

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: SISTEMAS DE PROCESSOS
QUÍMICOS E INFORMÁTICA

TESE DE DOUTORADO

ESTUDO DA DINÂMICA DE UM SISTEMA DE RECOMPRESSÃO DE VAPOR
PARA A SEPARAÇÃO DE UMA MISTURA COMPLEXA DE
HIDROCARBONENTOS AROMÁTICOS

Aluno: Florival Rodrigues de Carvalho

Orientador: Prof^o Dr. Sergio Persio Ravagnani

Tese submetida à Comissão de Pós-Graduação da
Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP
como parte dos requisitos necessários para
obtenção do título de Doutor em Engenharia
Química.

Março de 1996

Campinas - São Paulo

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

96160215

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

C253e

Carvalho, Florival Rodrigues de

Estudo da dinâmica de um sistema de recompressão de vapor para a separação de uma mistura complexa de hidrocarbonetos aromáticos / Florival Rodrigues de Carvalho.--Campinas, SP: [s.n.], 1996.

Orientador: Sergio Persio Ravagnani.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Modelos matemáticos. 3. Métodos de simulação. 4. Dinâmica. I. Ravagnani, Sergio Persio. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof^o Dr. Sergio Persio Ravagnani pela orientação e amizade presentes durante a realização deste trabalho.
- Ao Prof^o Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira pelo incentivo.
- Ao Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos da Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP.
- Aos amigos, em especial, Luiz Pontes, Sergio Bello, Renato Costa, Carlos Suffredine e Evandro Leão.
- A Alessandra Torres.

RESUMO

A literatura apresenta uma grande quantidade de trabalhos envolvendo a simulação de coluna de destilação, tanto no estado estacionário quanto no dinâmico, porém na sua grande maioria abordando a coluna na sua forma convencional. A recompressão de vapor em sistemas de destilação tem despertado o interesse dos pesquisadores em virtude da sua importância no que se refere a economia de energia. O presente trabalho estuda a utilização da simulação estática e dinâmica aplicada a uma coluna de destilação com recompressão de vapor.

O processo de separação, via destilação, de compostos de baixa volatilidade relativa, como por exemplo, os xilenos mistos é extremamente intensivo sob os aspectos do consumo de energia. Neste estudo utilizou-se uma coluna separadora de xilenos mistos do tipo: etil-benzeno, para-xileno, meta-xileno, orto-xileno e 1,2,4-trimetil-benzeno, na qual foi feito um estudo comparativo, através da simulação estática, do consumo energético da coluna na sua forma convencional e com recompressão de vapor.

Também foi feita a modelagem dinâmica da coluna na sua forma convencional e com recompressão para se observar o efeito do sistema de recompressão quando a coluna era perturbada nas variáveis: razão de refluxo, carga térmica no refeedor e vazão de alimentação.

Para a análise do estado estacionário utilizou-se o programa comercial ASPEN PLUS e para a análise dinâmica utilizou-se o modelo fenomenológico clássico, denominado prato-a-prato, onde as equações diferenciais foram integradas pelo método de Runge-Kutta.

Os resultados obtidos mostraram a eficácia da modelagem dinâmica, pois esta apresentou desvio inferior a 1% no balanço de massa quando comparada ao simulador ASPEN PLUS. A eficiência dos pratos e o modelo termodinâmico utilizados foram determinados a partir de dados operacionais obtidos em várias colunas fracionadoras de xilenos mistos existentes na COPENE - Petroquímica do Nordeste S.A.

Observou-se que a aplicação da recompressão de vapor é altamente favorável para este processo e que o ganho energético pode alcançar, aproximadamente, a 80% quando comparado com o sistema convencional de aquecimento com vapor d'água.

Constatou-se também que o sistema de recompressão provoca um retardamento no tempo de respostas, principalmente na região de topo da coluna. Isto alterará significativamente as constantes de tempo utilizadas nos controladores do tipo PID.

ABSTRACT

The literature presents a great amount of work involving the simulation of a distillation column in the steady state as well as in the dynamic state; however, the great majority of them deals with the column in its conventional arrangement. The vapor recompression in distillation systems has raised the interest of researchers because of its importance in energy economy. In the present work the steady state and dynamic simulation are applied to a distillation column with vapor recompression.

The separation process by distillation of compounds of relatively low volatility, i.e., the mixed xylenes, is extremely intensive in the aspect of energy consumption. In this study, a separation column of mixed xylenes for the following compounds: ethyl-benzene, para-xylene, meta-xylene, ortho-xylene and 1,2,4-trimethyl-benzene was analysed. A comparative study was carried out in the energy consumption for a conventional column and one fitted with vapor recompression.

In addition, the dynamic modeling of the column in its conventional form and with recompression were developed to analyse the behavior of both system when the column suffers perturbations of reflux rate, thermal duty of the reboiler and feed rate.

The analysis of the steady state was performed using the ASPEN PLUS commercial program, and the dynamic analysis was done using a classical phenomenological model called tray-to-tray, where the differential equations were integrated by the Runge-Kutta method, developed in the present thesis.

The results obtained showed the reliability of the dynamic modeling, as an error in the mass balance below 1% is obtained when compared to the ASPEN PLUS simulation. The tray efficiency and the thermodynamic model used were determined from operational data obtained from several mixed xylenes fractionation columns operating at the petrochemical plant of COPENE - Petroquímica do Nordeste S.A.

It was observed that the vapor recompression application to this process is highly favorable as it leads to energy recovery of approximately 80% when compared to the conventional system of heating with water vapor.

Although very important from the point of energy recovery the study shows that the recompression system promotes a delay of response time to a perturbation, specially in the top

region of the column. This results is of great importance to the design and tuning of controller system of distillation column using recompression vapor technology.

ÍNDICE

NOTAÇÃO	i
Capítulo 1 INTRODUÇÃO	1
Capítulo 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 INTRODUÇÃO	6
2.2 MÉTODOS CLÁSSICOS PARA A MODELAGEM DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM REGIME TRANSIENTE	6
2.3 SISTEMA DE RECOMPRESSÃO DE VAPOR	12
2.4 DESCRIÇÃO DO SISTEMA	18
Capítulo 3 ESTADO ESTACIONÁRIO	20
3.1 INTRODUÇÃO	21
3.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESTADO ESTACIONÁRIO	21
3.3 AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO OPERACIONAL DA COLUNA	25
3.3.1 Perfil de Temperatura	26
3.3.2 Perfil de Composição	27
3.3.3 Perfil de Vazão de Líquido	29
3.3.4 Análise Comparativa Entre a Energia Removida Pelo Condensador e Requerida Pelo Refervedor	30
3.3.5 Parâmetros que Influenciam a Energia Requerida no Refervedor	32
3.3.5.1 Efeito da vazão de carga de alimentação (F)	32
3.3.5.2 Efeito da razão de refluxo	33
3.4 CONCLUSÃO	34
Capítulo 4 RECOMPRESSÃO NO ESTADO ESTACIONÁRIO	35
4.1 INTRODUÇÃO	36
4.2 TIPOS DE RECOMPRESSÃO DE VAPOR	37

4.2.1	Recompressão Indireta	37
4.2.2	Recompressão Direta	37
4.2.3	Outros Tipos	38
4.3	CRITÉRIOS PARA APLICAÇÃO DA RECOMPRESSÃO DE VAPOR	40
4.4	TIPOS DE COMPRESSORES E MOTORES	41
4.4.1	Injetor de Vapor	41
4.4.2	Compressor Alternativo	41
4.4.3	Compressor Parafuso	42
4.4.4	Compressor Radial	42
4.4.5	Compressor Axial	42
4.4.6	Motores	42
4.5	ANÁLISE ENERGÉTICA DA RECOMPRESSÃO	43
4.5.1	Termodinâmica da Recompressão	43
4.5.2	Balço de Energia	45
4.5.3	Energia Consumida no Compressor	46
4.5.4	Razão de Compressão	48
4.6	RECOMPRESSÃO DE VAPOR EM COLUNAS DE XILENOS MISTOS	48
4.6.1	Configuração da Coluna com Recompressão	49
4.6.2	Temperatura Ótima de Superaquecimento e Recompressão	52
4.6.3	Balço de Massa e Energia	53
4.6.4	Comparação Entre o Sistema com Recompressão e o Sistema Convencional	55
4.6.5	Potência Utilizada e Área de Troca Térmica	57
4.6.6	Aumento do ΔT no Refervedor versus Potência Utilizada	57
4.6.7	Área de Troca Térmica em Relação ao ΔT no Refervedor	58
4.6.8	Potência no Compressor em Função da Razão de Compressão	59
4.7	CONCLUSÃO	59
Capítulo 5 MODELAGEM DINÂMICA E ANÁLISE DO TRANSIENTE		62
5.1	INTRODUÇÃO	63
5.2	MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM REGIME TRANSIENTE	63
5.2.1	Balço de Massa	65

5.2.2	Balanço de Energia	66
5.2.3	Relação de Equilíbrio Líquido-Vapor	67
5.2.4	Propriedades Físicas e Grandezas Termodinâmicas	67
5.2.5	Equações Complementares	70
5.3	SIMULAÇÃO	73
5.4	ANÁLISE DO TRANSIENTE	76
5.4.1	Alteração na Razão de Refluxo (RR)	76
5.4.2	Alteração na Vazão de Carga (F)	82
5.4.3	Alteração na Carga Térmica (QR)	84
5.5	ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE A SIMULAÇÃO DINÂMICA E O SIMULADOR ASPEN PLUS.....	86
5.6	CONCLUSÃO	92
Capítulo 6	MODELAGEM DINÂMICA COM RECOMPRESSÃO DE VAPOR	94
6.1	INTRODUÇÃO	95
6.2	MODELAGEM DINÂMICA DO SISTEMA DE RECOMPRESSÃO DE VAPOR	95
6.2.1	Trocador de Calor de Superaquecimento (Trocador 01-lado frio)	97
6.2.2	Compressor	97
6.2.3	Refrigerador	99
6.2.4	Trocador de Calor de Superaquecimento (Trocador 01-lado quente)	100
6.2.5	Condensador + Vaso de Topo (Trocador 02)	101
6.3	ANÁLISE COMPARATIVA DA DINÂMICA DA COLUNA CONVENCIONAL E COM RECOMPRESSÃO DE VAPOR	103
6.3.1	Perturbação na Razão de Refluxo (RR)	104
6.3.2	Perturbação na Vazão de Alimentação (F)	107
6.3.3	Perturbação na Carga Térmica no Refrigerador (QR)	110
6.4	CONCLUSÃO	111
Capítulo 7	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	114
7.1	CONCLUSÕES	115
7.2	RECOMENDAÇÕES.....	118

ANEXO A Propriedades Termodinâmicas	119
ANEXO B Arquivo Input do Aspen Plus	121
ANEXO C Programa Classic	124
ANEXO D Arquivo de saída do programa Classic.....	143
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	159

NOTAÇÃO

A	constante da equação de Antoine - equação (5.20)
A_p	área do prato
B	constante da equação de Antoine - equação (5.20)
B	vazão molar de produto de fundo (capítulo 4)
C	constante da equação de Antoine - equação (5.20)
C_p	capacidade calorífica a pressão constante
C_v	capacidade calorífica a volume constante
C_p^L	capacidade calorífica do componente no líquido
C_p^V	capacidade calorífica do componente no vapor
D	vazão molar do destilado
D_L	vazão molar do destilado líquido
D_V	vazão molar do destilado vapor
E	eficiência de Murphree
E_p	eficiência politrópica
e	constante da equação de Francis - equação (5.38)
F	vazão molar da alimentação
f	vazão molar da alimentação por componente
H	entalpia molar do vapor
\tilde{H}	entalpia parcial molar do vapor
h	passo de integração
h	entalpia molar do líquido
\tilde{h}	entalpia parcial molar do líquido
K	constante de equilíbrio líquido-vapor
L	vazão molar de líquido
l	vazão molar de líquido por componente para a vazão total L
\tilde{l}	vazão molar de líquido por componente para a vazão total $L+W_L$
L_w	comprimento do vertedor
M	acúmulo molar de líquido no prato
M	vazão molar (capítulo 4)

M_{troc}	acúmulo molar de líquido do trocador
M_w	peso molecular
N	número de estágios
NC	número de componentes
n	expoente politrópico
P	pressão total
P^{sat}	pressão de saturação do componente
P_c	pressão crítica do componente
P_{sh}	potência consumida no compressor
Q	carga térmica
Q_I	carga térmica do condensador (capítulo 3)
QC	carga térmica do condensador
Q_N	carga térmica do refeedor (capítulo 3)
QR	carga térmica do refeedor
R	vazão molar de produto de fundo
R	constante universal dos gases - equação (5.25)
RR	razão de refluxo
T	temperatura no prato
T_c	temperatura crítica do componente
T_{ref}	temperatura de referência
t	tempo
V	vazão molar de vapor
VL	vazão molar de líquido
V_C	volume do condensador
V_R	volume do refeedor
V_{troc}	volume de trocador
v_c	volume crítico do componente
v	vazão molar de vapor por componente para a vazão total V
\tilde{v}	vazão molar de vapor por componente para a vazão total $V+W_V$
W	vazão molar total que sai da coluna
w	vazão molar por componente que sai da coluna
X	fração molar do componente líquido (capítulo 3)

x	fração molar do componente líquido
xx	fração molar do componente líquido (capítulo 6)
Y	fração molar do componente vapor (capítulo 3)
y	fração molar do componente vapor
Z	fator de compressibilidade
z	fração molar do componente na alimentação

Letras gregas

α	parâmetro definido na equação (5.49)
$\Delta H_{\text{vap}}^{\text{ref}}$	entalpia de vaporização do componente a temperatura de referência
Δh_{eff}	entalpia de recompressão
Δp	diferença de pressão
ρ	massa específica molar
π	razão pressão de descarga e pressão de sucção no compressor
η	eficiência mecânica
η_{pol}	eficiência politrópica (capítulo 4)

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

INTRODUÇÃO

O século XX, que está prestes ao seu término, foi o século nitidamente voltado para o desenvolvimento tecnológico. Nunca, em toda a história da humanidade, os meios de produção em grande escala se desenvolveram tanto quanto no século atual, como também as necessidades de consumo das populações foram tão aguçadas como nos dias de hoje. Isto tem conduzido os meios de produção a uma corrida frenética, na busca de novas matérias primas, novas tecnologias, novos produtos e novos serviços.

A indústria química, também inserida no exposto acima, buscou atender às necessidades das populações dentro de um contexto unilateral, ou seja, tendo como o apogeu tecnológico a quantidade produzida, sem se preocupar com os custos finais de seus produtos. A partir da crise energética da década de 70, o modelo desenvolvimentista passou a ter novos desafios, não bastando produzir em larga escala, mas também produzir com baixo custo, principalmente o custo energético.

Os processos de separação, operação imprescindível na indústria química moderna, são em sua maioria de baixo aproveitamento energético, por exemplo, uma coluna de destilação chega a desperdiçar cerca de 95% da energia fornecida. Por outro lado, fontes da literatura, **Mix e colaboradores (1978)**, nos informam que cerca de 3% de toda a energia consumida no EUA é utilizada em colunas de destilação. Isto nos alerta para a necessidade urgente de um melhor aproveitamento energético dos novos processos de separação, como também sugerir modificações nos já existentes.

Tendo como objetivo a redução energética dos processos, estão sendo estudadas muitas alternativas para substituir a destilação convencional. Técnicas como extração líquido-líquido, extração líquido-vapor, adsorção, absorção, cristalização e a utilização de membranas filtrantes já são utilizadas como alternativas energéticas para diversos processos de separação, porém estas alternativas geralmente elevam a patamares altíssimos os custos do investimento inicial. Uma outra técnica bem menos onerosa e que tem apresentado ganhos energéticos consideráveis é a de incluir modificações conceituais nas formas primitivas das colunas, como por exemplo, o uso de condensadores e refeedores intermediários e a recompressão de vapor, entre outros.

A recompressão de vapor através das bombas de calor pode ser usada para otimizar energeticamente o processo, através da recuperação do calor da corrente do destilado e o seu conseqüente aproveitamento.

A técnica da recompressão de vapor, para determinados processos, tem sido indicada com uma alternativa bastante promissora no que se refere a economia de energia, uma vez que não necessita de modificações consideráveis no processo, nem exige controles intensivos. Nos últimos anos tem se verificado um aumento significativo no número de artigos publicados na literatura abordando as diversas formas de utilização de bombas de calor (Null 1976; Mix 1978; Mostafa 1981; Becker e Zakak 1985, a,b e c; Coker 1994; etc.).

No Brasil foi instalada na refinaria REDUC da PETROBRÁS em 1992, uma unidade de separação propeno-propano utilizando coluna de recheio estruturado e bomba de calor.

Entre os processos da indústria petroquímica, a separação de xilenos mistos é reconhecidamente um dos processos de maior consumo energético, pois os componentes da mistura têm pontos de ebulição relativamente próximos: etil-benzeno 136,2 °C, para-xileno 138,4 °C, meta-xileno 139,1 °C e o orto-xileno 144,4 °C, o que dificulta a separação por mecanismos normais de destilação.

O objetivo principal deste trabalho é realizar um estudo comparativo do consumo energético entre a utilização da destilação convencional e o uso de bomba de calor na separação de xilenos. O estudo será dividido em duas etapas, primeiramente será feita a análise comparativa no estado estacionário, e posteriormente a análise será feita através de um modelo dinâmico. A partir do modelo dinâmico desenvolvido para análise energética, também se obterá um programa de simulação dinâmica, que futuramente servirá como ferramenta para estudos da dinâmica do processo com o objetivo de definir qual a melhor filosofia de controle, tanto para a coluna de destilação convencional, quanto para a coluna com a bomba de calor.

Nos capítulos seguintes, apresentaremos as diversas etapas existentes nesse estudo. No Capítulo 2 trataremos da revisão bibliográfica, onde serão apresentadas as principais publicações, tanto para a simulação dinâmica, quanto para a técnica de recompressão de vapor. No Capítulo 3 será feita a simulação da coluna no estado estacionário para diferentes configurações de processo. No Capítulo 4, ainda no estado estacionário, será implantado um sistema de recompressão de vapor para coluna e para uma mesma configuração de processo, serão comparados os resultados gerados no Capítulo 3 com os resultados obtidos com a

recompressão de vapor. O Capítulo 5 apresenta a simulação dinâmica da coluna, onde são estudadas as perturbações realizadas no sistema, tanto na carga da coluna, como na razão de refluxo e na carga térmica do refeedor. No Capítulo 6 apresentaremos o comportamento dinâmico da coluna após a implantação da recompressão do vapor. Por último no Capítulo 7 são feitas as conclusões e as sugestões para futuros trabalhos.

A coluna a ser estudada está implantada na COPENE (Petroquímica do Nordeste S.A.) no município de Camaçari-Ba. A coluna tem configuração convencional, pratos valvulados, resfriamento do destilado através de um condensador a água, aquecimento via refeedor a vapor e tem como finalidade obter uma corrente de topo rica em etil-benzeno. Serão utilizados dados de operação e de projeto, como também a própria simulação estática, para teste de validação dos modelos utilizados na simulação dinâmica.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será apresentada uma revisão bibliográfica com o objetivo de fazer uma análise da modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação multicomponentes e do estado da arte da tecnologia de recompressão de vapor.

A pesquisa bibliográfica foi realizada tomando como base os últimos 30 anos. Utilizou-se como fonte as publicações na área de engenharia química, como por exemplo: periódicos, livros, revistas, patentes, etc. Apesar da extensa pesquisa, não foi encontrada na literatura publicações utilizando a modelagem dinâmica para estudo de sistemas com recompressão de vapor. As fontes consultadas tratam o assunto de forma isolada. Em virtude do exposto, a análise que será feita a seguir tratará os temas de forma autônoma.

A primeira parte da revisão abordará os principais métodos de modelagem de coluna de destilação em regime transiente, não só para misturas binárias, mas sobretudo, para misturas multicomponentes. Também será feito um levantamento do estado da arte da simulação dinâmica, identificando os principais simuladores dinâmicos utilizados nas indústrias e os benefícios proporcionados pelo uso destes, tanto no desenvolvimento de novos processos, como na análise dos processos em operação, principalmente no que se refere a filosofia de controle.

A segunda parte da revisão tratará das principais técnicas de reaproveitamento energético utilizadas nas indústrias. A análise energética será estudada não só sob os aspectos de processo, como principalmente no que se refere às modificações físicas na planta. Serão mostradas as diversas formas de recompressão de vapor, ou seja, a recompressão direta, a indireta e os sistemas mistos.

No final deste capítulo será feita a descrição da coluna de destilação a ser estudada, suas condições operacionais e os seus parâmetros geométricos de construção.

2.2 MÉTODOS CLÁSSICOS PARA A MODELAGEM DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM REGIME TRANSIENTE

A literatura apresenta uma longa relação de trabalhos publicados referente a modelagem dinâmica de colunas de destilação de multicomponentes. Os primeiros modelos apresentavam

fortes hipótese restritivas. Por exemplo, as vazões ao longo da coluna permanecerem constantes, isto é, não era realizado o cálculo de balanço de energia em cada prato. Este fato impedia que os modelos fossem utilizados para a análise do problema de controle da operação da coluna, visto que isto é feito através da manipulação de vazões internas de líquido e vapor. Verifica-se que de acordo com o desenvolvimento dos recursos computacionais e dos métodos numéricos para a solução de equações diferenciais, estas restrições foram sendo minimizadas.

Os primeiros estudos envolvendo simulação dinâmica de colunas de destilação surgiram a partir da necessidade de se compreender os mecanismos que envolvem a partida e parada de uma unidade.

Marshal e Pigford (1947) apresentaram um trabalho pioneiro de modelagem dinâmica de uma coluna de destilação. Através do uso de transformadas de Laplace, eles obtiveram uma solução analítica para o sistema de equações que descrevem o comportamento dinâmico de um prato da coluna. Para que o sistema de equações apresentasse uma solução analítica foram feitas diversas hipótese restritivas tais como a coluna com reservatório de volume infinito, misturas binárias, volatilidade e vazões constantes.

Rosenbrock (1957) analisou cinco métodos de solução das equações para o estudo do regime transiente em colunas de destilação. Ele chegou às seguintes conclusões:

- a) Transformada de Laplace: Demanda da utilização de relações de equilíbrio do tipo, $y = ax + b$, o que torna o sistema bastante restritivo.
- b) Método das Perturbações: Aplicado apenas em condições próximas do equilíbrio, o que o torna também bastante restritivo.
- c) Método Gráfico: Exige trabalho excessivo e é impreciso.
- d) Computadores Analógicos: Pode ser usado para pequeno número de pratos, porém apresenta precisão muito limitada.
- e) Computadores digitais: Método mais promissor, porém exige a preparação dos programas.

Rose e Williams (1955) estudando mecanismos de controle mais eficientes e menos empíricos, desenvolveram modelos dinâmicos e resolveram as equações utilizando-se das transformadas de Laplace e de computadores analógicos.

Rosenbrock (1958) em estudo comparativo sobre o uso de computadores digitais e analógicos, para diferentes casos, conclui por uma maior utilização dos digitais, devido

principalmente à perda de generalidade apresentada pelo analógico, que para cada situação torna-se necessário construir um circuito específico.

Rosenbrock (1962) desenvolveu um novo método combinando os métodos de Euler de 1ª e 2ª ordem. O autor assumiu constantes as vazões molares de líquido e vapor nos pratos. O método é bastante eficiente, porém de pouca aplicação prática.

