de produtos vegetais como: cereais, beterraba, cana de açúcar ou biomassa. Os açúcares dos vegetais são produzidos em processos de fotossínteses, os açúcares se encontram concentrados na parte fibrosa da planta combinados como sacarose, amido, hemicelulose e celulose.

No Brasil, o etanol é uma das principais fontes de energia a indústria movimenta cerca de 12 bilhões de dólares. A maior parte das unidades produtoras e de mercado de trabalho localizadas nos estados de São Paulo e Paraná. No ano 2003, a produção de álcool chegou a 14,4 bilhões de litros em todo o país, com o Centro-Sul responsável por 12,9 bilhões de litros desse total, que representa um volume 16,72% acima dos 11,014 bilhões de litros produzidos na safra de 2002 nesta região. O melhoramento do processo e da eficiência industrial das unidades produtoras [82] deve se a estudos e implementação de novas tecnologias e variedade da matéria prima. A importância da coluna CDIIC para a separação da mistura metanol-água é de grande importância para a indústria do Brasil. Algumas propriedades físicas do metanol se apresentam na seguinte tabela.

Propriedades Físicas do Etanol

Fórmula Química	C₂H₆O
Estrutura Molecular	
Densidade	0,7894 g/cm ³
Ponto de ebulição	351,6 K (78,4 °C)
Viscosidade	1,19 cP a 20 °C
Solubilidade	Miscível em água