Howard (1970) apresenta uma revisão da literatura até então publicada. A grande maioria dos trabalhos refere-se a misturas binárias, os sistemas multicomponentes são pouco citados, devido em parte à deficiência dos recursos computacionais disponíveis e raramente acompanhados de dados experimentais.

Tyreus et alli (1975) analisaram as dificuldades encontradas na integração das equações diferenciais oriundas de modelos matemáticos para uma coluna de multicomponentes. Constatou que as equações de hidrodinâmica do prato não são necessariamente as causadoras de instabilidade, e que as dificuldades encontradas na integração do modelo provém da forte interação entre as equações diferenciais, principalmente, nas colunas com baixa volatilidade relativa e alta pureza.

Doukas e Luyben (1978) alertam que a simplificação das equações diferenciais do balanço de energia para simples relações algébricas conduz a um sistema não realista e, por conseqüência, a respostas incorretas.

Fuentes e Luyben (1982) mostram três formas diferenciadas de resolver a equação de energia para um prato de uma coluna de destilação. Os autores alertam para os erros cometidos nos modelos simplificados, e a diferença de resultados fica patente quando se compara ao modelo rigoroso.

Gallun e Holland (1982) aplicam o método de integração multi-passo de Gear para solução simultânea de equações diferenciais e algébricas na simulação dinâmica de colunas. O estudo foi desenvolvido com o objetivo de minimizar os erros oriundos da redução de ordem das equações, que geralmente é feita na modelagem convencional. Utilizando-se de técnicas alternativas de solução da matriz Jacobiana (fatoração), eles conseguiram ajustar um modelo matemático que forneceu ótimos resultados para a separação de uma mistura de metanol, acetona, etanol e água.

Holland e Liapis (1983) apresentam uma revisão das principais técnicas de integração das equações diferenciais da modelagem dinâmica para processos de separação, destacando

principalmente o método Runge-Kutta semi-implícito e o método multi-passo de Gear. Os autores concluíram que a escolha do método a ser aplicado depende do sistema a ser estudado, porém apresentam o resultado de um teste entre os dois métodos citados para uma coluna absorvedora. Os resultados mostraram que o método de Gear foi aproximadamente 3 vezes mais rápido que o método de Runge-Kutta, porém eles alertam que este resultado não é exato, pois os critérios usados no tempo dos passos de integração foram diferentes.

Prokopakis e Seider (1983) utilizam o método de Runge-Kutta semi-implícito na integração de equações diferenciais. O modelo inova ao simplificar a forma do cálculo dos autovalores da matriz Jacobiana, permitindo desta forma estimar os autovalores locais a cada passo de integração. O modelo apresentou bons resultados quando utilizado em colunas de destilação azeotrópica.

Cho e Joseph (1983 a,b e 1984) realizaram diversos estudos no intuito de reduzir a ordem das equações diferenciais da modelagem dinâmica das colunas de destilação, absorção e extração. Eles obtiveram ótimos resultados utilizando o método da aproximação polinomial, ou seja, o método da colocação ortogonal. As variáveis de fluxos de líquido e vapor eram redefinidas de tal modo que a equação resultante absorvesse as descontinuidades oriundas das alimentações e das saídas laterais.

Stanley e McAvoy (1985) modelaram uma coluna de destilação em regime transiente para estudar as discrepâncias existentes entre os dados de recuperação de energia obtidos via modelo estático e os dados obtidos através do modelo dinâmico. Os sistemas estudados foram: benzeno/tolueno; metanol/etanol; isobutano/n-butano e metanol/água. Os resultados mostraram que o caminho percorrido entre dois estados estacionários é fundamental para se definir a filosofia de controle a ser adotada. Segundo os autores, através da simulação dinâmica foi possível conhecer o comportamento das variáveis manipuladas e das variáveis controladas. Este conhecimento foi necessário para definir o tipo de controle a ser utilizado no topo e no fundo das colunas, o que possibilitou um ganho de energia de até 17,5%, para o sistema isobutano/n-butano.

Lagar (1987) mostra que é possível, a partir dos autovalores da matriz Jacobiana, identificar no modelo dinâmico de coluna de destilação as regiões de maior ou menor instabilidade. A partir deste mapeamento, é possível estabelecer um chaveamento permitindo a mudança do método de integração de acordo com o tipo de instabilidade.

Eckert e Kubicek (1994 e 1995) desenvolveram um modelo dinâmico rigoroso que tanto pode ser utilizado na separação de sistemas bifásicos, líquido-vapor, como também para sistemas com mais de uma fase líquida. Além de permitir identificar dinamicamente a presença de várias fases líquidas, o programa também pode ser aplicado para sistemas não adiabáticos. O método de integração utilizado foi o método de Euler e os processos estudados foram a separação de n-butanol, água e n-propanol e a separação de nitrometano, dodecanol e eteno.

Wozny e Jeromin (1994) fizeram um levantamento minucioso do uso da simulação dinâmica no meio industrial. Neste artigo os autores fazem uma abordagem resgatando a origem da análise transiente, dos principais problemas que existiram na fase inicial, do desenvolvimento observado ao longo dos últimos 15 anos, e finalmente mostram os benefícios alcançados pela engenharia após o uso da simulação dinâmica.

Os desafios operacionais são alterados frequentemente, as mudanças nas condições de carga, as alterações mercadológicas e as novas legislações ambientais exigem do engenheiro químico o uso de ferramentas de maior grau tecnológico. Dentro deste contexto, Wozny e Jeromin mostram uma série de objetivos que devem ser alcançados no desenvolvimento de um projeto:

1. Operação otimizada do processo, para garantir a competitividade;
2. Reprodutibilidade da produção;
3. Garantia da qualidade;
4. Economia da utilização da energia e das matérias primas;
5. Operação segura e estável;
6. Flexibilidade operacional;
7. Partidas rápidas e paradas planejadas.

Esta lista indica o especial significado dos aspectos dinâmicos e da automação de processo. Estes critérios devem ser considerados tanto no planejamento, como no desenvolvimento do projeto e as ações devem ser tomadas na fase conceitual e básica.

Segundo Wozny e Jeromin a simulação dinâmica tem dada uma larga contribuição no entendimento dos processos químicos e citam itens que podem ser facilmente identificados a partir do uso da simulação dinâmica, tais como:

- Seleção de sensores e atuadores.
- Interfaceamento com a estrutura de controle.

- Otimização do controle.
- Investigação da robustez do controle.
- Segurança operacional.
- Instalação de algoritmos de controle avançado.
- Otimização de paradas e partidas.
- Treinamento de operadores.
- Otimização “on-line”.

Na Tabela 2.1 é apresentada uma visão geral das várias fases de desenvolvimento da simulação dinâmica para coluna de destilação.

Tabela 2.1 - Modelos dinâmicos para destilação

Descrição	Restrição
Modelos lineares	Transformada de Laplace
Balanço material	Vaporização equimolar e condensação
Balanço de massa e de energia	“Holdup” constante no prato
Balanço de massa e de energia	“Holdup” variável no prato
Balanço de massa, energia e perda de pressão	Pressão variável
Balanço de massa, energia, perda de pressão e transferência de massa	Modelos em não-equilíbrio

As décadas de 70 e de 80 foram os anos onde se concretizou a utilização da simulação estática nos meios fabris; no Brasil, esta aplicação foi maior a partir de 1985. Passada a fase da consolidação da simulação estática, o desafio atual é treinar e capacitar os quadros técnicos das empresas para o uso dos modelos dinâmicos. Atualmente já existe vários programas dinâmicos sendo utilizados em processos específicos, equipamentos individualizados e mais recentemente programas comerciais para uso geral. Na Tabela 2.2 são mostrados os principais simuladores dinâmicos existentes segundo **Wozny e Jeromin (1994)**.

Apesar da existência de diversos programas de simulação dinâmica, existem particularidades inerentes a determinados processos que não são contempladas nas versões comerciais. Para estes casos, a alternativa recomendada é o desenvolvimento de programas específicos e orientados para a simulação exclusiva daquele processo.

Tabela 2.2 - Principais programas de simulação dinâmica

	Programa	Instituições
Identificação de processo	KEDDC PILAR	Uni Bochum Uni Karlsruhe
Simuladores específicos	SIMUSOLV SATU	Dow Chem. Hoechst
Simuladores dinâmicos (Operações unitárias)	BATCHFRAC DISBATHC BARESI ELCOPOLY KOSI	Aspen Calsep Henkel Henkel Henkel
Simuladores dinâmicos de processo	DIVA SPEEDUP OPTISIM HYSYS	Uni Stuttgart Prosys Linde Hyprotech
Sistemas de treinamento	DIVA HEPROSS GIDS PROGRES SPEEDUP GEPURS	Uni Stuttgart Henkel DSM/Stamicarbon Lummus Imperial College Combustion Engineering

2.3 SISTEMA DE RECOMPRESSÃO DE VAPOR

Em virtude da simplicidade, a destilação constitui-se no processo de maior utilização entre as técnicas de separação. Os processos de destilação são os maiores consumidores de energia na indústria de refino do petróleo e nos processos petroquímicos. O sistema de destilação clássica utiliza fontes de calor independentes; vapor d'água ou óleo quente no refeedor e água fria ou fluido refrigerante para condensar os vapores do topo.

Nos últimos 20 anos, com o aumento significativo dos gastos com energia, exigiu-se uma nova orientação na conceituação dos novos projetos e também alterações nos já existentes. Tornou-se necessário uma análise econômica mais detalhada entre o capital investido e custos com energia, visando a obtenção de sistemas mais eficientes energeticamente. Apesar do

aumento de complexibilidade operacional, a nova ordem é minimizar a necessidade de se importar calor de fontes externas ao sistema em estudo.

Um dos melhores exemplos de eficiência energética em processos de destilação é o sistema de recompressão de vapor "heat pump". Segundo **O'Neill (1985)**, diversas configurações são possíveis, porém o arranjo mais comum consiste do vapor do topo da torre ser inicialmente comprimido para uma pressão correspondente a uma temperatura de saturação maior que a temperatura do fundo da torre. Em seguida o vapor comprimido é condensado no refeedor. O condensado resultante é utilizado como refluxo e como destilado líquido (produto). A energia e as utilidades empregadas são reduzidas significativamente quando comparadas com a destilação convencional, que consome uma grande quantidade de vapor e de água de refrigeração.

Segundo a literatura, as primeiras patentes usando o princípio da recompressão de vapor surgiram na década de 30 e sempre relacionadas com os processos criogênicos, conforme **Danziger e Baumer (1980)**.

Freshwater (1951) realizou testes comparativos da eficiência termodinâmica entre colunas de destilação convencional e com recompressão de vapor. A partir de uma mistura de 50% em peso de fenol e m-cresol, produziu um destilado com 94% em peso de fenol. A eficiência energética para o sistema de recompressão de vapor foi de 36%, resultado bastante animador quando comparado com os 10% da destilação clássica.

Null (1976) afirma que a recompressão de vapor tem uma extensa aplicação em sistemas de destilação que utilizam água ou outros fluidos refrigerantes no condensador. Para processos que exigem temperaturas acima de 150,0 °C no refeedor, a recompressão de vapor apresenta limitações devido à necessidade de utilização de altas taxas de recompressão.

Petterson e Wells (1977) a partir do processo de separação de olefinas, fizeram uma análise comparativa dos custos anuais de produção entre a destilação convencional e a recompressão de vapor. Tomando como base os anos de 1979-1980, o cálculo levou em consideração os custos de combustível, vapores de alta e baixa pressão, água de refrigeração e energia elétrica. Os autores verificaram que para obter as mesmas condições de operação e alimentação foram gastos US\$ 4,77x10⁶/ano para colunas convencionais e US\$ 2,5x10⁶/ano para a recompressão de vapor.

Mix e colaboradores (1978) em um estudo sobre formas de conservação de energia em processos de destilação mostram que é possível se obter economia de energia sem fazer modificações na planta, através de um estudo de melhoria de processo. Porém para se obter valores mais significativos de recuperação energética, modificações serão necessárias e a recompressão de vapor tem demonstrado ser uma técnica bastante eficiente.

Fitzmorris e Mah (1980) mostram que em um sistema complexo como a destilação, não faz sentido a utilização apenas de uma eficiência termodinâmica como parâmetro definitivo, faz-se necessário a inclusão de outros critérios. A escolha do critério dependerá do contexto e das circunstâncias específicas. Os autores também afirmam que maiores eficiências poderão ser atingidas com a redução das irreversibilidades do processo.

Mostafa (1981) seguiu a mesma linha de estudo de **Fitzmorris e Mah (1980)** na busca de parâmetros confiáveis para avaliação da eficiência termodinâmica da recompressão de vapor. Segundo Mostafa, a forma mais apropriada para medir o rendimento do sistema é dada por:

$$CR = \frac{(h_2 - h_3)}{(h_2 - h_1)} \left[1 - \frac{T_0}{T_3} \right] \quad (2.1)$$

onde:

- CR é o coeficiente de rendimento;
- h_1 , h_2 e h_3 são respectivamente as entalpias do destilado, vapor na saída do compressor e do condensado na saída do refeedor;
- T_0 é a temperatura do meio ambiente;
- T_3 é a temperatura do condensado na saída do refeedor.

O cálculo do CR foi analisado para os sistemas binários água-ácido acético, isobutano-nbutano e propano-isobutano. Mostafa chegou às seguintes conclusões para um sistema de recompressão de vapor:

- CR aumenta com o calor latente do destilado e com a diminuição da diferença de temperatura entre o refeedor e condensador;
- CR aumenta com a diminuição da razão de compressão;
- CR pode aumentar ou diminuir com o aumento da pressão de operação da coluna de destilação;
- CR aumenta com a diminuição da pureza dos produtos;

- CR aumenta com o resfriamento do líquido condensado no refeedor, isto é, ocorre o aproveitamento do calor sensível do condensado no refeedor.

Ravagnani (1983) estudou a recompressão direta de vapor para o sistema etanol-água. Foi analisado o efeito causado pela temperatura e composição da alimentação, razão de refluxo e eficiência politrópica do compressor sobre a energia recuperada. Os resultados mostraram que a recuperação de energia está em torno de 70 a 80% para as condições em que a composição e a temperatura são baixas. Também foi realizado, como estudo complementar a análise da influência da introdução de uma gás inerte no ciclo de recompressão sobre a recuperação de energia, constatou que a introdução de nitrogênio pode causar a redução da razão de compressão, porém esta quantidade tem que ser inferior a 200% em relação a vazão de vapor.

O'Neill e colaboradores (1985) em estudo realizado na Union Carbide Corp. mostram que um sistema com bomba de calor, pratos com múltiplos "downcomers" e condensadores de alta eficiência térmica "high flux tubing" pode reduzir em 30% o custo com equipamentos e em 50% os custos com energia quando comparado com um sistema de bomba de calor com pratos valvulados de multi-passo e refeedor convencional. Os autores também publicaram uma relação de plantas de separação de propeno/propano (P-P) e isômeros C_4 que utilizam a recompressão de vapor. Na Tabela 2.3 são mostradas algumas destas plantas.

Tabela 2.3 - Plantas com recompressão de vapor

Processo	Localização	Capacidade (MT/ano)	Partida
P-P	Texas	100.000	1979
P-P	Japan	50.000	1982
P-P	Espanha	70.000	1984
P-P	Texas	150.000	1976
P-P	Lusiana	100.000	1979
P-P	Belgica	100.000	1980
P-P	Nova Jersey	150.000	1976
P-P	Canada	100.000	1979
Iso- C_4	Nova Jersey	100.000	1976
Iso- C_4	Canada	100.000	1982
Iso- C_4	Holanda	80.000	1982

Becker e Zakak (1985 a-c) descreveram alguns critérios para a seleção do compressor para sistemas de recompressão de vapor:

- a) Resistência mecânica;
- b) Eficiência;
- c) Capacidade;
- d) Vazão máxima e mínima;
- e) Custo.

Entre os diversos tipos de compressores estudados, os autores recomendam o uso do compressor de parafuso, pela sua capacidade de compressão de vapores úmidos e alta pressão de descarga em um único estágio. Os autores estudaram dois processos típicos para aplicação da recompressão de vapor, uma coluna separadora de xilenos mistos e uma coluna separadora de isobutano. Para o caso da separação de xilenos mistos, o investimento realizado para a instalação da bomba de calor retornará à indústria em um prazo inferior a um ano. Para o segundo caso, separação de isobutano, o retorno do investimento será em torno de dois anos.

Supranto e colaboradores (1986) estudaram formas de economizar energia para sistemas de destilação a partir da seguinte classificação:

- a) não fazer modificações nas colunas do processo;
- b) fazer pequenas modificações nas colunas do processo;
- c) uso de mais de uma coluna;
- d) uso de bomba de calor.

Os autores concluem que para cada sistema a solução é específica e qualquer uma das alternativas citadas pode ser aplicada.

Jaganathan e colaboradores (1987) realizaram uma vasta pesquisa bibliográfica sobre bombas de calor entre os anos de 1945 e 1986. Neste período foi encontrado cerca de 150 publicações sobre o assunto.

Teoricamente, todas as colunas de destilação podem ser equipadas com um sistema de recompressão de vapor. A utilização ou não do sistema de bomba de calor dependerá de uma análise de viabilidade entre o capital investido e a energia recuperada. **Meili e Stuecheli (1987)** desenvolveram alguns critérios que poderão ajudar significativamente na escolha do sistema:

- Sistemas que consomem altas quantidades de calor no refeedor são os mais promissores para a aplicação da recompressão de vapor. A experiência mostra que a

energia deve ser no mínimo de 1,720 MMKcal/h, ou cerca de 3-4 toneladas métricas de vapor por hora;

- Quanto menor for a diferença de temperatura ao longo da coluna, mais propício torna-se o sistema para a recompressão de vapor. Diferenças de temperatura superiores a 50,0 °C dificultam a utilização da recompressão de vapor;
- Colunas que operam com baixo custo energético, é claro, não necessitam de recompressão de vapor;
- Colunas que utilizam grandes quantidades de fluidos refrigerantes no condensador também tornam o sistema apropriado para a recompressão de vapor;
- Grandes unidades de fabricação, freqüentemente tem sistemas energéticos complexos. Se alguma coluna de destilação for mudada para operar com recompressão de vapor, menor consumo de vapor será necessário; porém haverá maior consumo de energia elétrica. Logo, antes de qualquer mudança, deverá ser feita uma verificação se as instalações existentes suportam a modificação;
- Colunas que operam com baixa pressão geram um grande volume de vapor para o compressor. Colunas de destilação com a pressão do topo menor que cerca de 0,1 Kgf/cm² são inapropriadas para a recompressão de vapor, porque o compressor torna o sistema excessivamente caro;
- Colunas que separam produtos com baixa volatilidade relativa, implicam em um alto número de estágios e alta razão de refluxo. Por exemplo, a separação de eteno-etano, propeno-propano e etil-benzeno-xilenos são sistemas que propiciam ótimas condições para a recompressão de vapor.

Um outro sistema em que pode ser aplicado a recompressão de vapor é a separação de etil-benzeno/estireno. A alta pureza do produto final e a similaridade entre os pontos de bolha do etil-benzeno e do estireno tornam a separação extremamente difícil. Além desta dificuldade, a tendência do estireno é de polimerizar. Logo, a separação é realizada a vácuo, o que torna elevadíssimo o custo com os equipamentos. **Meili e Stuecheli (1987)** fizeram um estudo comparativo para a separação etil-benzeno/estireno usando recompressão de vapor em colunas com pratos convencionais, recheio randômico e recheio estruturado. Na Tabela 2.4 é mostrado o resultado das alternativas mencionadas, e como podemos observar, a recompressão de vapor com recheio estruturado é a que resulta em maior economia de energia.

Na bibliografia apresentada podemos constatar que a recompressão de vapor é uma tecnologia consolidada para sistemas de baixo peso molecular, como por exemplo, a separação de eteno/etano; propeno/prapano e isômeros C₄. Para sistemas de alto peso molecular, do tipo, mistura de xilenos mistos, as publicações sobre o assunto mostram que na maioria dos casos, os estudos ainda estão na fase de desenvolvimento, o que justifica, o número bastante reduzido de unidades operando comercialmente.

Tabela 2.4 - Coluna de separação etil-benzeno/estireno com recompressão de vapor

	Pratos	Recheio radômico	Recheio estruturado
Pressão de topo (Kgf/cm ²)	0,067	0,067	0,067
Temperatura de topo (°C)	58	58	58
Pressão de fundo (Kgf/cm ²)	0,310	0,197	0,127
Temperatura de fundo (°C)	106	93	81
Razão de refluxo	8,25	8,25	6,5
Estágios teóricos	54	51	54
ΔT Evaporação/Condensação (°C)	15	15	15
Razão de recompressão	9,9	6,7	4,5
Potência consumida pelo compressor (kW/ton. carga)	140	110	70
Custo por conversão (%)	100	70	60
Custo energético comparado com a coluna convencional (%)	70	60	40

2.4 DESCRIÇÃO DO SISTEMA

O sistema a ser modelado consiste de uma coluna fracionadora de compostos aromáticos que se encontra instalada na COPENE - Petroquímica do Nordeste. A coluna tem como finalidade segregar, pela corrente de topo, parte do etil-benzeno existente na corrente de carga, cuja composição é descrita na Tabela 2.5.

A configuração básica operacional de processo consiste de uma vazão de carga de 85,0 Kmol/h (9272,0 Kg/h), razão de refluxo 6,0 e a carga térmica no refeedor é de 0,845 MMKcal/h; a pressão no topo 1,1 Kgf/cm² e a pressão no fundo 1,25 Kgf/cm².

Tabela 2.5 - Composição de carga da coluna de destilação

Componente	etil-benzeno	para-xileno	meta-xileno	orto-xileno	1,2,4-trimetil-benzeno
%molar	21,26	13,87	30,51	13,56	20,80

A coluna tem 20 pratos do tipo valvulados e diâmetro de 1250 mm. A configuração geométrica dos pratos tem as seguintes dimensões: área ativa 10210 cm², área do topo do vertedor 1037 cm², área no fundo do vertedor 1037 cm², altura do vertedor 7,6 cm, largura do vertedor 87,8 cm e percurso do líquido no prato 90,2 cm.

O condensador é do tipo total, refrigerado a água com diâmetro de 60 cm e comprimento de 304,8 cm; o refeedor é do tipo termossifão aquecido a vapor com diâmetro de 89 cm e comprimento de 304,8 cm; o vaso de condensado tem diâmetro de 100 cm e comprimento de 300 cm.

A alimentação é realizada no estágio 14, contados de cima para baixo.

CAPÍTULO 3

ESTADO ESTACIONÁRIO

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será apresentada primeiramente a modelagem matemática desenvolvida no simulador ASPEN PLUS (**Aspen Plus Manual, 1994**), disponível na COPENE, para a obtenção do estado estacionário de uma coluna de destilação convencional; além de mostrar as principais equações do modelo, também será comentado a respeito do método numérico utilizado pelo programa para a resolução das equações algébricas do modelo. Na segunda parte deste capítulo será apresentada a análise do comportamento dos parâmetros operacionais da coluna descrita no capítulo anterior para diferentes condições operacionais, como por exemplo, alterações na vazão de refluxo, na vazão de carga e na carga térmica do refeedor.

Já para o modelo dinâmico, que será apresentado nos capítulos a seguir, é necessário o conhecimento dos dados de entrada gerados pelo estado estacionário; como por exemplo, é obrigatório que se conheça as composições da fase líquida, a vazão de líquido em cada prato e o perfil de pressão da coluna.

3.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESTADO ESTACIONÁRIO

As equações que descrevem o comportamento de um processo de separação de estágios e de multicomponente no estado estacionário, aparentemente parecem ser extremamente simples e de fácil solução, porém, na realidade, elas são altamente não lineares e interdependentes. Os cálculos que serão necessário para resolvê-las são intrinsecamente iterativos e complexos. Com o aparecimento dos computadores de alta-performance foi possível resolver os chamados métodos rigorosos, isto é, métodos sem a introdução de simplificações ou restrições de contorno. A seguir será apresentada a modelagem matemática para o estado estacionário e a descrição do método numérico utilizado para a solução das equações. O modelo termodinâmico e a eficiência dos pratos foram ajustados a partir de dados operacionais levantados em colunas de separação de xilenos mistos existentes na COPENE.

As equações que descrevem o estado estacionário de um processo de destilação são baseadas no modelo apresentado esquematicamente na Figura 3.1, onde:

- O estágio 1 é considerado como o condensador e o estágio N como o refeedor, ambos são considerados estágios de equilíbrio;
- Q_1 e Q_N são as cargas térmicas referentes ao condensador e ao refeedor, respectivamente;
- $D_V + D_L$ é a vazão total de destilado;
- No caso da condensação total, isto é, $D_V = 0$, o líquido do estágio 1 é considerado em equilíbrio com o vapor;
- As alimentações laterais F_{L1} , F_{V1} , F_{LN} e F_{VN} são geralmente iguais a zero;
- A carga líquida está perfeitamente misturada com o líquido existente no prato logo abaixo do ponto de alimentação e que a carga no estado vapor está perfeitamente misturada com a fase vapor logo acima do prato de alimentação;
- As retiradas laterais terão as mesmas composições e condições do estágio onde a corrente foi retirada;
- A fase líquida em cada estágio é considerada como uma mistura perfeita, como também a relação líquido-vapor em cada estágio é governada por uma relação de equilíbrio;
- O distanciamento do equilíbrio é corrigido através de modificações nas expressões da relação de equilíbrio, como a modificação na eficiência de vaporização, ou a combinação desta com a modificação da eficiência de Murphree.

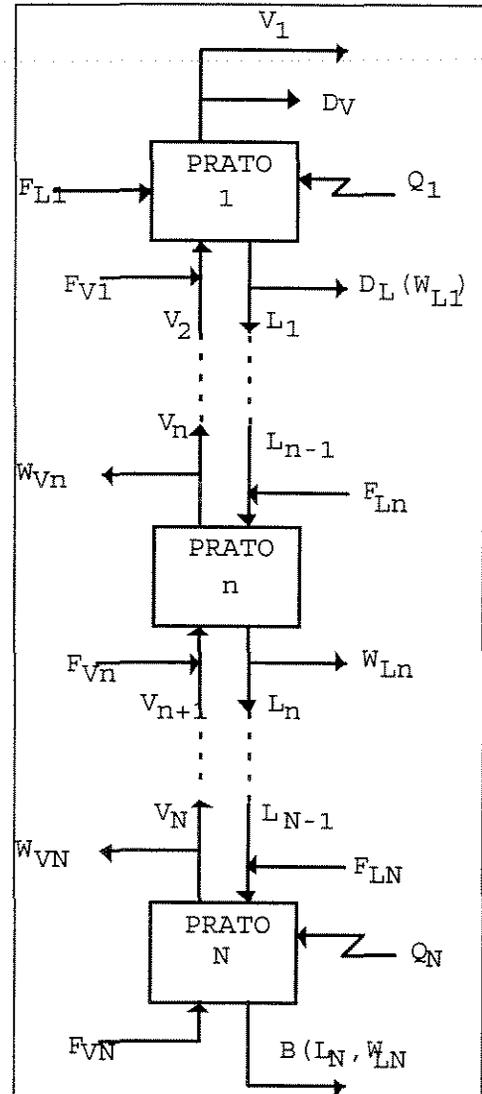


Figura 3.1 - Diagrama esquemático da coluna

A seguir são apresentadas as equações da modelagem matemática baseadas no modelo de coluna mostrado na Figura 3.1.

Equação do balanço de massa total (BMT) por prato

$$V_{n+1} = L_n + M_{Tn} \quad (3.1)$$

onde:

$$M_{Tn} = \sum_{k=1}^n (W_{Lk} + W_{Vk} - F_{Lk} - F_{Vk}) \quad (3.2)$$

Equação de balanço de massa por componente (BMC) em cada estágio, onde n (n=2,3,...,N-1)

$$-l_{i,n-1} + \tilde{I}_{i,n} + \tilde{V}_{i,n} + V_{i,n+1} = f_{i,n} \quad (3.3)$$

onde:

$$f_{i,n} = X_{F_{i,n}} F_{L_n} + Y_{F_{i,n}} F_{V_n} \quad (3.4)$$

$$\tilde{I}_{i,n} = l_{i,n} + W_{L_{i,n}} \quad (3.5)$$

$$\tilde{V}_{i,n} = v_{i,n} + W_{V_{i,n}} \quad (3.6)$$

Equação do balanço de energia (EC)

$$-\sum_i l_{i,n-1} \tilde{h}_{i,n-1} + \sum_i \tilde{I}_{i,n} \tilde{h}_{i,n} + \sum_i \tilde{V}_{i,n} \tilde{H}_{i,n} - \sum_i v_{i,n+1} \tilde{H}_{i,n+1} = Q_{Tn} \quad (3.7)$$

onde:

$$Q_{Tn} = Q_n + h_{F_n} + F_{L_n} + H_{F_n} F_{V_n} \quad (3.8)$$

$$\tilde{h}_{i,n} = \tilde{h}_{i,n}(\tilde{X}_n, T_n, P_n) \quad (3.9)$$

$$\tilde{H}_{i,n} = \tilde{H}_{i,n}(\tilde{Y}_n, T_n, P_n) \quad (3.10)$$

Equação que descreve o equilíbrio de fases (EF)

$$Y_{i,n} = K_{i,n} X_{i,n} \quad (3.11)$$

onde:

$$K_{i,n} = K_{i,n}(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_n, T_n, P_n) \quad (3.12)$$

Equações constitutivas das frações molares das fases vapor (FMFV) e líquida (FMFL)

$$\begin{aligned} \sum_i X_{i,n} &= 1 \\ \sum_i Y_{i,n} &= 1 \end{aligned} \quad (3.13)$$

Equação do ponto de bolha (PB), obtida da combinação das equações EF e FMFV

$$\sum_i K_{i,n} X_{i,n} = 1 \quad (3.14)$$

As equações descritas anteriormente apresentam um alto grau de não-linearidade e com uma forte interdependência entre si. Logo, a maioria dos métodos rigorosos utilizados para a solução destas equações são baseados em aproximações sucessivas da solução exata.

Segundo **Boston e Sullivan (1974)** existem quatro tipos de métodos numéricos rigorosos para solucionar as equações descritas anteriormente: os métodos da classe A, B, C e D. O critério para classificar o método está na forma de como são escolhidas as variáveis para as substituições sucessivas. Segundo os mesmos autores, os melhores métodos são aqueles incluídos na classe B. Como consequência, por serem os mais promissores, também são os que têm recebido maiores atenções por parte dos pesquisadores.

Os métodos da classe B usam a temperatura do estágio e a vazão das fases entre os estágios como as variáveis para as sucessivas aproximações. Logo, escolhendo-se a vazão de uma das fases, a outra fase é imediatamente obtida através das equações BMT. No caso de solução de comportamento ideal, o conhecimento destas variáveis é suficiente para resolver as equações BMC para todos os estágios simultaneamente. Por esta proposta, as equações BMC são modificadas substituindo as EF para eliminar as frações molares da fase vapor (ou líquida) ou a vazão por componente. Resolvendo as equações BMC, a temperatura de cada estágio e as vazões da fase vapor (ou líquida) entre cada estágio são calculadas através das equações de PB (Ponto de bolha) ou PO (ponto de orvalho) e EC.

Apesar de fornecerem ótimos resultados, os métodos da classe B apresentam problemas de convergência quando as estimativas iniciais da temperatura do estágio e da vazão da fase vapor (ou líquida) estiverem muito distante da solução exata.

Para contornar este problema, **Boston e Sullivan (1974)** desenvolveram um novo algoritmo baseado em uma nova definição que introduz no modelo, parâmetros de energia e volatilidade. Além dos dois parâmetros anteriores, um terceiro parâmetro foi definido para cada estágio como uma única combinação da vazão das fases líquida e da fase vapor e a temperatura. Segundo os autores, a vantagem do uso destas variáveis é que mesmo partindo de estimativas muito ruins para a temperatura do estágio e da vazão da fase vapor (ou líquida) é possível obter ótimas estimativas iniciais para os parâmetros de energia e de volatilidade. O método de Broyden quase-Newton (**Broyden, 1965**) foi utilizado para o cálculo iterativo dos parâmetros, onde verificou-se uma rápida convergência e uma excepcional estabilidade. Este algoritmo é utilizado no programa ASPEN PLUS.

3.3 AVALIAÇÃO DO COMPORTAMENTO OPERACIONAL DA COLUNA

Neste capítulo será feita uma análise do comportamento dos parâmetros operacionais da coluna em estudo. Em virtude da ampla flexibilidade operacional, é quase impossível analisar as várias configurações possíveis em uma coluna de destilação, como por exemplo, alteração das razões de refluxo, do prato de carga, das retiradas laterais, e as variações na vazão e na temperatura da corrente de carga, etc. Devido à impossibilidade prática de se realizar o estudo de uma forma ampla e englobando os diversos aspectos de operação, decidiu-se analisar alguns parâmetros operacionais, de tal forma que o estudo torna-se factível, porém sem perder a generalidade.

A seguir serão descritas as alterações realizadas nos parâmetros operacionais do sistema, tomando por base a descrição física da coluna existente:

- Uma única alimentação no estado líquido subresfriado, cuja composição e vazão molar, temperatura e pressão são fornecidas em cada configuração analisada;
- Composição da carga constante;
- Temperatura da carga constante;
- Coluna sem retiradas laterais;
- Eficiência de Murphree de 75% em cada prato;
- Condensador total no topo;
- A pressão no topo da coluna foi fixada em $1,1 \text{ Kgf/cm}^2$ e no fundo a pressão foi estimada $1,25 \text{ Kgf/cm}^2$. A pressão nos demais pratos foi estabelecida através de uma distribuição linear entre as pressões de topo e fundo.

Definidas as condições operacionais básicas da coluna, foram criadas várias configurações utilizando-se de diversas combinações entre diferentes razões de refluxo, vazão de alimentação e carga térmica do refeedor com o objetivo de verificar a sensibilidade das variáveis de processo a partir de perturbações realizadas no sistema. Estas perturbações foram escolhidas partindo do princípio que isto sempre ocorre no dia-a-dia da unidade.

A faixa estabelecida para os parâmetros descritos na Tabela 3.1 foi definida a partir de um levantamento de dados operacionais de uma coluna. Além destes dados nos fornecer uma imagem muito próximo da realidade, eles são suficientes para a análise da recompressão de vapor que é o objetivo principal deste trabalho.

Para um melhor entendimento dos gráficos, o prato 0 (zero) representa o condensador da coluna e o prato 21 (vinte e um) representa o refeedor.

Em virtude da configuração 01 ser a condição operacional mais desejada, ela vai ser utilizada como referência para a análise comparativa com as demais configurações.

Tabela 3.1 - Configurações básicas para o estudo

Configuração	Razão de refluxo	Vazão de carga (Kmol/h)	Calor removido (MMKcal/h)	Carga térmica (MMKcal/h)
01	6,0	85,0	0,83	0,84
02	4,0	85,0	0,83	0,84
03	6,0	102,0	0,82	0,84
04	4,0	102,0	0,82	0,84
05	6,0	85,0	0,99	1,01
06	4,0	85,0	0,99	1,01
07	6,0	102,0	0,99	1,01
08	4,0	102,0	0,99	1,01

3.3.1 Perfil de Temperatura

Para a análise do comportamento do perfil de temperatura ao longo da coluna, foram escolhidas as configurações 01, 02 e 05 da Tabela 3.1. Elaborou-se dois gráficos do tipo temperatura versus número do prato, com o objetivo de não só analisar o perfil de temperatura para cada configuração, como também analisar as mudanças ocorridas quando se perturba o sistema.

Na Figura 3.2 são representados dois perfis de temperatura da coluna para duas razões de refluxo distintas, a partir das configurações 01 e 02. Analisando o comportamento da temperatura no gráfico, observa-se um comportamento curvilíneo pouco acentuado em todo o perfil, excetuado-se apenas nas proximidades do prato de alimentação, tanto para a razão de refluxo de 6,0 quanto para a razão de refluxo de 4,0. Isto demonstra que a variação da razão de refluxo não provoca pontos de descontinuidade, ou seja, ela mantém o mesmo comportamento da razão anterior, apenas provoca uma pequena alteração no valor da temperatura. Uma outra

constatação é que o perfil de temperatura é pouco influenciado pela mudança na razão de refluxo.

Na Figura 3.3 são representados os perfis de temperatura da coluna para duas cargas térmicas diferentes. Para esta análise utilizou-se as configurações 01 e 05. Novamente observa-se que o perfil de temperatura pouco foi influenciado por esta perturbação. Apesar de manter um comportamento bastante semelhante à variação da razão de refluxo, as diferenças de temperatura em cada prato são praticamente desprezíveis quando se altera a carga térmica do refeedor.

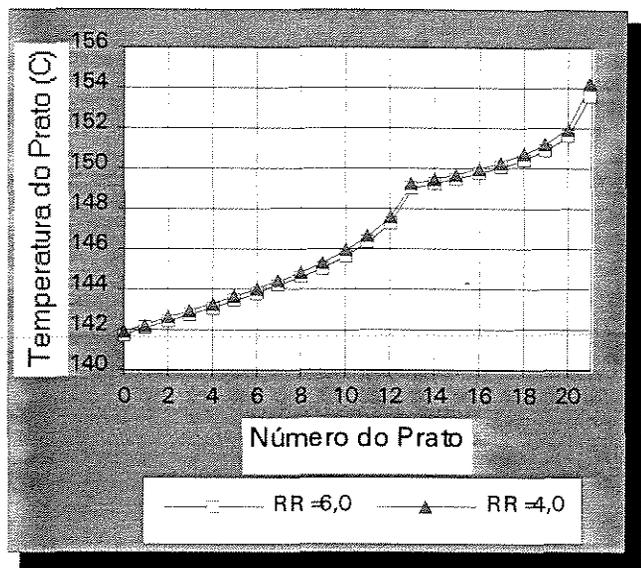


Figura 3.2 - Perfil de temperatura para duas razões de refluxo

3.3.2 Perfil de Composição

O perfil de composição foi analisado escolhendo-se na Tabela 3.1 as configurações 01, 02, 03 e 05. Neste caso, além de analisar o comportamento da composição com a razão de refluxo e a carga térmica, também foi feito uma análise alterando-se a vazão de carga. Por ser o componente mais sensível às perturbações de processo, o etil-benzeno foi escolhido para a representação gráfica.

Na Figura 3.4 é mostrado o perfil de composição do etil-benzeno em cada prato da coluna para as configurações 01 e 02. Observa-se uma

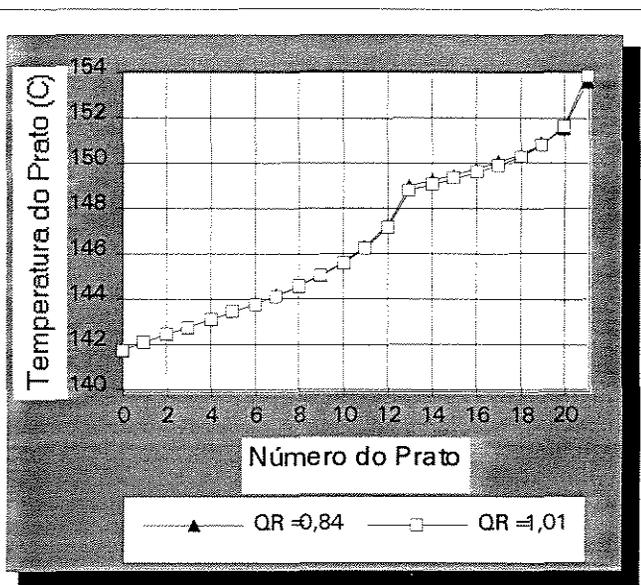


Figura 3.3 - Perfil de temperatura para duas cargas térmicas

sensível variação nos percentuais de etil-benzeno nas proximidades do topo da coluna, enquanto que na seção de fundo esta diferença é bem menor. Operacionalmente é desejada a retirada do etil-benzeno pelo topo da coluna, logo a razão de refluxo de 6,0 é mais apropriada para a separação do etil-benzeno. Novamente observa-se um ponto de inflexão nas curvas nas proximidades do prato de carga.

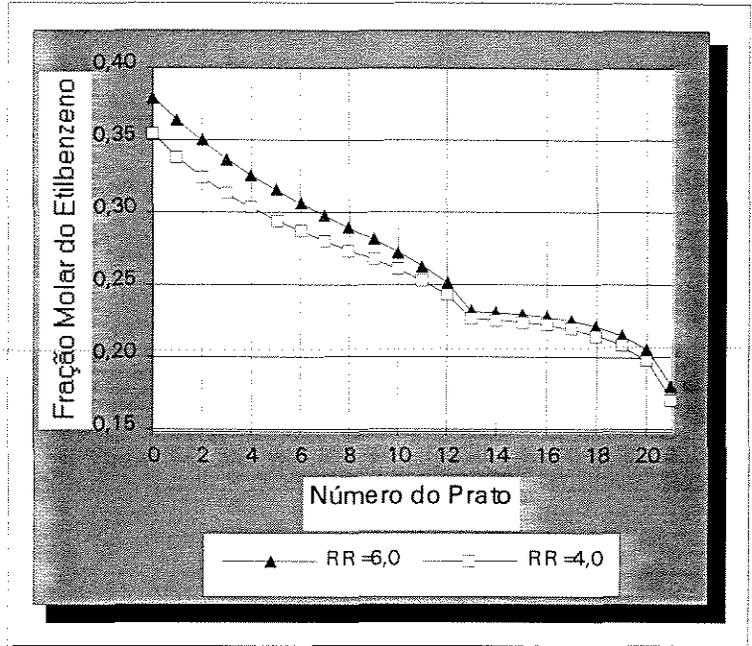


Figura 3.4 - Composição do etilbenzeno para duas razões de refluxo

Na Figura 3.5 é traçada a curva de composição do etil-benzeno para duas vazões de alimentação da coluna, configurações 01 e 03. Observando os perfis de cada vazão, na seção de retificação o perfil de composição para ambas vazões é perfeitamente idêntico, não apresenta variações. Na seção de esgotamento observa-se uma tênue diferença no valor da composição. Isto demonstra que o aumento de vazão e a manutenção dos demais parâmetros fixos, não traz qualquer benefício em termos de aumento de pureza do etil-benzeno.

A Figura 3.6 mostra o perfil de composição do etil-benzeno para duas cargas térmicas distintas mantendo os demais parâmetros de razão de refluxo e vazão de carga, configurações 01 e 05. Observa-se novamente que na seção de retificação não se registrou qualquer alteração, enquanto que na seção de esgotamento verifica-se uma pequena diferença apesar de um

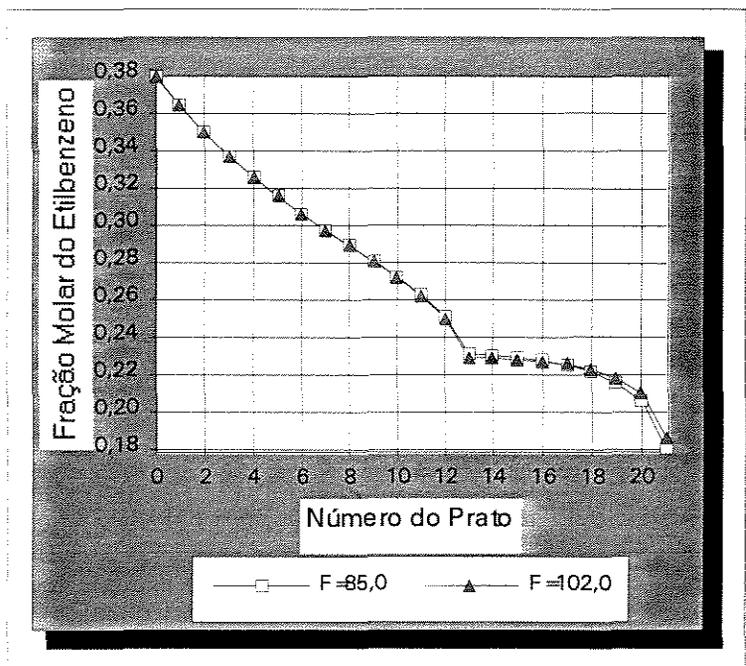


Figura 3.5 - Composição de etilbenzeno para duas vazões de carga

incremento de 20% na carga térmica.

Analisando o comportamento da fração molar de etil-benzeno na coluna para as perturbações na razão de refluxo, carga fresca e carga térmica, apenas a razão de refluxo apresenta sensibilidade significativa, as demais praticamente não alteraram as variáveis do processo.

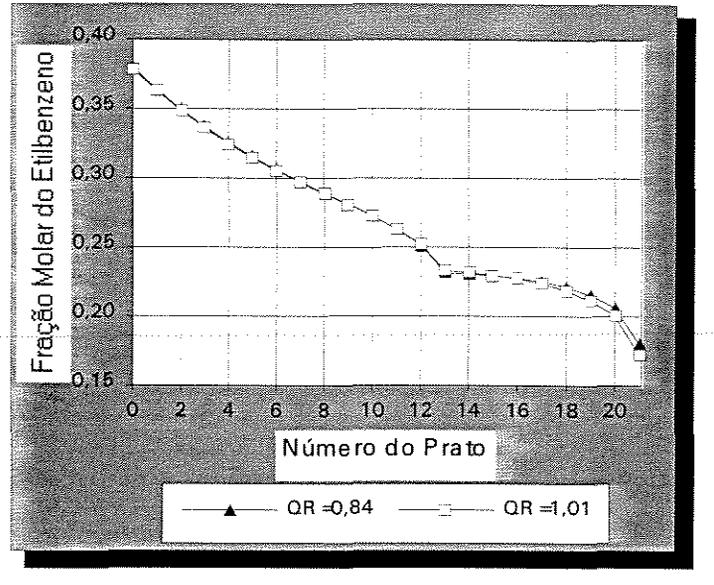


Figura 3.6 - Composição do etilbenzeno para duas cargas térmicas

3.3.3 Perfil de Vazão de Líquido

O perfil da vazão de líquido foi analisado para as mesmas configurações definidas no item anterior.

A Figura 3.7 mostra o perfil de vazão de líquido interno da coluna a partir das configurações 01 e 02. Os gráficos mostram um comportamento linear na seção de esgotamento e uma pequena diferença no valor absoluto da vazão. No prato de carga verifica-se uma mudança brusca na vazão em ambos os gráficos e na seção de esgotamento as curvas voltam a ter o comportamento linear. É importante verificar que a vazão de líquido para a razão de refluxo de 6,0 é sempre maior que no caso da razão de refluxo de 4,0.

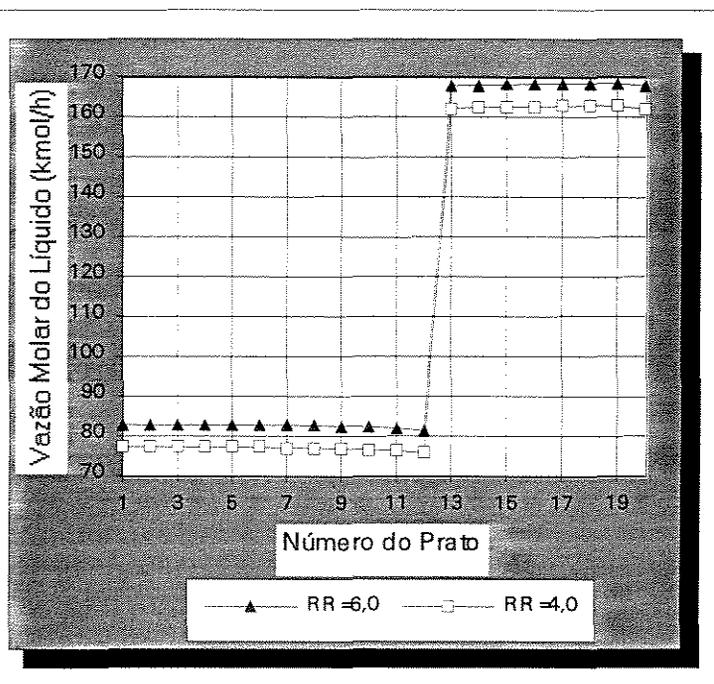


Figura 3.7 - Vazão molar de líquido para duas razões de refluxo

A Figura 3.8 foi obtida utilizando-se as configurações 01 e

03. Verifica-se novamente o mesmo comportamento linear na seção de retificação e de esgotamento, mantendo um salto brusco no prato de carga. Porém neste caso, na seção de retificação, a vazão é idêntica para ambas as vazões de carga fresca, enquanto que na seção de esgotamento verifica-se um aumento na vazão de líquido. Isto quer dizer que o aumento da carga não altera o fator de separação.

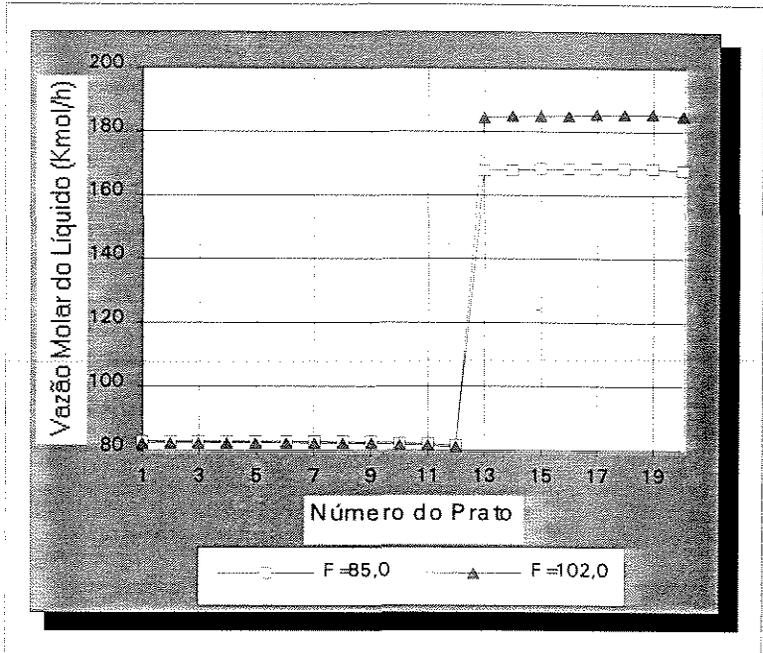


Figura 3.8 - Vazão do líquido para duas vazões de carga

Na Figura 3.9 é mostrada a variação da vazão molar de líquido para duas cargas térmicas diferenciadas conforme configurações 01 e 05. O comportamento das curvas é muito semelhante ao comportamento observado no caso onde se alterou a razão de refluxo. Neste caso, deve-se tomar cuidados com a hidráulica (inundação) da coluna quando a carga térmica for muito alta.

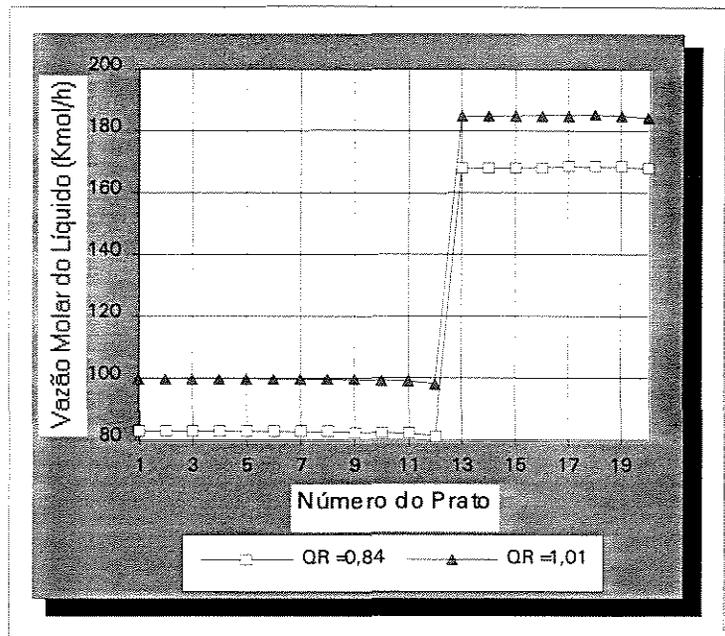


Figura 3.9 - Vazão molar do líquido para duas cargas térmicas

3.3.4 Análise Comparativa Entre a Energia Removida Pelo Condensador e Requerida Pelo Refervedor.

A separação de compostos através da destilação é energeticamente intensiva, necessitando-se de fornecer energia para a vaporização no refervedor. Por outro lado, nas

colunas convencionais, é requerido também uma remoção de energia do vapor de topo para sua condensação. Essa energia que se retira no condensador, geralmente não é aproveitada eficientemente, apesar do potencial energético ser considerável.

Nesta seção analisaremos os aspectos inerentes ao balanço energético da destilação, comparando a energia removida no condensador (QC) e requerida pelo refeedor (QR) em termos da razão QR/QC, para as configurações descritas na Tabela 3.1.

Os resultados apresentados na Tabela 3.2 indicam que a razão QR/QC praticamente não é alterada com as perturbações realizadas no sistema. Isto quer dizer que uma variação na razão de refluxo, na carga térmica do refeedor e na vazão de carga da coluna não provocam mudanças significativas na relação QR/QC. Esta é uma informação de extrema importância quando se quer estudar a conveniência do uso da recompressão de vapor em um determinado sistema.

Tabela 3.2 - Razão QR/QC

Configuração	01	02	03	04	05	06	07	08
QR/QC	1,01	1,01	1,02	1,02	1,02	1,02	1,02	1,02

Em face dos resultados mostrados na Tabela 3.2 e devido as características descritas anteriormente, pode-se concluir que o sistema estudado é altamente propício para o uso da recompressão de vapor, pois apresenta pequena variação quando o sistema é perturbado. Além desta característica, a relação QR/QC é praticamente igual a 1 (um), que significa que a energia necessária no refeedor é muito semelhante a energia disponível na corrente de vapor do topo da coluna. Isto implica que a energia a ser acrescida ao sistema via compressor será muito pequena, como consequência, um baixo consumo de energia no compressor e também uma diminuição no investimento para a aquisição do mesmo, isto tudo leva a termos um processo altamente rentável economicamente com a aplicação da técnica de recompressão de vapor.

3.3.5 Parâmetros que Influenciam a Energia Requerida no Refervedor

Como o objetivo principal deste trabalho é a análise da técnica de recompressão de vapor em uma coluna de destilação, faz-se necessário termos conhecimento preciso da energia requerida no refervedor em várias situações operacionais.

Nesta seção, estudaremos o efeito da vazão de alimentação e da razão de refluxo sobre a energia requerida no refervedor. Outros fatores tais como temperatura da alimentação e composição da vazão de alimentação que também influenciam a carga térmica, não vão ser analisados em virtude do sistema em estudo praticamente não apresentar variações nestes parâmetros.

3.3.5.1 Efeito da vazão de carga de alimentação (F)

A energia requerida no refervedor foi obtida a partir de duas configurações. Na primeira foi fixado a razão de refluxo em 4,0 e o percentual molar do etilbenzeno na corrente do destilado de topo em 0,3544. Diversas simulações foram feitas alterando-se a vazão de carga da coluna e observando o comportamento da carga térmica no refervedor. Logo em seguida realizou-se o mesmo procedimento, porém com a razão de refluxo de 6,0.

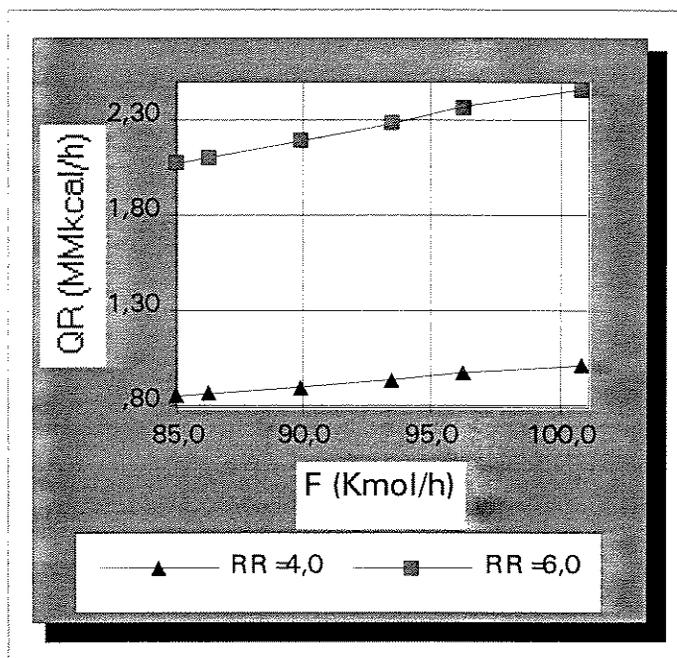


Figura 3.10 - Energia requerida pelo refervedor

A Figura 3.10 mostra que a energia requerida no refervedor (QR), é diretamente dependente da vazão de alimentação qualquer que seja a sua configuração, isto é, obedece às equações do tipo:

$$QR = aF \quad \text{ou} \quad (3.15)$$

$$\ln QR = \ln a + \ln F$$

onde: a é uma constante e F a vazão de alimentação.

Graficamente pode-se observar que, independente da configuração, o coeficiente angular da reta é aproximadamente igual à unidade. Por outro lado, o coeficiente linear a varia com as condições operacionais e depende portanto da razão de refluxo.

Estes resultados mostram-se coerentes na medida em que a vazão molar da alimentação só influi no diâmetro da coluna, considerando não haver perdas de energia pela parede da coluna.

3.3.5.2 Efeito da razão de refluxo (RR)

No item anterior foi analisado o efeito da vazão de carga na energia requerida no refeedor para duas razões de refluxo. Na análise dos resultados, observa-se que além da vazão de alimentação, a razão de refluxo também provoca mudanças na carga térmica do refeedor, como seria de se esperar.

Na Figura 3.11 podemos observar que a energia requerida no refeedor é altamente influenciada pela razão de refluxo.

Um aumento de 50% na razão de refluxo exige uma elevação de cerca de 3 vezes na energia a ser acrescentada ao refeedor. Neste caso também foi mantida a fração molar de 0,3544 do etil-benzeno na corrente do destilado, verificou-se também que um aumento da vazão de alimentação ($F=102,0$) para as mesmas condições descritas acima

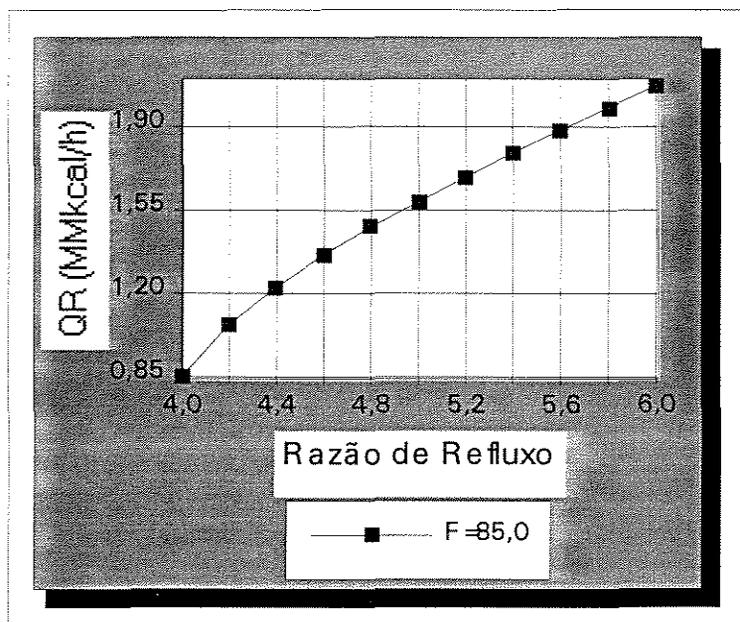


Figura 3.11 - Energia requerida pelo refeedor

não provocou variações no valor da carga térmica do refeedor.

3.4 CONCLUSÃO

De acordo com os resultados apresentados neste capítulo, pode-se considerar que o comportamento das variáveis do sistema são propícias para o uso da técnica de recompressão de vapor. A viabilidade de uma mudança do sistema convencional por um sistema com recompressão é justificada devido aos seguintes aspectos:

- O vapor que sai do topo da coluna tem uma carga térmica elevadíssima, sendo compatível com a energia requerida no refeedor;
- O perfil de temperatura praticamente não sofre alteração quando o sistema é perturbado;
- O perfil da composição do etil-benzeno ao longo da coluna não apresenta modificações significativas a variações nas condições operacionais;
- A diferença de temperatura entre o topo e fundo é compatível para a recompressão;
- Pressão baixa de operação da coluna.

CAPÍTULO 4

RECOMPRESSÃO NO ESTADO ESTACIONÁRIO

4.1 INTRODUÇÃO

A destilação convencional através de colunas é nitidamente uma das maiores consumidoras de energia na indústria moderna. Estima-se que cerca de 25 a 40% de toda a energia consumida nas indústrias químicas e petroquímicas é usada nos processos de separação. Em virtude do aumento dos custos energéticos, um grande número de plantas estão sendo reexaminadas para tornar o processo mais eficiente energeticamente conforme **Becker e Zakak (1985 a)**. Em muitos casos, este consumo exagerado pode ser reduzido pela introdução de algumas melhorias práticas. Por exemplo:

- Preaquecimento da carga com uma corrente de produto;
- Redução do refluxo com o aumento do número de estágios;
- Instalação de pratos mais eficientes;
- Instalação de recheio de alta eficiência;
- Uso de injetores (redução da pressão, destilação a vácuo);
- Melhorias no sistema de controle;
- Isolantes térmicos de melhor qualidade;
- Integração térmica, etc.

As técnicas descritas acima são extensamente difundidas nas unidades fabris. São técnicas simples, de fácil aplicação, porém de ganho energético relativamente baixo quando comparadas com a técnica da recompressão de vapor.

A bomba de calor, como também é conhecida a recompressão de vapor, permite recuperar a energia que normalmente se dissipa no condensador através da utilização de um compressor. Existem vários tipos de sistemas de recompressão de vapor, que serão descritos neste capítulo. Além da descrição esquemática dos tipos de recompressão, será apresentado também os critérios técnicos envolvendo os aspectos de processo, de operação, econômicos e estratégicos necessários para a tomada de decisão quanto a implantação da recompressão de vapor. Também será discutido neste capítulo os diversos tipos de compressores utilizados como bomba de calor, a termodinâmica envolvida no estudo da recompressão e o balanço de energia. Por fim serão apresentados os critérios utilizados para a definição da técnica de recompressão mais apropriada para uma coluna fracionadora de aromáticos e um estudo comparativo do ganho energético obtido após a implantação da bomba de calor.

processo mais econômico. No entanto, a aplicação da recompressão indireta permitirá sempre a eliminação do vapor d'água no refeedor. Na recompressão direta nem sempre isto é possível.

Existem alguns sistemas que limitam significativamente a utilização da recompressão direta de vapor, como nos processos onde o produto de topo é inadequado para a compressão, produtos que se decompõem facilmente, compostos precursores de polímeros e substâncias corrosivas.

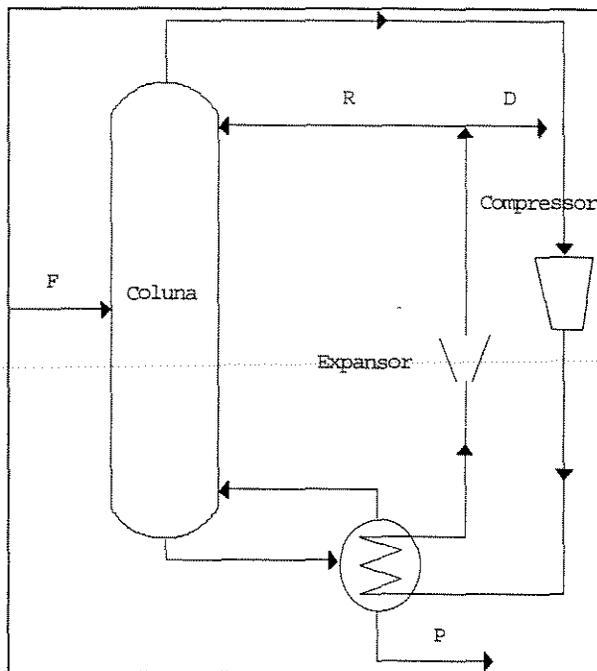


Figura 4.2 - Recompressão direta de vapor

4.2.3 Outros Tipos

Existem outros arranjos que são variações dos dois tipos anteriores descritos e estão apresentados nas Figuras 4.3, 4.4 e 4.5.

Na Figura 4.3 é apresentado um arranjo em que se inclui na recompressão direta de vapor, uma operação de preaquecimento da alimentação, utilizando o fluido comprimido que sai do refeedor. A aplicação desta alternativa de recompressão poderá ser vantajosa, relativamente à recompressão simples, dependendo do estado térmico da alimentação (F) e do potencial energético do fluido comprimido. É conveniente lembrar que este fluido, depois de preaquecer a alimentação, deverá sofrer uma expansão para retornar à coluna como refluxo em condições muito próximas ao líquido saturado.

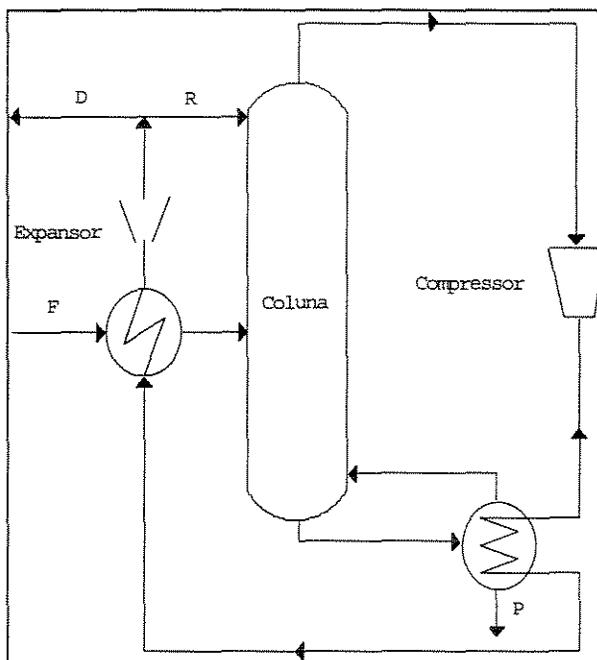


Figura 4.3 - Recompressão direta com preaquecimento da alimentação

A Figura 4.4 mostra um arranjo que realiza uma combinação de processos alternativos para recuperação de energia: a técnica de recompressão de vapor e a utilização de condensadores e refeedores intermediários. A aplicação deste tipo de arranjo requer um controle muito sofisticado.

O fluxograma de um outro tipo de recompressão pode ser visto na Figura 4.5. Como se pode notar, este arranjo é uma combinação de recompressão direta e indireta de vapor, com algumas modificações: o vapor de topo é comprimido para preaquecer a

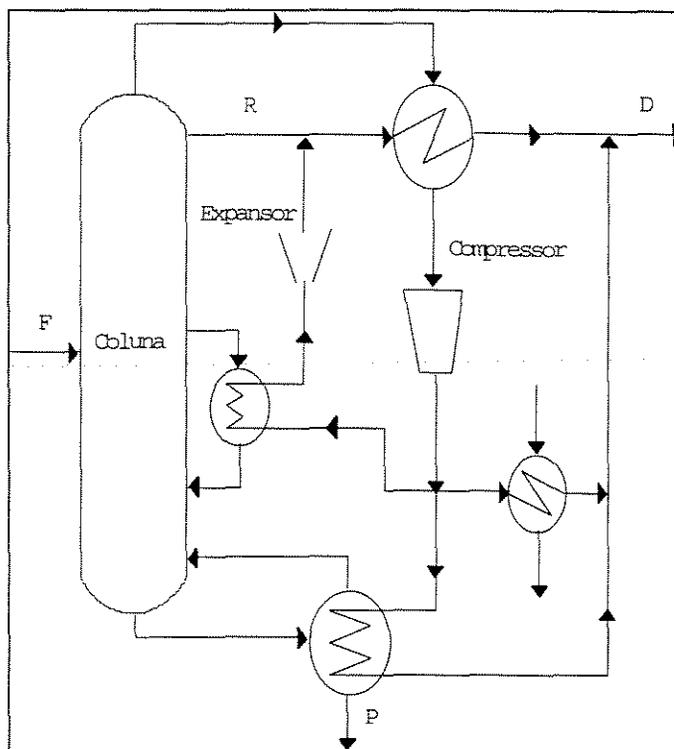


Figura 4.4 - Recompressão direta com condensador e refeedor intermediários

alimentação e um fluido auxiliar é utilizado para fornecer a energia requerida no refeedor.

Como foi visto, a recompressão de vapor pode ser feita de diversas formas. Além das cinco configurações descritas, é possível criar novos arranjos operacionais e a escolha do tipo de configuração mais adequada dependerá do tipo de processo, da legislação ambiental, da disponibilidade de utilidades, etc. Nos itens a seguir analisaremos entre os diversos tipos de recompressão de vapor qual é o mais apropriado para separação de xilenos mistos.

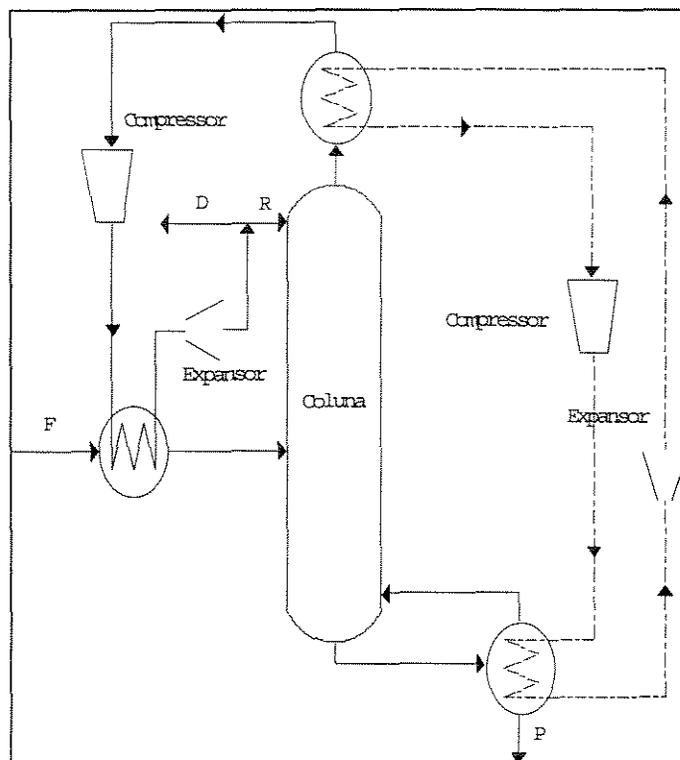
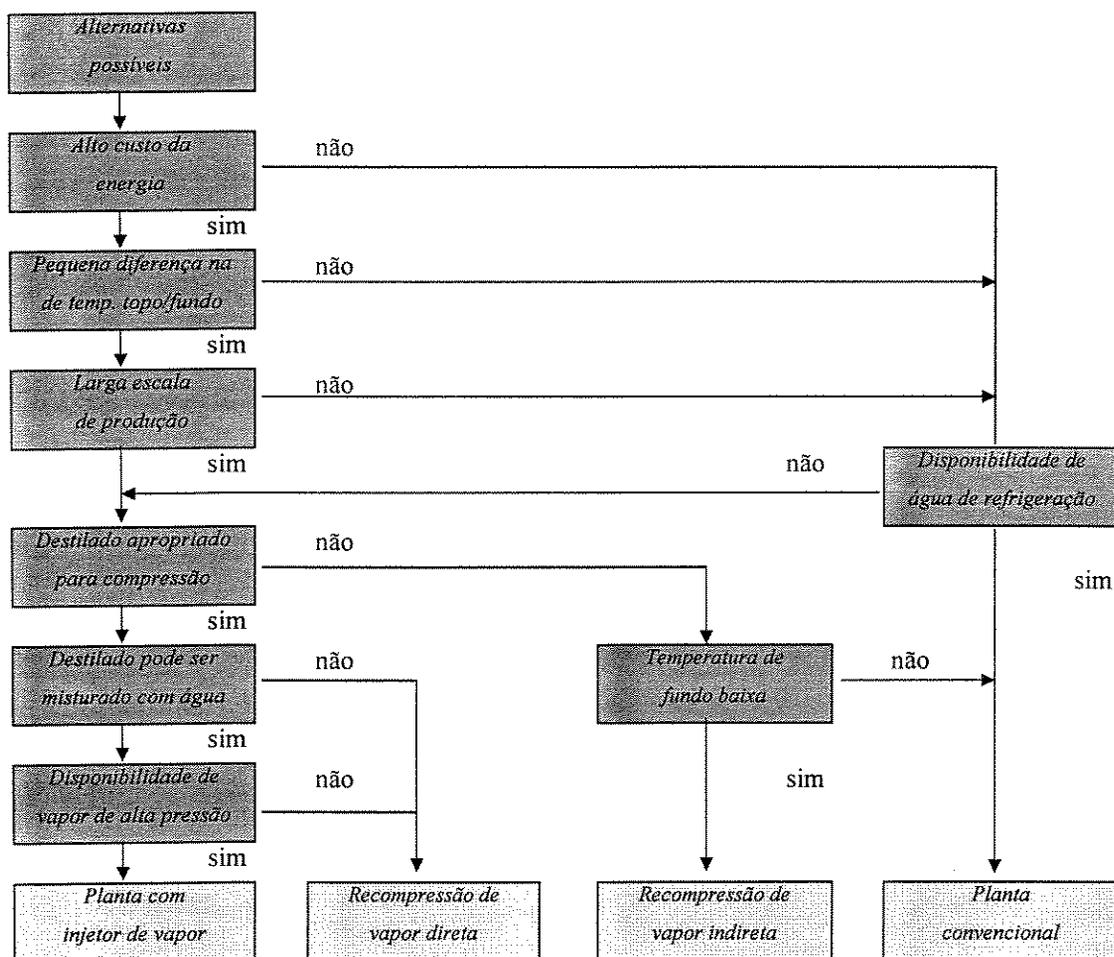


Figura 4.5 - Recompressão mista

4.3 CRITÉRIOS PARA APLICAÇÃO DA RECOMPRESSÃO DE VAPOR

A aplicação da recompressão de vapor em um processo é uma decisão que deve ser tomada levando em consideração critérios de processo, operacionais, disponibilidade de utilidades, escala de produção, meio ambiente, custos, etc. Não existe um padrão a ser aplicado a todos os processos; para a recompressão de vapor cada caso é um caso. A viabilidade econômica para a instalação de uma bomba de calor é definida mediante um arranjo destes critérios, podendo um mesmo processo ser inviabilizado em uma determinada planta, enquanto que em uma outra planta, ela ser altamente favorável. A seguir será apresentado um diagrama de blocos, mostrando os principais critérios que devem ser analisados para a instalação de uma bomba de calor.

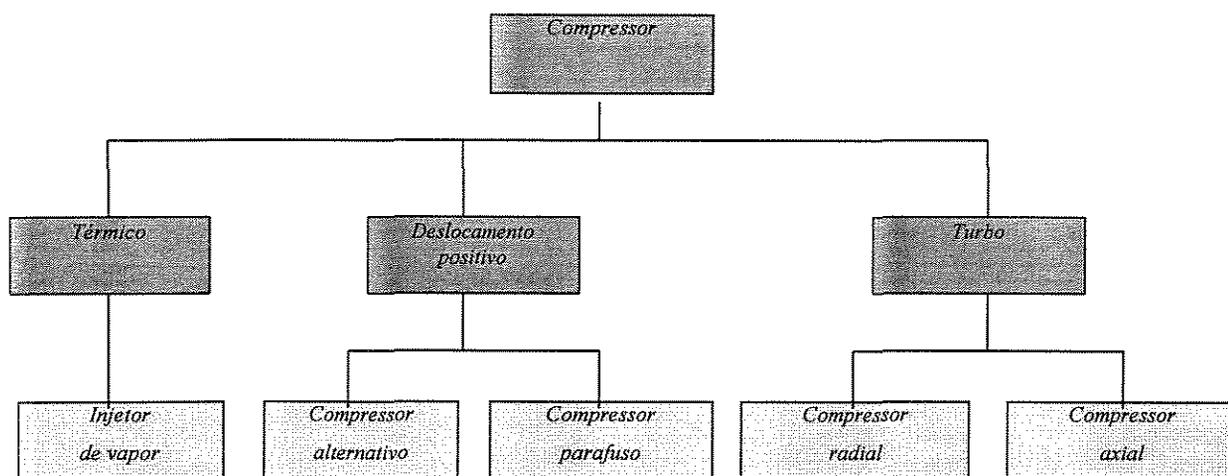


A razão fundamental para se instalar uma bomba de calor é sem dúvida a economia de energia obtida, através da recuperação do calor retirado no topo. Dependendo da situação

apresentada, uma avaliação preliminar da relação custo/benefício, levando apenas em consideração o valor do investimento e economia de energia proporcionada, fornecerá os dados necessários para a decisão sobre o empreendimento.

4.4 TIPOS DE COMPRESSORES E MOTORES

Teoricamente vários tipos de compressores podem ser utilizados para as bombas de calor, conforme mostra o diagrama a seguir, **Coker (1994)**:



4.4.1 Injetor de Vapor

Este tipo de compressão tem uso extremamente limitado, pois o destilado é misturado com água, o que não é permitido pela maioria dos processos industriais.

4.4.2 Compressor Alternativo

Este tipo de compressor é normalmente utilizado quando a taxa de recompressão exigida pelo processo é alta, porém com baixa vazão de vapor. Sua utilização mais comum é na recompressão indireta em pequenas unidades.

4.4.3 Compressor Parafuso

O compressor de parafuso é bastante apropriado para sistemas onde o vapor apresenta umidade. Para outros sistemas a utilização do compressor de parafuso é limitada em função do seu alto custo.

4.4.4 Compressor Radial

Muitos sistemas de recompressão de vapor são equipados com turbocompressores. A vantagem da utilização deste tipo de compressor é a alta taxa de recompressão obtida por estágio. São compressores de simples operação, de baixo custo e que podem ser utilizados para quase todas as aplicações.

O turbo-blowers é um tipo de compressor radial de dois estágios. Geralmente apresenta custos relativamente baixo e pode ser fabricado na maioria dos materiais soldáveis, como por exemplo o aço carbono.

Seus rotores são produzidos para sistemas de baixa velocidade, apropriados para processos com baixa taxa de recompressão ou para vapores de alto peso molecular. Segundo o fabricante de compressores SULZER, este é o mais apropriado para vapores de xilenos mistos.

4.4.5 Compressor Axial

Os compressores axiais de multiestágios são os mais apropriado para sistemas geradores de altas vazões de vapor no topo. Apesar deste tipo de compressor ser extremamente eficiente, tem como desvantagem o seu alto custo. A alternativa encontrada para baratear os custos tem sido a utilização de compressores radiais de um único estágio.

4.4.6 Motores

A maioria das bombas de calor utilizadas em colunas de destilação são acionadas por motores elétricos; apesar da maioria dos processos utilizarem o motor elétrico, o acionamento

também pode ser feito por turbinas a vapor d'água. A escolha a ser adotada dependerá de uma avaliação econômica, onde deverá ser levada em consideração o custo gerado pelo consumo de vapor e o custo do consumo de energia elétrica.

4.5 ANÁLISE ENERGÉTICA DA RECOMPRESSÃO

Entre as diversas formas de utilização da bomba de calor, a recompressão de vapor de forma direta é a mais simples tecnicamente; além disto, também é a técnica que necessita do menor investimento inicial. Para o nosso sistema em estudo, ou seja, uma corrente de hidrocarbonetos aromáticos, denominada de xilenos mistos e que apresenta as características de ser um produto pouco corrosivo, não forma polímeros e apresenta uma baixa vazão de vapor, a recompressão direta é a técnica mais apropriada para este sistema.

Nesta seção será feita uma análise do comportamento termodinâmico da recompressão direta de vapor. Além desta análise, também será feita a modelagem matemática do sistema de recompressão, abordando principalmente, as variáveis que influenciam significativamente no consumo de energia.

4.5.1 Termodinâmica da Recompressão

O ciclo da recompressão de vapor pode ser melhor explicado com o diagrama pressão-entalpia ou temperatura-entropia como mostram as Figuras 4.6 e 4.7, conforme **Meili e Stuecheli (1987)**.

Na Figura 4.6 existem quatro pontos: Ponto 1, vapor saturado, correspondente ao produto de topo da coluna. Em um sistema simples, o próximo passo seria a recompressão.

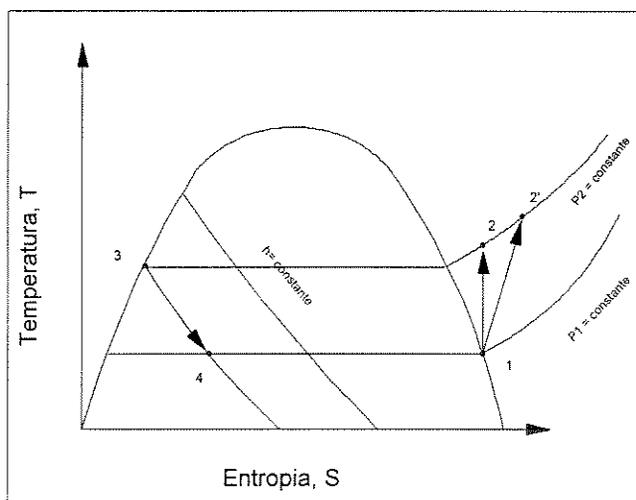


Figura 4.6 - Ciclo ideal de compressão de vapor

Uma compressão adiabática seguindo a linha de entropia constante até chegar ao Ponto 2. No refeedor, o vapor condensa e libera energia correspondente a diferença de entalpia entre os Pontos 2 e 3. Após esta etapa, o condensado retorna a coluna como refluxo, após ter sofrido uma redução de pressão. A expansão isoentálpica para atingir o Ponto 4 é feita através de um vaso de flash ou diretamente pela introdução do refluxo no topo da coluna, formando um pouco de vapor adicional que retorna ao compressor.

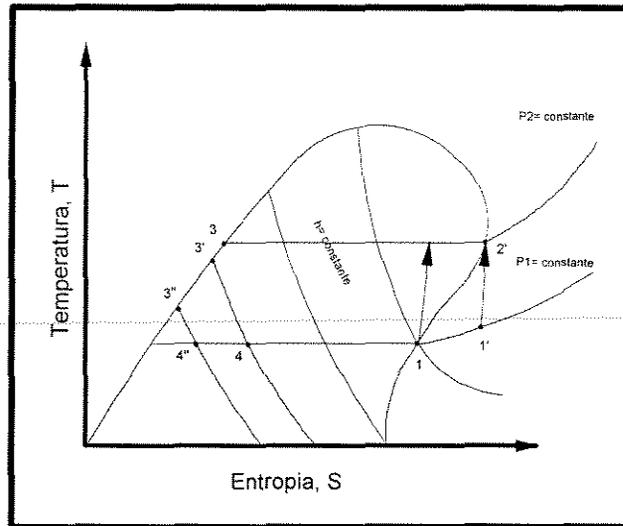


Figura 4.7 - Ciclo real da compressão de vapor

Porém, na realidade, o ciclo de recompressão necessita de alguns ajustes:

1. A recompressão real é geralmente politrópica, portanto menos eficiente que a adiabática. A recompressão segue a linha (1)-(2');
2. Vapores de alto peso molecular apresentam uma curva de equilíbrio semelhante à Figura 4.7. Neste caso é necessário fazer um preaquecimento antes da recompressão para evitar a entrada de duas fases no compressor, o que causará problemas ao compressor. Isto pode ser feito através de uma troca de calor com o refluxo.

O ciclo é:

Superaquecimento do ponto:	1 para 1'
Compressão entre	1' e 2'
Condensação de	2' para 3
Subresfriamento do refluxo de	3 para 3'
Expansão entre	3' e 4

A entalpia específica trocada no condensador é maior que a do sistema sem superaquecimento.

Para fechar o balanço de energia, é necessário remover a energia a mais introduzida pelo superaquecimento. Isto poderá ser feito através do resfriamento do refluxo (na Figura 4.7 - percurso 3'-3''). Por fim, a expansão é feita do Ponto 3'' para o Ponto 4''.

Nos ciclos mostrados nas Figuras 4.6 e 4.7 não são consideradas as perdas de pressão nos dutos de vapor, como também as perdas decorrentes de um isolamento inadequado.

4.5.2 Balanço de Energia

Assumindo que o balanço de massa e as condições operacionais para a coluna são conhecidas, pode-se modelar o balanço de energia. Conforme a Figura 4.8, temos:

$$Fh_F - Dh_D - Bh_B + P_{sh} + Q_L - \Delta Q = 0 \quad (4.1)$$

Os termos desconhecidos na equação 4.1 são o termo P_{sh} referente à potência introduzida no compressor e o termo ΔQ referente à quantidade de energia a ser retirada do sistema via um equipamento auxiliar de resfriamento. A perda Q_L pode ser estimada.

Para a coluna convencional, conforme Figura 4.9, o balanço de energia para a seção de fundo é o seguinte:

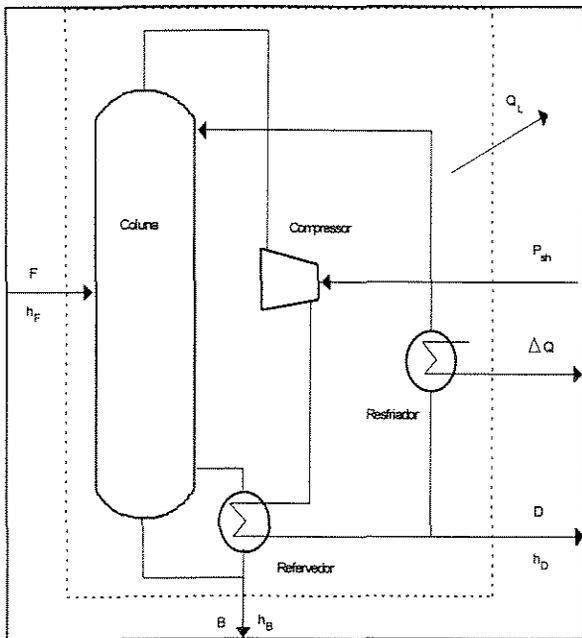


Figura 4.8 - Balanço Global de Energia para uma Coluna de Destilação com Recompressão de vapor

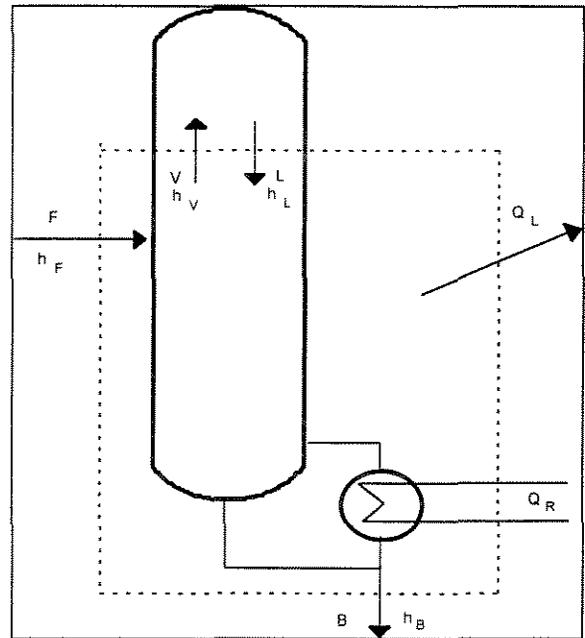


Figura 4.9 - Balanço de Energia da Seção de Fundo de uma Coluna Convencional

$$Fh_F - Bh_B - Vh_V + Lh_L + Q_R - Q_L = 0 \quad (4.2)$$

$$Q_R = Q_L - Fh_F + Bh_B + Vh_V - Lh_L \quad (4.3)$$

O aumento de entalpia decorrente da compressão é calculada pela seguinte equação:

$$\Delta h_{\text{eff}} = \frac{n}{n-1} \frac{Z_1 RT_1}{n_{\text{pol}} M_w} \left[\pi^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right] \quad (4.4)$$

onde π é a relação entre a pressão de descarga e a pressão de sucção (**Comp. Handbook 1979**).

A entalpia após a compressão é dada por:

$$h_2 = h_1 + \Delta h_{\text{eff}} \quad (4.5)$$

O balanço de energia para o refeedor é obtido através do fluxo de massa que passa através do compressor e do refeedor:

$$M = \frac{Q_R}{h_2 - h_c} \quad (4.6)$$

A potência utilizada no compressor:

$$P_{\text{sh}} = M \Delta h_{\text{eff}} \quad (4.7)$$

Para calcular a energia realmente consumida no compressor, a Equação (4.7) deverá ser ajustada para levar em consideração as eficiências de selagem, mancais, eixo, engrenagens e até mesmo para o sistema de acionamento.

Através da Equação (4.1), pode-se determinar o excesso de energia que necessita ser removido:

$$\Delta Q = Fh_F - Dh_D - Bh_B + P_{\text{sh}} + Q_L \quad (4.8)$$

Para muitos sistemas, o valor positivo de ΔQ indica que a energia excedente deve ser removida; porém quando o valor é negativo, energia adicional deve ser fornecida ao sistema.

Para efeito de comparação da eficiência da recompressão de vapor, o coeficiente de desempenho C.O.P. pode ser utilizado. C.O.P. = Q_R / P_{sh} , isto é, o calor fornecido para o refeedor dividido pela energia consumida pelo compressor. O valor típico para C.O.P. varia no intervalo de 6 a 15.

4.5.3 Energia Consumida no Compressor

Em sistema de destilação com recompressão de vapor, o sistema de acionamento do compressor é a fonte de maior consumo energético, por isto torna-se necessário o conhecimento

deste consumo para os cálculos da viabilidade econômica da recompressão. Para as condições de gás ideal, a capacidade calorífica do gás é representada por $C_p=C_p^0$.

$$\Delta h = h_2 - h_1 = C_p^0 (T_2 - T_1) \tag{4.9}$$

se a mudança de estado é isentrópica:

$$\Delta h = \int_1^2 v dp = \frac{\kappa}{\kappa - 1} \frac{RT}{M_w} \left[\left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\kappa - 1}{\kappa}} - 1 \right] \tag{4.10}$$

onde κ é a relação entre a capacidade calorífica a pressão constante sobre a capacidade calorífica a volume constante.

Na realidade, a maioria dos sistemas de destilação são não ideais, portanto a Equação (4.10) necessita ser modificada para representar os casos reais:

- Geralmente, a compressão não é isentrópica, mas sim, politrópica, logo a equação precisa ser modificada;

$$\frac{n}{n - 1} = n_{pol} \frac{\kappa}{\kappa - 1} \tag{4.11}$$

onde n_{pol} é a eficiência politrópica.

- O vapor saturado a alta pressão apresenta desvios em relação ao comportamento ideal, tornando-se necessário a utilização do fator de compressibilidade Z (**Comp. Handbook 1979**).

Introduzindo as considerações acima citadas na Equação (4.10) temos:

$$\Delta h_{eff} = \frac{n}{n - 1} \frac{Z_1 RT_1}{\eta_{pol} M_w} \left[\pi^{\frac{n - 1}{n}} - 1 \right] \tag{4.12}$$

A quantidade de energia usada no sistema de acionamento aumenta a entalpia do gás:

$$P_{sh} = M \Delta h_{eff} \tag{4.13}$$

Energia consumida no sistema de acionamento do compressor:

$$P_{acionamento} = \frac{1}{\eta_{motor} \eta_{engrenagem} \eta_{selagem} \eta_{mancais}} P_{sh} \tag{4.14}$$

As várias eficiências dependem do tamanho, tipo e fabricante do compressor.

4.5.4 Razão de Compressão

A Equação (4.12) mostra que π é crucial para a potência requerida no compressor. Quatro fatores influenciam diretamente a razão de compressão:

1. O produto de topo e de fundo têm composições e ponto de ebulição diferentes. Para uma temperatura fixa no fundo da coluna, existe uma diferença na pressão de vapor, Δp_b . Este Δp_b é determinado pelo processo e pode ser alterado apenas pela variações operacionais;
2. A perda de carga ao longo da coluna, Δp_c , depende principalmente das características internas da coluna, número de estágios e condições operacionais. Pratos típicos tem uma perda de carga de 0,005 Kgf/cm²/estágio, enquanto que o recheio estruturado tem uma perda de apenas 0,0005 Kgf/cm²/estágio;
3. Para o refeedor é necessário uma fonte de energia para proporcionar a diferença de temperatura. Isto pode ser expresso através da equação da pressão de vapor como uma diferença de pressão, Δp_r . Para os sistemas com recompressão de vapor, as diferenças de temperatura nos refeedores são em geral muito menores que no caso das colunas convencionais. Uma diferença de temperatura de 8,0 a 15,0 °C é aplicada à maioria dos casos;
4. Também existe a perda de carga nos dutos de vapor, trocadores de calor, válvulas de controle e outros instrumentos, Δp_p .

Portanto, a pressão que o compressor deve fornecer ao sistema é:

$$\Delta p = \Delta p_b + \Delta p_c + \Delta p_r + \Delta p_p \quad (4.15)$$

e a razão de compressão:

$$\pi = \frac{p_2}{p_1} = \frac{p_1 + \Delta p}{p_1} \quad (4.16)$$

4.6 RECOMPRESSÃO DE VAPOR EM COLUNAS DE XILENOS MISTOS

Nesta seção será feita a análise energética da aplicação da técnica de recompressão de vapor na coluna fracionadora de xilenos mistos apresentada no capítulo anterior. O objetivo

principal desta análise restringiu-se a aspectos meramente energéticos; não são levados em consideração aspectos inerentes a: investimento, escala de produção, operacionalidade, viabilidade econômica, etc.

4.6.1 Configuração da Coluna com Recompressão

No Capítulo 3 foi feito um estudo do comportamento estacionário da coluna na sua forma convencional. Nesta seção estudaremos o comportamento da coluna, no estado estacionário, porém utilizando a técnica da recompressão direta de vapor. Para o estudo da recompressão escolheu-se a Configuração 01 por ser a condição operacional mais desejada.

Utilizando os resultados da simulação realizada no Capítulo 3 foi possível determinar os parâmetros normais de operação da coluna: vazão, temperatura, pressão e carga térmica, como mostra a Figura 4.10. O objetivo a partir de agora é de construir um modelo de recompressão de vapor que obtenha os mesmos resultados do modelo convencional.

Inicialmente usou-se o modelo clássico de recompressão direta de vapor, conforme mostrado na revisão da literatura. A Figura 4.11 mostra este modelo onde o condensador da coluna é

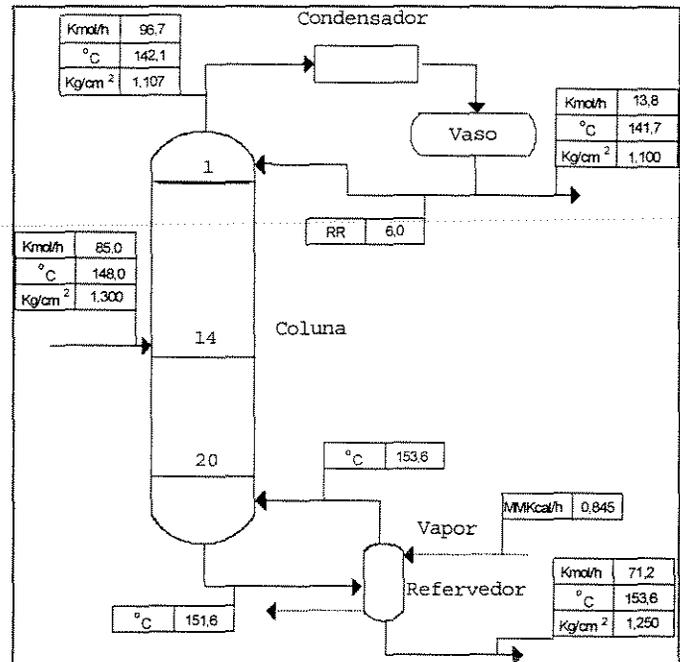


Figura 4.10 - Coluna Convencional

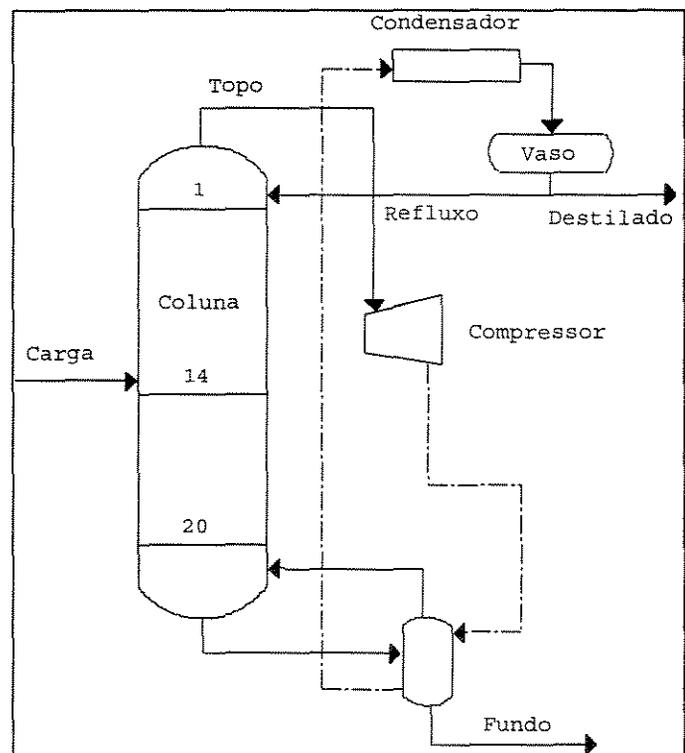


Figura 4.11 - Coluna com Recompressão Direta de Vapor no Modelo Clássico

retirado e em seu lugar é introduzido um compressor.

Este modelo apresentou sérios problemas de convergência, pois a corrente de topo da coluna é constituída de hidrocarbonetos de alto peso molecular (xilenos mistos) e sai do topo em estado de vapor saturado. Logo a fase vapor pode se liquefazer com qualquer perturbação do sistema.

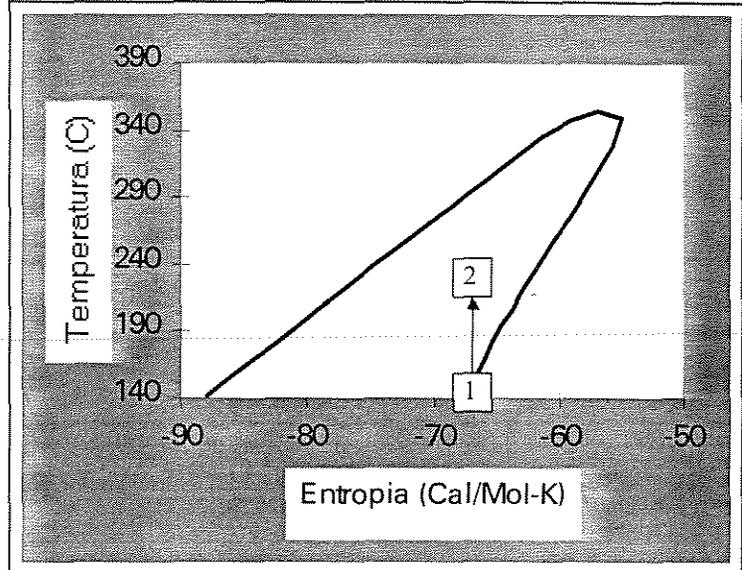


Figura 4.12 - Ciclo de recompressão da mistura de xilenos

Na Figura 4.12 é mostrado o diagrama Entropia vs. Temperatura para a corrente de topo da coluna. O Ponto 1 representado no gráfico corresponde a corrente de vapor do topo da coluna, onde a temperatura é de 142,1 °C e a pressão é de 1,107 Kgf/cm² (abs). Ao ser comprimida, o equilíbrio é deslocado e parte da massa de hidrocarboneto retorna à fase líquida, como visualizado na Figura 4.12. Este fenômeno tem importância crucial para a escolha do tipo de compressor a ser utilizado.

A literatura (Coker 1994, Becker e Zakak 1985c) e os fabricantes de compressores indicam a utilização de compressores de deslocamento positivo para sistemas com fase líquida dispersa, principalmente os do tipo parafuso; porém alertam para o alto custo deste tipo de equipamento. Os compressores mais apropriados para os sistemas de recompressão de vapor são os compressores do tipo turbo-blowers, porém a presença de líquido inviabiliza a sua utilização.

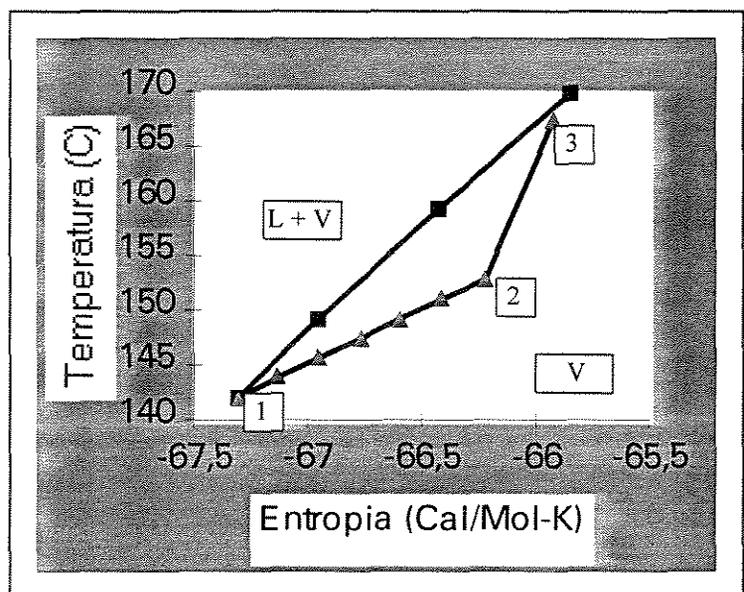


Figura 4.13 - Diagrama de preaquecimento da corrente de topo

Para evitar a presença de

líquido na corrente de vapor é necessário o superaquecimento da corrente, assim sendo, a curva temperatura versus entropia é deslocada da região de equilíbrio de fases para uma região onde só existe a fase vapor. A Figura 4.13 mostra o comportamento desta curva. A linha marcada com símbolos quadrados representa a separação entre a região de duas fases, líquido-vapor, e a região de uma única fase, vapor. A linha marcada por símbolos triangulares representa o superaquecimento e a recompressão.

O Ponto 1 representa a corrente de topo que sai da coluna com uma temperatura de 142,1 °C. Com o superaquecimento, a temperatura da corrente aumenta até atingir 152,0 °C (Ponto 2); após alcançar esta temperatura, a corrente é então comprimida até atingir a temperatura de 168,0 °C (Ponto 3). Desta forma foi possível realizar a recompressão sem a presença da fase líquida.

Porém para atingir este objetivo, a configuração clássica utilizada na recompressão direta foi alterada, introduziu-se no sistema um novo trocador de calor entre o topo da coluna e o compressor e foi utilizado o excesso de energia existente na corrente comprimida que sai do refeedor como fonte fornecedora de energia para o superaquecimento.

A Figura 4.14 mostra o novo esquema de recompressão. Nela é mostrado um fluxograma de processo da coluna separadora de xilenos com recompressão de vapor e com os principais equipamentos.

O sistema foi otimizado para atingir as mesmas condições de separação da coluna na forma convencional, ou seja, a mesma temperatura da corrente de fundo, topo e de refluxo; a mesma vazão da corrente de topo e de fundo e a mesma carga térmica no refeedor. As linhas contínuas representam as correntes de processo existentes e as linhas pontilhadas representam o

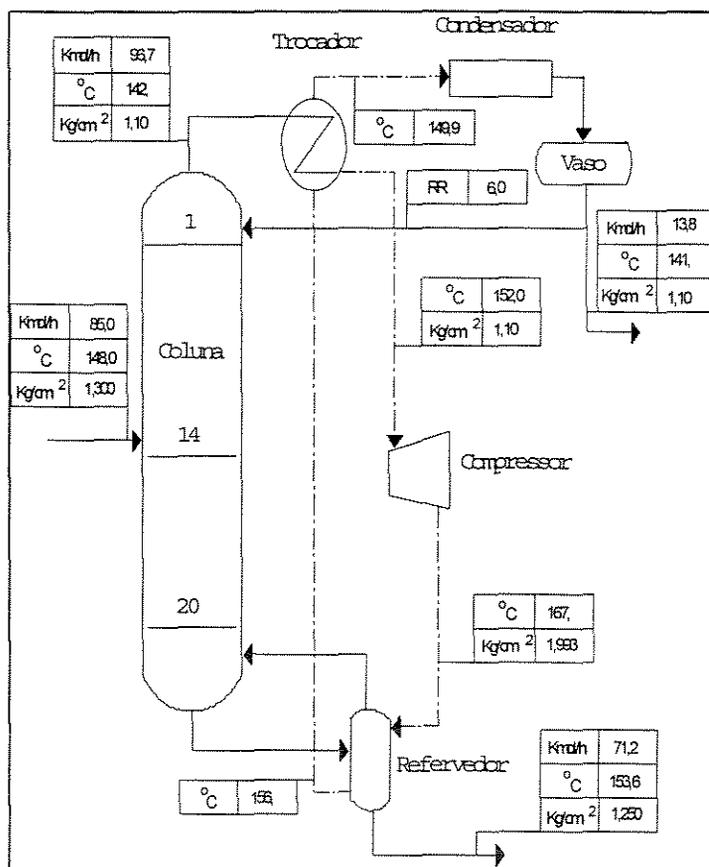


Figura 4.14 Configuração utilizada na recompressão de vapor

sistema de recompressão. Na figura pode-se observar ainda as variações de temperatura de cada corrente após cada operação unitária e a variação de pressão obtida após a compressão.

4.6.2 Temperatura Ótima de Superaquecimento e Recompressão

Na seção anterior foi analisado uma configuração alternativa para viabilizar a recompressão de compostos orgânicos de alto peso molecular, como por exemplo, os xilenos mistos. Porém, durante os estudos de simulação, o sistema mostrou-se extremamente sensível a variações de temperatura na corrente de topo, e em muitas situações não foi possível atingir a convergência.

Estas dificuldades de convergência foram originadas devido a variação da temperatura após o superaquecimento; com a temperatura variando a cada iteração, a temperatura da corrente após a compressão também variava perturbando todo o sistema. Para contornar esta flutuação, adotou-se uma temperatura fixa de superaquecimento e posteriormente foi feita a otimização do sistema.

Para determinar a temperatura mínima de recompressão, como pode ser observado na Figura 4.14, não foi levado em consideração o critério de ΔT utilizado em projeto de trocadores de calor. Segundo os projetistas a diferença de temperatura entre a corrente quente e a corrente fria não deve ser inferior a 10,0 °C, porém com a moderna tecnologia de tubos aletados, esta diferença pode ser menor. O sistema foi otimizado até um limite de ΔT no trocador de 4,0 °C.

As temperaturas ótimas de recompressão e a de superaquecimento foram encontradas iterativamente segundo o algoritmo abaixo descrito. Para um melhor entendimento, acompanhar cada passo do algoritmo na Figura 4.14.

1. Inicialmente estimar uma temperatura para o superaquecimento;
2. Comprimir a corrente superaquecida;
3. Construir uma curva da temperatura vs. entropia para observar se houve formação da fase líquida durante a compressão;
4. Se existe fase líquida, aumentar a temperatura de superaquecimento e retornar à etapa 2;
5. Verificar se a energia da corrente comprimida é suficiente para fornecer a energia necessária no refeedor;

6. Se não for suficiente, aumentar a taxa de recompressão e retornar à etapa 2;
7. Verificar se energia remanescente da corrente após o refeedor é suficiente para elevar a temperatura da corrente de topo até a temperatura de superaquecimento, estimada nas etapas anteriores;
8. Temperatura de superaquecimento obtida, sistema otimizado.

A otimização energética foi obtida para o caso definido como configuração 01 no Capítulo 3. Na Figura 4.10 é apresentado o balanço de massa para esta mesma configuração, porém para a coluna na forma convencional. Comparando os resultados apresentados nas Figuras 4.10 e 4.14, observa-se que os valores da vazão de carga, das vazões dos produtos de topo e de fundo; das temperatura do topo e do fundo, das pressões do topo e do fundo entre a coluna convencional e a coluna com recompressão de vapor, são absolutamente iguais. Logo, é possível substituir completamente o vapor utilizado no refeedor por um sistema de compressão.

4.6.3 Balanço de Massa e Energia

O balanço de massa global da coluna não é alterado após a implantação do sistema de recompressão; pois o estudo foi conduzido com o objetivo de determinar qual seria o consumo de energia necessário para obter o mesmo fator de separação do sistema convencional.

Nas Tabelas 4.1a e 4.1.b são mostrados o balanço de massa global e o balanço por componente, em moles e em massa, respectivamente. Quanto ao balanço de energia, a quantidade de energia requerida no refeedor é a mesma nos dois casos, porém muda completamente a fonte fornecedora. Como não há mudança na composição e na vazão das correntes de carga, de topo e de fundo, também não existe mudança na energia interna de cada corrente.

A Figura 4.15 apresenta um fluxograma muito semelhante ao apresentado na Figura 4.14, porém além dos dados referentes à vazão, temperatura e pressão, foi acrescentado para algumas correntes o valor de entalpia referente àquela corrente. O objetivo deste procedimento é de facilitar a compreensão do cálculo do balanço de energia.

Tabela 4.1.a - Balanço de Massa (em Moles)

	Carga		Topo		Fundo	
	Kmol/h	%Molar	Kmol/h	%Molar	Kmol/h	%Molar
Etil-benzeno	18,08	0,2127	5,25	0,3799	12,83	0,1802
P-xileno	11,79	0,1387	2,57	0,1860	9,22	0,1295
M-xileno	25,94	0,3052	5,09	0,3683	20,85	0,2929
O-xileno	11,53	0,1356	0,91	0,0658	10,62	0,1493
124-Trimetil-benzeno	17,66	0,2078	-	-	17,66	0,2481
Total	85,00	1,0000	13,82	1,0000	71,18	1,0000

Tabela 4.1.b - Balanço de Massa (em Massa)

	Carga		Topo		Fundo	
	Kg/h	%Massa	Kg/h	%Massa	Kg/h	%Massa
Etil-benzeno	1919,3	0,2070	556,8	0,3797	1362,5	0,1746
P-xileno	1251,7	0,1350	272,7	0,1859	979,0	0,1254
M-xileno	2753,8	0,2970	540,3	0,3684	2213,5	0,2836
O-xileno	1223,9	0,1320	96,4	0,0657	1127,5	0,1444
124-tri-metil-benzeno	2123,3	0,2290	0,4	0,0003	2122,9	0,2720
Total	9272,0	1,0000	1466,6	1,0000	7805,4	1,0000

A corrente 1 sai da coluna com a temperatura de 142,1°C e com entalpia de 0,9261 MMKcal/h. Após ser superaquecida no trocador de calor (corrente 2) alcança uma temperatura de 152,0 °C e aumenta a entalpia para 0,9668 MMKcal/h. A energia necessária para o aquecimento provém da corrente 4; com entalpia de 0,1860 MMKcal/h, ao ser resfriada no trocador, fornece a energia necessária para o aquecimento da corrente 1. A diferença de entalpia entre as correntes 1 e 2 ($0,9668-0,9261=0,0407$), é exatamente a diferença de entalpia entre as correntes 4 e 5 ($0,1861-0,1454=0,0407$).

No refervedor o processo é semelhante ao trocador. A corrente 3 sai do compressor a uma temperatura de 167,5 °C e entalpia de 1,0320 MMKcal/h, ao passar pelo refervedor, transfere calor para a corrente de fundo da coluna elevando a temperatura de 151,6 °C (prato 20) para 153,6 °C. Apesar da pequena diferença de temperatura observado no refervedor da coluna, o consumo de energia é elevado, pois há mudança de fase e a corrente 4 ao sair do refervedor

apresenta temperatura de 156,9 °C e entalpia de apenas 0,1861 MMKcal/h. A diferença de entalpias entre as correntes 3 e 4 é de 0,8459 MMKcal/h, exatamente a quantidade de energia encontrada na simulação do sistema convencional.

4.6.4 Comparação Entre o Sistema com Recompressão e o Sistema Convencional

Nas seções anteriores, foram apresentadas as alterações realizadas sobre a coluna na sua forma convencional para o sistema com bomba de calor, estudou-se o ponto ótimo de operação e as cargas térmicas do sistema de recompressão. Todo este estudo tem como objetivo final determinar a potência consumida no compressor e o custo referente a esta energia.

A potência consumida no motor do compressor está diretamente relacionada com a taxa de recompressão desejada e com a eficiência do compressor; segundo os fabricantes (Sulzer, Elliot, etc.), para compressores politrópicos a eficiência operacional é de 75%.

Na seção 4.6.2 foi analisada qual seria a temperatura de recompressão necessária para que a corrente acumula energia suficiente para atender ao refeedor da coluna e ao preaquecimento da corrente de topo. Operacionalmente esta temperatura foi alcançada aumentando-se a razão de compressão π até atingir o valor de $\pi=1,8$. Isto quer dizer que a pressão de descarga do compressor é 80% maior que a pressão de sucção.

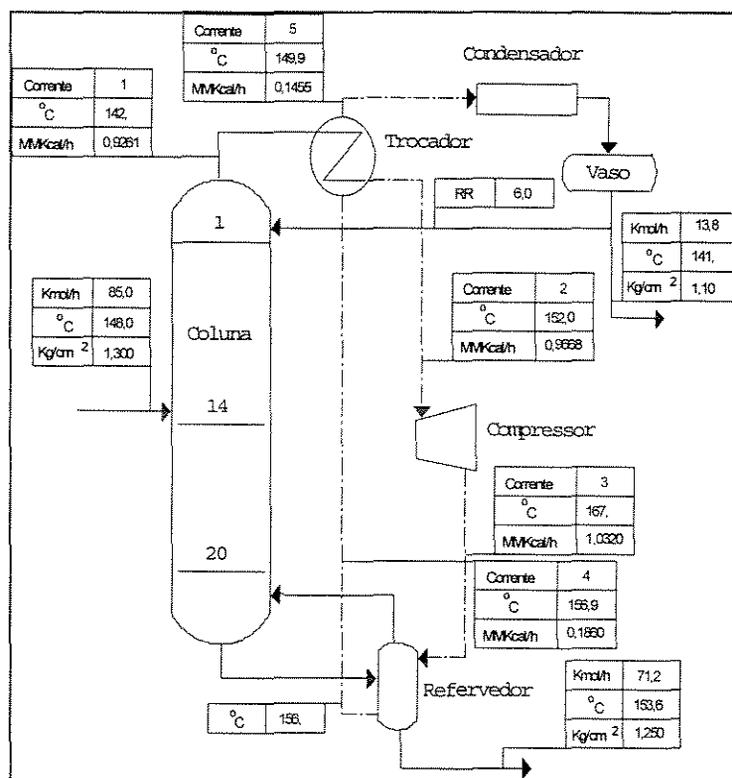


Figura 4.15 - Balanço de massa e energia para a configuração com recompressão a vapor

Uma vez determinada a temperatura da descarga, a razão de compressão, a eficiência do compressor e as propriedades termodinâmicas do fluido, calculou-se a potência consumida. Conforme as equações demonstradas na seção 4.5.3, a potência consumida foi de 75,8 KW.

A partir do conhecimento da potência consumida e da carga térmica utilizada no refervedor no sistema convencional, é possível desenvolver uma análise comparativa entre os custos energéticos de cada sistema. Para efeito de comparação, no sistema convencional, o custo da energia do refervedor foi calculado tomando três bases distintas: energia elétrica, vapor e óleo aquecido.

Para realização deste cálculo, foi necessário inicialmente se determinar uma base de preços para encontrar os custos de cada fonte de energia. Os valores foram estimados baseando-se nos índices e preços praticados pela COPENE no Polo Petroquímico de Camaçari-BA.

- Preço do vapor US\$ 10.0/ton;
- Preço do óleo combustível US\$ 120.0/ton;
- Preço da energia elétrica US\$ 0.05/KW;
- Entalpia de vaporização do vapor 460 Kcal/Kg;
- Poder calorífico inferior (PCI) do óleo combustível 9500 Kcal/Kg;
- Fator operacional de 8400 horas/ano;
- Eficiência do forno de 82,7%.

O custo de cada fonte energética foi encontrado convertendo-se a quantidade de Kcal necessário no refervedor em cada fonte de calor:

1. Custo em vapor $(845911/460) = 1,84$ ton/hora = 18.40 US\$/hora
2. Custo em óleo $(845911/9500/0,827) = 0,108$ ton/hora = 12.92 US\$/hora
3. Custo em energia elétrica $(845911/60/14,33) = 983,84$ Kw/hora = US\$ 49.10 US\$/hora
4. Custo da energia elétrica consumida no compressor = US\$ 3.79 US\$/hora

Analisando a relação sistema convencional/recompressão (ver Tabela 4.2) podemos ter uma idéia da economia proporcionada pela utilização de uma bomba de calor. Esta redução de custo operacional deve ser levada em consideração, não só em novos projetos, como principalmente em estudos de aumento de capacidade e otimização de unidades já existentes.

Tabela 4.2 - Avaliação energética e de custo entre os dois sistemas.

	Convencional			Recompressão
	Energia (Kw)	Vapor (ton/h)	Óleo (ton/h)	Kw
Refervedor (845911 Kcal/h)	983,84	1,84	0,108	-
Compressor	-	-	-	75,78
Custo total US\$/hora	49,10	18,40	12,92	3,79
Custo total US\$/ano	412440,0	154560,0	108528,0	31836,0
Convencional/Recompressão	12,96	4,85	3,41	1

4.6.5 Potência Utilizada e Área de Troca Térmica

A área de troca térmica do refervedor e a energia consumida no motor do compressor estão inversamente relacionadas, ou seja, um aumento da potência no compressor tem como consequência uma área menor do refervedor, e vice-versa, maior área de troca térmica, menor potência requerida. Isto pode ser facilmente compreendido, pois maior potência leva a uma maior razão de compressão e consequentemente maior temperatura. Com o aumento da temperatura, aumenta também o ΔT_{mi} do trocador e o coeficiente global de troca térmica, logo será necessário uma menor área.

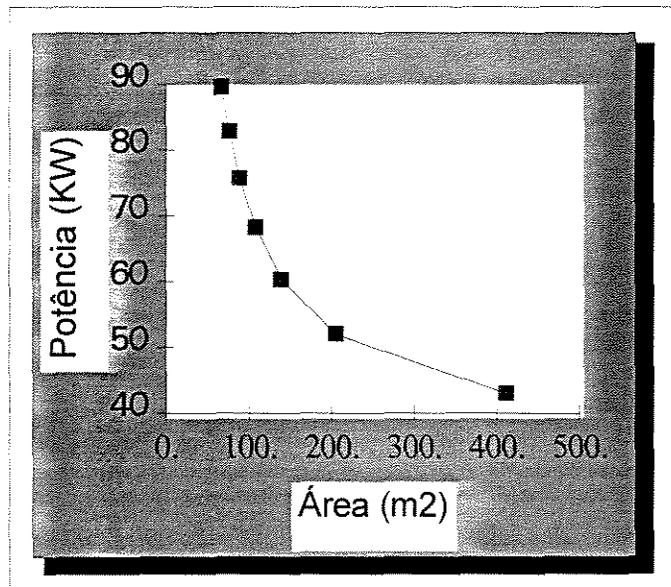


Figura 4.16 - Potência versus Área

A Figura 4.16 mostra o estudo de sensibilidade envolvendo a potência requerida no compressor e a área de troca térmica no refervedor.

4.6.6 Aumento do ΔT no Refervedor versus Potência Utilizada

Na Figura 4.17 é mostrado o comportamento do ΔT de temperatura no refervedor em relação a potência consumida pelo compressor. O ΔT no refervedor é obtido através da diferença

entre a temperatura da corrente comprimida e a temperatura de fundo da coluna. Observando o gráfico verifica-se que o aumento de potência consumida pelo compressor está diretamente relacionado com o aumento de ΔT ; ou seja, quanto maior for o ΔT maior será o consumo de energia, tendo como consequência a diminuição da eficiência térmica da recompressão. Torna-se evidente que em um projeto de recompressão de vapor para uma coluna de destilação, a relação entre a

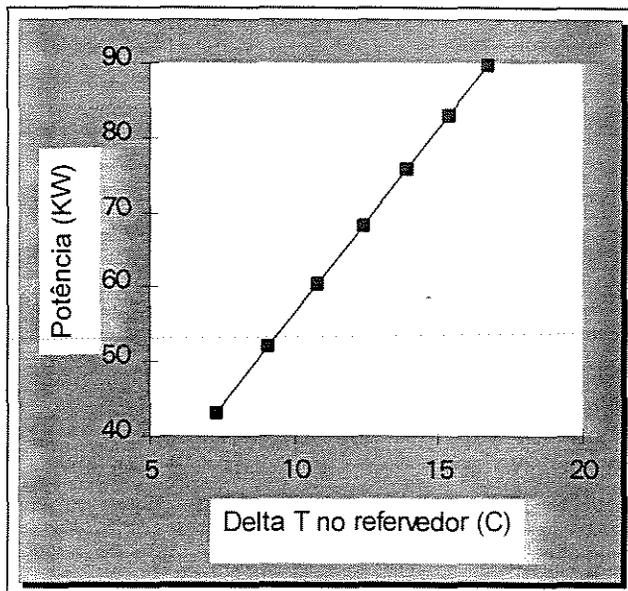


Figura 4.17 - Potência versus Delta T

área de troca térmica do refeedor e a potência consumida no compressor deve ser criteriosamente analisada, levando em consideração principalmente, o investimento inicial e taxa de retorno ao longo dos anos de operação.

4.6.7 Área de Troca Térmica em Relação ao ΔT no Refeedor

Na Figura 4.18 pode-se observar que a relação entre a área de troca térmica e o ΔT no refeedor é inversamente proporcional. Quanto maior for a área do trocador, menor será a diferença de temperatura necessária entre a corrente comprimida e fundo da coluna, e consequentemente, quanto menor for a área de troca térmica, maior será o ΔT .

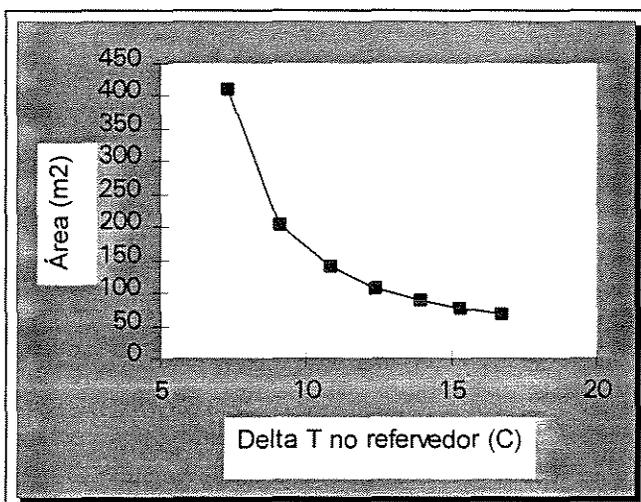


Figura 4.18 - Área versus Delta T no refeedor

4.6.8 Potência no Compressor versus Razão de Compressão

Como última etapa deste capítulo, analisaremos o comportamento da potência consumida em relação à razão de compressão. Este é um parâmetro de extrema importância não só para o estudo da recompressão de vapor, como também no dimensionamento de qualquer tipo de compressor industrial. Na Figura 4.19 observa-se que a razão de compressão está diretamente relacionada com a potência consumida. Quanto maior for a razão de compressão, maior será a

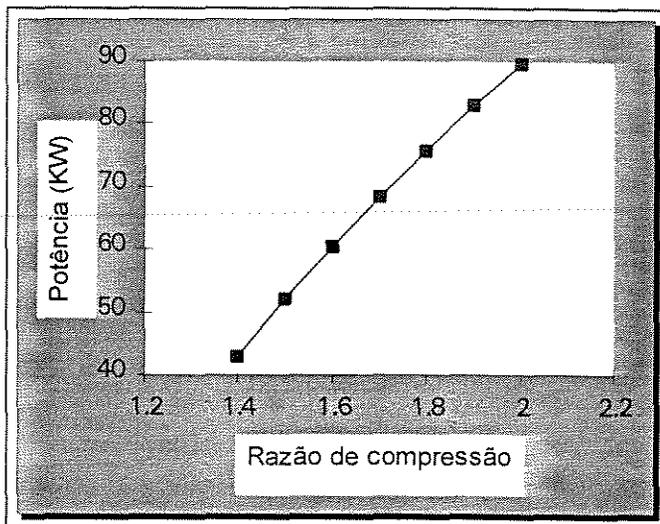


Figura 4.19 - Potência versus razão de compressão

potência consumida. O inverso também é verdadeiro, quanto menor for a necessidade de recompressão, menor será o consumo de energia. Em estudo de recompressão de vapor é extremamente importante se determinar a razão ótima de recompressão, pois este parâmetro otimizado interfere diretamente no consumo de energia, como também no dimensionamento físico do sistema: compressor mais mecanismo de acionamento.

4.7 CONCLUSÃO

A busca da economia de energia em processos petroquímicos é extremamente complexa, pois na sua grande maioria, estes processos estão intrinsecamente integrados e qualquer alteração em um destes processos, pode comprometer a flexibilidade operacional de todas as demais plantas.

A técnica da recompressão de vapor apresenta uma grande vantagem em relação às outras técnicas. Na recompressão o processo é alterado apenas no equipamento responsável pela separação, os demais equipamentos do processo não sofrem qualquer mudança.

Apesar da recompressão de vapor ser uma técnica conceitualmente simples, ela exige conhecimentos dos mais variados. É necessário um estudo detalhado da disponibilidade de utilidades, da escala de produção, das restrições ambientais, da termodinâmica da recompressão, dos tipos de compressores, etc. Em virtude do alto investimento, a recompressão só é aconselhável, para sistemas que se enquadram na descrição feita na seção 4.3.

Como foi mostrado neste capítulo, a coluna separadora de xilenos mistos (compostos com temperatura de ebulição muito próximas) é um sistema extremamente propício para a aplicação da técnica de recompressão de vapor, pois apresenta diferença de temperatura entre o topo e o fundo inferior 50,0 °C. A relação do calor retirado no condensador e o calor fornecido no refeedor está próxima de um, além de ter baixas vazões do vapor de topo.

Apesar do sistema ser extremamente favorável, é indispensável o superaquecimento da corrente de topo. A introdução do superaquecimento não só viabiliza a recompressão por meios de compressores convencionais, portanto mais baratos; como também aumenta a eficiência térmica global do processo.

A otimização em busca de uma temperatura ótima de recompressão é outra etapa que deve ser conduzida buscando sempre a menor taxa de recompressão possível, pois quanto maior for a taxa de recompressão, maior será o consumo de energia elétrica e menor será a eficiência da recompressão.

Uma série de parâmetros estão intrinsecamente relacionados. São eles, o ΔT mínimo requerido no refeedor, a área de troca térmica do refeedor, a potência consumida no compressor e razão de recompressão; a variação de qualquer um destes parâmetros implica diretamente na alteração dos demais. Um estudo de viabilidade técnico/econômica indicará os valores ótimos de cada parâmetro, relacionando o custo do investimento inicial e o grau de eficiência térmica desejada.

Para o processo de separação de xilenos mistos, adotamos com critério: ΔT mínimo de 4,0 °C e razão de recompressão $\pi=1,8$. Nestas condições a economia observada no processo foi extremamente significativa. Comparando com as fontes de calor convencionais observou-se uma economia de aproximadamente: 70% em relação ao sistema de aquecimento com óleo quente; 80% em relação ao aquecimento com vapor e 92% se o aquecimento fosse feito por resistências elétricas.

Pelo exposto, a recompressão direta de vapor em colunas separadoras de xilenos mistos aponta para um futuro promissor, não só no que se refere a economia de energia, como também, nos aspectos ambientais.

CAPÍTULO 5

MODELAGEM DINÂMICA E ANÁLISE DO TRANSIENTE

5.1 INTRODUÇÃO

No Capítulo 3 foi mostrado o comportamento do etil-benzeno na corrente de topo, o perfil de temperatura e o perfil da vazão molar de líquido ao longo da coluna para dois estados estacionários distintos. Porém, o estado estacionário representa o processo em um determinado instante, não fornecendo informações que permitam fazer um acompanhamento das mudanças ocorridas nas variáveis do sistema, quando este é perturbado de alguma forma. Para que se possa compreender o comportamento temporal destas variáveis, é necessário realizarmos um estudo da dinâmica do sistema.

Uma coluna de destilação apresenta diversas variáveis que podem ser manipuladas, por exemplo: a vazão, a composição e a temperatura de alimentação; as cargas térmicas do refeedor e do condensador; a vazão, a razão e a temperatura do refluxo, etc. O ideal seria fazer uma análise envolvendo todas as variáveis, porém isto tornaria o trabalho excessivamente grande e que certamente nos perderíamos na própria análise.

Com a finalidade de tornar o trabalho exequível, sem no entanto comprometer a generalidade, e baseado na experiência prática operacional da coluna, escolheu-se três variáveis para serem manipuladas: a vazão de carga da coluna, a carga térmica do refeedor e a razão de refluxo. O estudo do transiente do processo será feito da seguinte forma: a cada incremento implementado em uma das variáveis citadas acima será observado, via análise gráfica, o comportamento ao longo do tempo das demais variáveis.

5.2 MODELAGEM MATEMÁTICA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM REGIME TRANSIENTE

Nesta seção será feita a modelagem matemática de uma coluna de destilação multicomponente em estado transiente. A formulação das equações do balanço de massa e energia será constituída a partir do modelo clássico de destilação apresentada esquematicamente na Figura 5.1.

A dedução a seguir é baseada nos modelos descritos por: **Prokopakis e Seider (1983)**, **Ravagnani (1988)**, **Poiani (1993)** e **Pereira (1994)**.

A nomenclatura utilizada é bastante usual, como mostrada nas Figuras 5.1 e 5.2, onde um prato genérico j possui corrente de alimentação, correntes de líquido e de vapor entrando e saindo do prato e também a transferência de calor nas paredes da coluna. W_i^V e W_i^L são, respectivamente, as frações de vapor e líquido nas correntes que deixam o prato j . N é o número de pratos existentes na coluna e NC o número de componentes existentes na carga. Na modelagem o condensador é considerado como o primeiro estágio e o refeedor como o último estágio. Logo, o número de estágios total é igual ao número de pratos mais dois ($NT=N+2$).

A formulação a seguir foi desenvolvida considerando algumas restrições. As hipóteses restritivas buscam simplificar a modelagem matemática, porém sem perder a generalidade do sistema. São elas:

- A coluna opera adiabaticamente;
- A pressão varia linearmente ao longo da coluna;
- São desprezados os efeitos térmicos de mistura;
- O condensador e o refeedor contém um volume de líquido constante;
- Há uma relação definida entre as

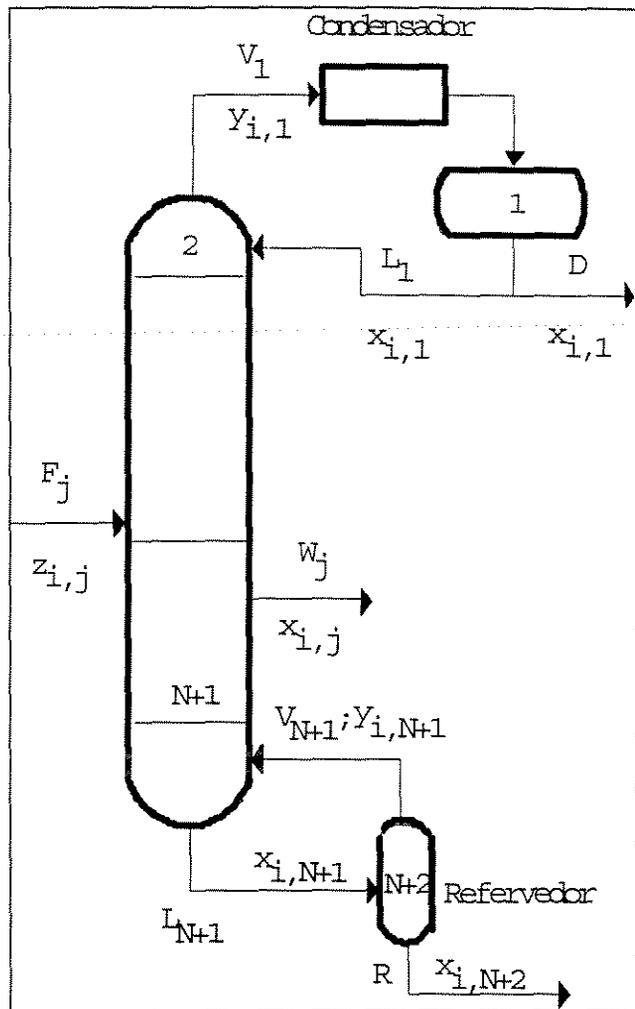


Figura 5.1- Diagrama esquemático de uma coluna de destilação

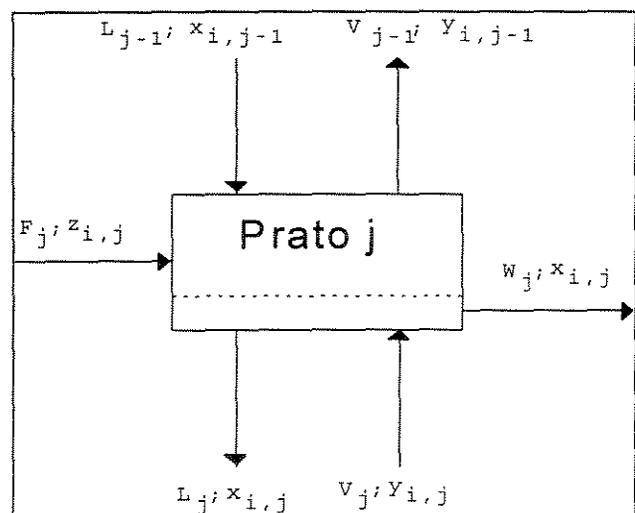


Figura 5.2 - Diagrama esquemático de um prato

composições de líquido e vapor que deixam o prato;

- O líquido e o vapor deixam o estágio em equilíbrio térmico;
- É desprezado o acúmulo molar de vapor;
- Alimentações e retiradas laterais são feitas sob a forma de líquido;
- A composição é constante ao longo do prato e de valor igual ao líquido que o deixa;
- Atraso de transporte entre o líquido e o vapor nos pratos desprezível;

5.2.1 Balanço de Massa

Componente i , prato j e $j=2,\dots,N+1$:

$$\frac{d(M_j x_{i,j})}{dt} = L_{j-1} x_{i,j-1} + V_j y_{i,j} + F_i z_{i,j} - L_j x_{i,j} - V_{j-1} y_{i,j-1} - W_j x_{i,j} \quad (5.1)$$

Global, prato j e $j=2,\dots,N+1$:

$$\frac{dM_j}{dt} = L_{j-1} + V_j + F_j - L_j - V_{j-1} - W_j \quad (5.2)$$

Componente i , no refeedor:

$$\frac{d(M_{N+2} x_{i,N+2})}{dt} = L_{N+1} x_{i,N+1} - V_{N+1} y_{i,N+1} - R x_{i,N+2} \quad (5.3)$$

Global, no refeedor:

$$\frac{dM_{N+2}}{dt} = L_{N+1} - V_{N+1} - R \quad (5.4)$$

Componente i , no condensador:

$$\frac{d(M_1 x_{i,1})}{dt} = V_1 y_{i,1} - L_1 x_{i,1} - D x_{i,1} \quad (5.5)$$

Global, no condensador:

$$\frac{dM_1}{dt} = V_1 - L_1 - D \quad (5.6)$$

Mas:

$$\frac{d(M_j x_{i,j})}{dt} = x_{i,j} \frac{dM_j}{dt} + M_j \frac{dx_{i,j}}{dt} \quad (5.7)$$

Combinando as equações do balanço de massa global e por componente:

Prato j e $j=2, \dots, N+1$:

$$M_j \frac{dx_{i,j}}{dt} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_j y_{i,j} + F_j z_{i,j} - V_{j-1}y_{i,j-1} - L_j x_{i,j} - W_j x_{i,j} - \left[x_{i,j} (L_{j-1} + V_j + F_j - L_j - V_{j-1} - W_j) \right] \quad (5.8)$$

Refrervedor:

$$M_{N+2} \frac{dx_{i,N+2}}{dt} = L_{N+1} (x_{i,N+1} - x_{i,N+2}) + V_{N+1} (x_{i,N+2} - y_{i,N+1}) \quad (5.9)$$

Condensador:

$$M_1 \frac{dx_{i,1}}{dt} = V_1 (y_{i,1} - x_{i,1}) \quad (5.10)$$

5.2.2 Balanço de Energia

Prato j e $j=2, \dots, N+1$:

$$\frac{d(M_j h_j)}{dt} = L_{j-1} h_{j-1} + V_j H_j + F_j h f_j - L_j h_j - V_{j-1} H_{j-1} - W_j h_j \quad (5.11)$$

Refrervedor:

$$\frac{d(M_{N+2} h_{N+2})}{dt} = L_{N+1} h_{N+1} - V_{N+1} H_{N+1} - R h_{N+2} + Q_R \quad (5.12)$$

A partir do balanço de energia acima e do balanço de massa global, temos:

Prato j e $j=2, \dots, N+1$:

$$M_j \frac{dh_j}{dt} = L_{j-1} h_{j-1} + V_j H_j + F_j h f_j - V_{j-1} H_{j-1} - L_j h_j - W_j h_j - \left[h_j (L_{j-1} + V_j + F_j - L_j - V_{j-1} - W_j) \right] \quad (5.13)$$

Refrervedor:

$$M_{N+2} \frac{dh_{N+2}}{dt} = L_{N+1} (h_{N+1} - h_{N+2}) + V_{N+1} (h_{N+2} - H_{N+1}) + Q_R \quad (5.14)$$

5.2.3 Relação de Equilíbrio Líquido-Vapor

Em virtude do sistema operar a baixa pressão e as moléculas de xilenos mistos apresentarem fórmula molecular e geométrica bastante semelhantes, considerou-se tanto a fase vapor como a fase líquida nas condições ideais. Portanto a relação de equilíbrio termodinâmico utilizada foi a lei de Raoult (Reid e colaboradores, 1987).

Prato j e $j=2, \dots, N+2$

$$P y_{i,j-1}^* = x_{i,j} P_{i,j}^{\text{sat}} \quad (5.15)$$

Ainda,

$$y_{i,j-1}^* = K_{i,j} x_{i,j} \quad (5.16)$$

Usando a definição da eficiência de Murphree

$$E = \frac{y_{i,j-1} - y_{i,j}}{y_{i,j-1}^* - y_{i,j}} \quad (5.17)$$

Logo, das equações (5.16) e (5.17) e $j=2, \dots, N+1$, temos:

$$y_{i,j-1} = E(y_{i,j-1}^* - y_{i,j}) + y_{i,j} \quad (5.18)$$

O valor da eficiência será considerada constante e igual para todos os componentes em todos os pratos. O refeedor é considerado um estágio de equilíbrio com eficiência igual a um ($E=1$), então:

$$y_{i,N+1}^* = y_{i,N+1} \quad (5.19)$$

5.2.4 Propriedades Físicas e Grandezas Termodinâmicas

1. Pressão de vapor (P^{sat})

A pressão de vapor na temperatura de saturação será calculada através da equação de Antoine:

$$\log_{10} P^{\text{sat}} = A - \frac{B}{T + C} \quad (5.20)$$

2. Cálculo da entalpia da fase líquida

Componente i puro:

$$h_i = C_{pi}^L (T - T_{\text{ref}}) \quad (5.21)$$

Mistura:

$$h = \sum_{i=1}^{NC} x_i h_i \quad (5.22)$$

3. Cálculo da entalpia da fase vapor

Componente i puro:

$$H_i = C_{pi}^V (T - T_{\text{ref}}) + \Delta H_{\text{ivap}}^{\text{ref}} \quad (5.23)$$

Mistura:

$$H = \sum_{i=1}^{NC} y_i H_i \quad (5.24)$$

4. Cálculo da densidade

A densidade será calculada através do método de Rackte (**Aspen Plus Manual, 1994**)

$$V^L = \frac{1}{\rho} = \frac{RT_{\text{cm}} (Z_{\text{RAm}})^{[1+(1-T_{\text{m}})^{2/7}]}}{P_{\text{cm}}} \quad (5.25)$$

onde:

$$T_{\text{cm}} = \frac{\sum_{i=1}^{NC} \sum_{l=1}^{NC} x_i x_l v_{ci} v_{cl} (T_{ci} T_{cl})^{1/2} (1 - k_{il})}{V_{\text{cm}}^2} \quad (5.26)$$

$$\frac{T_{cm}}{P_{cm}} = \sum_{i=1}^{NC} X_i \frac{T_{ci}}{P_{ci}} \quad (5.27)$$

$$Z_{RAm} = \sum_{i=1}^{NC} X_i Z_{RAi} \quad (5.28)$$

$$V_{cm} = \sum_{i=1}^{NC} X_i V_{ci} \quad (5.29)$$

$$T_{mm} = \frac{T}{T_{cm}} \quad (5.30)$$

Para efeito de cálculo da variação da densidade com tempo ($d\rho/dt$), foi utilizado uma equação simplificada da densidade:

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^{NC} \frac{X_i}{\rho_i} \quad (5.25a)$$

Da equação (5.25a)

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho^2 \left(\frac{1}{\rho_{pNC}} \sum_{i=1}^{NC-1} \frac{dx_i}{dt} - \sum_{i=1}^{NC-1} \frac{1}{\rho_i} \frac{dx_i}{dt} \right) \quad (5.31)$$

Da equação (5.22)

$$\frac{\partial h}{\partial T} = \sum X_i C_{pi}^L, \text{ com } C_{pi} \text{ constantes} \quad (5.32)$$

Da equação (5.22)

$$\frac{\partial h}{\partial X_i} = (T - T_{ref}) (C_{pi}^L - C_{pNC}^L), \text{ para o componente } i \quad (5.33)$$

Conforme **Cho e Joseph (1983b)**:

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{\partial h}{\partial t} \frac{\sum_{i=1}^{NC} K_i \frac{dx_i}{dt}}{\sum_{i=1}^{NC} X_i \frac{dK_i}{dt}} + \sum_{i=1}^{NC} \frac{\partial h}{\partial X_i} \frac{dx_i}{dt} \quad (5.34)$$

onde dK_j/dT será calculado numericamente.

5.2.5 Equações Complementares

Razão de refluxo:

$$RR = L_1 / D \quad (5.35)$$

Acúmulo molar de líquido no condensador e no refeedor

$$M_1 = V_C \rho_1 \quad (5.36)$$

$$M_{N+2} = V_R \rho_{N+2} \quad (5.37)$$

Para relacionar o acúmulo molar de líquido nos pratos com a vazão de líquido será utilizada a equação de Francis, válida para pratos com borbulhador, conforme **Smith (1963)**. A correlação é válida para $j=2, \dots, N+1$

$$L_j = \left[\left(\frac{M_j}{A_p \rho_j} - h_v \right) \frac{1}{e} \right]^{3/2} \rho_j L_w \quad (5.38)$$

Composição:

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i = 1,0 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^{NC} y_i = 1,0 \quad (5.39)$$

Cálculo de L_1 através das equações (5.6),(5.10),(5.25a),(5.35) e (5.36).

Das equações (5.6) e (5.35), tem-se:

$$\frac{dM_1}{dt} = V_1 - L_1 - \frac{L_1}{RR} \quad (5.40)$$

$$\frac{dM_1}{dt} = V_1 - L_1 \left(1 + \frac{1}{RR} \right) \quad (5.41)$$

derivando a equação (5.36), tem-se:

$$\frac{d M_1}{dt} = V_c \frac{d \rho_1}{dt} \quad (5.42)$$

Como:

$$\frac{d \rho_1}{dt} = \rho_1^2 \sum_{i=1}^{NC} \frac{dx_{i,l}}{dt} \frac{1}{\rho_{i,l}} \quad (5.43)$$

Substituindo a equação (5.43) em (5.42) e depois em (5.41), tem-se:

$$L_1 \left(1 - \frac{1}{RR} \right) = V_1 - V_c \rho_1^2 \sum_{i=1}^{NC} \frac{dx_{i,l}}{dt} \frac{1}{\rho_{i,l}} \quad (5.44)$$

Substituindo a equação (5.10) em (5.44), tem-se:

$$L_1 \left(1 - \frac{1}{RR} \right) = V_1 - V_c \rho_1^2 \sum_{i=1}^{NC} \frac{1}{\rho_{i,l}} \frac{V_1}{M_1} (y_{i,l} - x_{i,l}) \quad (5.45)$$

Substituindo a equação (5.36) em (5.45), tem-se:

$$L_1 = \frac{\left[1 + \rho_1 \sum_{i=1}^{NC} \frac{1}{\rho_{i,l}} (y_{i,l} - x_{i,l}) \right]}{1 + \frac{1}{RR}} V_1 \quad (5.46)$$

Produto de fundo:

Das equações (5.4) e (5.37)

$$R = L_{N+1} - V_{N+1} - V_R \frac{d \rho_{N+2}}{dt} \quad (5.47)$$

Vazão de vapor que deixa o refeedor:

Das equações (5.14) e (5.34)

$$\frac{L_{N+1}(h_{N+1} - h_{N+2}) + V_{N+1}(h_{N+2} - H_{N+1}) + Q_R}{M_{N+2}} =$$

$$= - \frac{\partial h_{N+2}}{\partial t} \frac{\sum_{i=1}^{NC} K_{i,N+2} \frac{dx_{i,N+2}}{dt}}{\sum_{i=1}^{NC} x_{i,N+2} \frac{dK_{i,N+2}}{dT}} + \sum_{i=1}^{NC} \frac{\partial h_{N+2}}{\partial x_{i,N+2}} \frac{dx_{i,N+2}}{dt}$$

(5.48)

Substituindo (5.9) em (5.48) e rearranjando:

$$V_{N+1} = \frac{L_{N+1} \left[h_{N+2} - h_{N+1} + \sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,N+2} (x_{i,N+1} - x_{i,N+2}) \right] - Q_R}{h_{N+2} - H_{N+1} + \sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,N+2} (y_{i,N+1} - x_{i,N+2})}$$

(5.49)

onde:

$$\alpha_{i,j} = \frac{-\frac{\partial h_j}{\partial T} K_{i,j}}{\sum_{i=1}^{NC} x_{i,j} \frac{dK_{i,j}}{dT}} + \frac{\partial h_j}{\partial x_{i,j}}$$

(5.50)

Das equações (5.8),(5.13),(5.34) e (5.50) e para $j=2, \dots, N+1$:

$$V_{j-1} = \frac{\left[\sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,j} (L_{j-1} x_{i,j-1} + V_j y_{i,j} + F_j z_{i,j} - x_{i,j} (L_{j-1} + V_j + F_j)) - L_{j-1} h_{j-1} - V_j H_j - F_j h_{\bar{g}} + h_j (L_{j-1} + V_j + F_j) \right]}{\left[h_j - H_{j-1} - \sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,j} (x_{i,j} - y_{i,j-1}) \right]}$$

(5.51)

Para o cálculo de V_1 deve-se substituir (5.46) em (5.51)

$$V_1 = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,2} (V_2 y_{i,2} + F_{2j} z_{i,2} - x_{i,2} (+V_2 + F_2)) \\ -V_2 H_2 - F_j h_{f2} + h_2 (V_2 + F_2) \\ h_2 - H_1 - \sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,2} (x_{i,2} - y_{i,j-1}) - \frac{1 + \rho l \sum_{i=1}^{NC} \frac{1}{\rho_{i,1}} (y_{i,1} - x_{i,1})}{1 + RR} \\ \sum_{i=1}^{NC} \alpha_{i,2} ((x_{i,1} - x_{i,2}) - h_1 + h_2) \end{bmatrix} \quad (5.52)$$

5.3 SIMULAÇÃO

Na seção anterior foi feita a modelagem matemática dos balanços de massa e de energia para uma coluna de destilação multicomponente, as equações seguem o modelo clássico tradicional denominado, prato-a-prato. Este conjunto de equações formam um sistema de equações algébricas e de equações diferenciais ordinárias, que resolvidas matematicamente, determinam o comportamento das variáveis de processo ao longo do tempo.

As equações diferenciais ordinárias, também conhecidas como equações “stiff” deverão ser integradas através de algoritmos específicos no intuito de se evitar problemas de instabilidade numérica.

Para a integração das equações diferenciais do balanço de massa foi utilizado o método de Runge-Kutta. A escolha do Runge-Kutta se deveu aos seguintes aspectos:

1. A robustez do método;
2. A precisão dos resultados;
3. A facilidade de aplicação.

A linguagem de programação utilizada foi o FORTRAN.

O diagrama de blocos do programa utilizado na simulação da coluna é mostrado na Figura 5.3, onde:

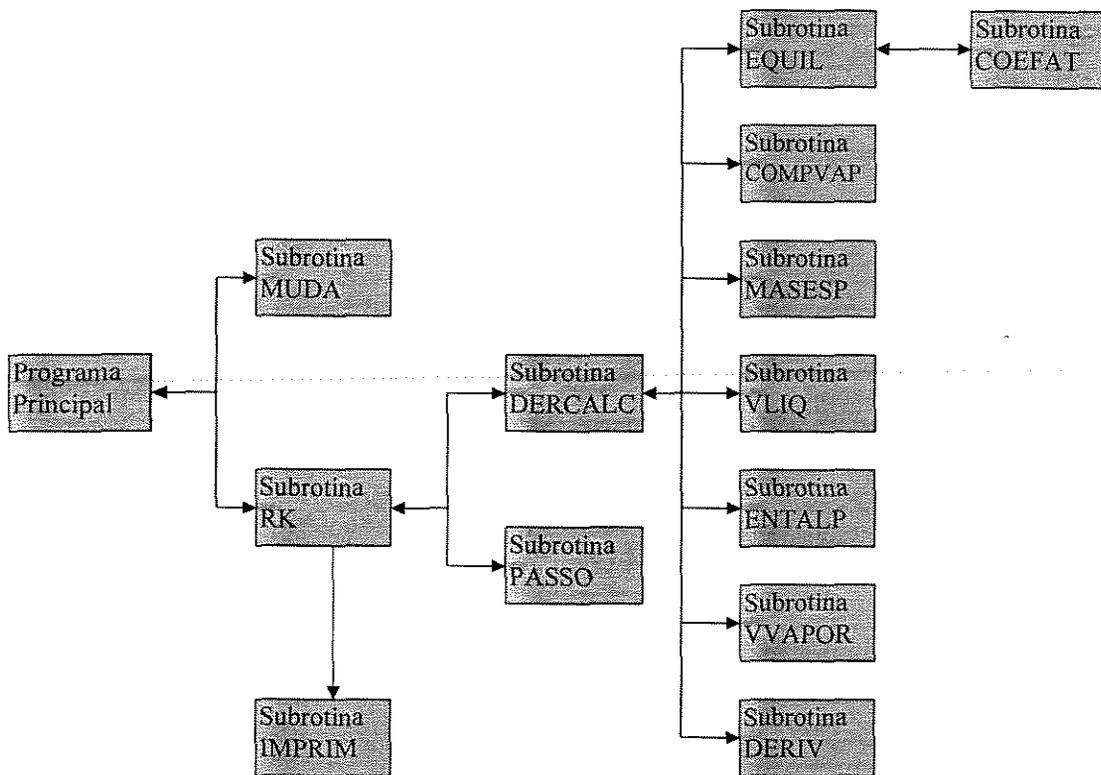


Figura 5.3 - Diagrama de blocos simplificado para a simulação a partir do modelo clássico

PROGRAMA PRINCIPAL - faz a leitura dos dados de entrada e condições iniciais de composição e vazão de líquido, calcula as demais condições iniciais e gerencia toda a simulação.

SUBROTINAS:

- MUDA: introduz a perturbação.
- IMPRIM: armazena os resultados em arquivos de dados.
- RK: faz a integração do sistema de equações diferenciais de balanço de massa, equações (5.1) a (5.6), através do método de Runge-Kutta.
- PASSO: Introduz o passo.
- DERCALC: gerencia o cálculo das derivadas do balanço de massa e calcula as composições na fase líquida.
- EQUIL: calcula a constante de equilíbrio e a temperatura nos estágios, através do cálculo do ponto de bolha, equações (5.15) a (5.16) e (5.39).
- COMPVAP: calcula as composições de vapor, equações (5.18) e (5.19).

- MASESP: calcula a massa específica por componente e para a fase líquida, equações (5.25) e (5.25a).
- VLIQ: calcula a vazão de líquido, equação (5.38).
- ENTALP: calcula a entalpia das fases líquida e vapor, equações (5.21) a (5.24).
- VVAPOR: calcula as vazões de vapor, equações (5.49), (5.51) e (5.52) e vazão de L_1 , equação (5.46).
- DERIV: calcula o valor das derivadas no balanço de massa, equações (5.1) a (5.6), e as vazões de destilado e produto de fundo, equações (5.35) e (5.47).
- COEFAT: calcula o coeficiente de atividade. Para o caso em estudo o coeficiente de atividade foi considerado igual a um.

Dados de entrada requerido pelo programa:

1. Número de componentes
2. Número de pratos
3. Pressão de topo e na base da coluna
4. Razão de refluxo
5. Volume do condensador e refeedor
6. Potência fornecida ao refeedor
7. Eficiência dos pratos
8. Dados geométricos da coluna
9. Propriedades físicas e grandezas termodinâmicas dos componentes
10. Perfis iniciais de vazão e composição da fase líquida.

Inicialmente o programa gera o estado estacionário para a composição da fase líquida fornecida. Após esta etapa o programa aciona a subrotina MUDA, onde é introduzida a perturbação desejada, que pode ser: na razão de refluxo, na vazão de refluxo, na carga térmica do refeedor, na vazão de carga, na composição da carga, etc.

O passo de integração foi ajustado com o objetivo de se obter maior precisão nos resultados e menor tempo de CPU. O passo utilizado foi de $h=0,005$ e o tempo de CPU observado esteve em torno de 12,0 min.

Na seção a seguir analisaremos o comportamento dinâmico da coluna, quando esta é submetida a perturbações na vazão de carga, na carga térmica do refeedor e na razão de refluxo.

5.4 ANÁLISE DO TRANSIENTE

A partir de dados da coluna coletados na planta, foi possível estabelecer uma configuração padrão que servirá como referência para a análise do transiente. A configuração básica é constituída de uma vazão de alimentação de $F=85,0$ Kmol/h (9272 Kg/h), razão de refluxo de $RR=6,0$ e carga térmica do refeedor de $QR=0,845$ MMKcal/h. A partir desta configuração básica incrementou-se as seguintes perturbações no sistema: Na vazão de alimentação fez-se um incremento de 20% positivo e 20% negativo, ou seja, vazão molar de alimentação $F=68,0$ e $F=102,0$ Kmol/h. A razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e de $RR=6,0$ para $RR=7,0$. Por último alterou-se a carga térmica do refeedor em 20% positivo e 20% negativo, ou seja, $QR=0,67$ e $QR=1,01$ MMKcal/h. Para cada perturbação realizada em uma das variáveis, as demais variáveis foram mantidas nos mesmos parâmetros da configuração básica.

Nos gráficos representados nas páginas a seguir, serão mostradas as variações da composição e vazão mássica, tanto na corrente de topo como na corrente de fundo de todos os componentes originários na carga da unidade: etil-benzeno, para-xileno, meta-xileno, orto-xileno, exceto o componente 124-trimetil-benzeno, por ser o mais pesado, este componente não sofreu alterações em todos as simulações realizadas. Em todos os casos estudados a vazão mássica existente na carga saiu integralmente pelo fundo do coluna. Inicialmente para cada componente serão mostrados 4 (quatro) gráficos. *Primeiro* - Fração molar do componente na corrente de topo; *Segundo* - Fração molar do componente da corrente de fundo; *Terceiro* - Vazão mássica do componente na corrente de topo; *Quarto* - Vazão mássica do componente na corrente de fundo; todos estes gráficos mostram o comportamento da fração e da vazão mássica do componente em relação ao tempo.

5.4.1 Alteração na Razão de Refluxo (RR)

Nesta seção analisaremos o comportamento da coluna quando a razão de refluxo é alterada do estado estacionário original ($RR=6,0$) para $RR=5,0$ e para $RR=7,0$. Posteriormente será analisado apenas para o componente etil-benzeno a influência da vazão de alimentação e da carga térmica.

Na Figura 5.4 a variação molar do etil-benzeno varia com o tempo dentro do que é esperado, ou seja, o aumento da razão de refluxo ($RR=7,0$) aumenta a concentração do etil-benzeno na corrente de topo, enquanto que a diminuição da razão de refluxo ($RR=5,0$) leva a uma menor concentração do etil-benzeno no topo. Paralelamente o comportamento da corrente de fundo da coluna é semelhante ao que ocorre no topo, conforme mostra a Figura 5.5. O aumento do refluxo também proporciona um aumento da fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo. A priori isto nos parece contraditório, porém na análise dos gráficos referentes ao balanço de massa do componente isto fica esclarecido. Segundo a Figura 5.6 o aumento na razão de refluxo leva a uma redução na vazão mássica do etil-benzeno no topo da coluna, conseqüentemente a vazão do etil-benzeno na corrente de fundo vai aumentar, conforme Figura 5.7, isto explica o aumento da concentração do etil-benzeno. O aumento da razão de refluxo é benéfica pois aumenta a pureza do etil-benzeno na corrente do topo, muito embora cause uma redução na vazão total de topo produzida. Um aspecto interessante a ser observado nas Figuras 5.4 e 5.5 diz respeito ao comportamento das curvas. No topo da coluna podemos observar que a concentração molar do etil-benzeno varia lentamente com o tempo e que o novo estado

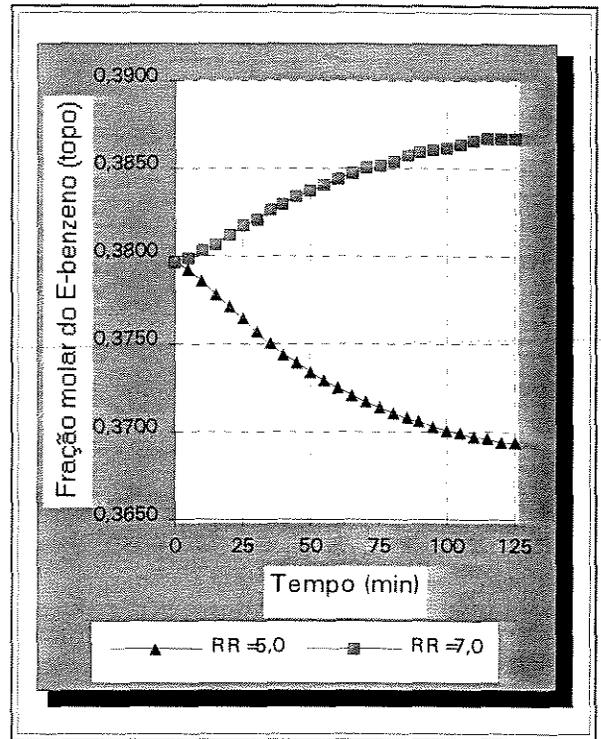


Figura 5.4 - Fração Molar do E-benzeno (topo) quando a razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e $RR=6,0$ para $RR=7,0$.

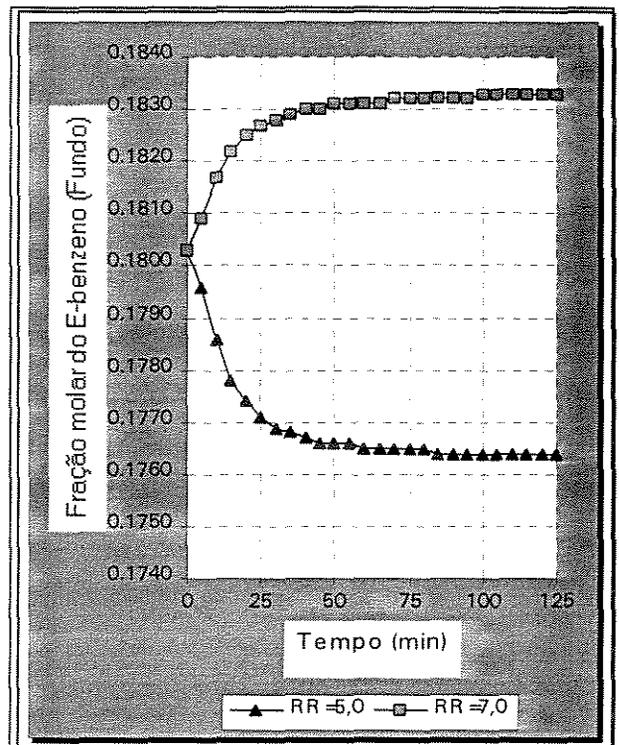


Figura 5.5 - Fração molar do E-benzeno (fundo) quando a razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e $RR=6,0$ para $RR=7,0$.

estacionário só ocorre nas proximidades dos 125 (min), enquanto que na corrente de fundo a estabilidade é atingida nos primeiros 50 (min). Este fenômeno pode ser entendido mediante dois aspectos: a) a razão de refluxo altera diretamente o cálculo da vazão da corrente de topo e na composição de seus componentes; b) o acúmulo de líquido no topo da coluna (condensador + vaso de topo) é superior ao acúmulo de líquido do fundo da mesma (refervedor).

Nas Figuras 5.8 a 5.11 é mostrado o comportamento do para-xileno para as duas razões de refluxo mencionadas anteriormente. Na Figura 5.8 podemos observar que tanto para $RR=5,0$ quanto para $RR=7,0$ a fração molar do para-xileno aumenta na corrente de topo, sendo que o aumento é bem mais acentuado para o caso onde $RR=5,0$. No fundo da coluna a concentração e a vazão do para-xileno crescem com o aumento da razão da refluxo. Isto ocorre não só porque a vazão de fundo aumenta com o aumento da razão de refluxo, como também o fator de separação entre o para-xileno e o etil-benzeno e tanto maior quanto maior for a razão de refluxo. Para o para-xileno o novo estado estacionário é atingido em um tempo bem menor que no caso do etil-benzeno.

O meta-xileno apresenta no topo da coluna um comportamento inverso ao do etil-benzeno, ou seja, a concentração diminui com o aumento da razão de refluxo e aumenta com a diminuição da razão de refluxo conforme mostra a Figura 5.12.

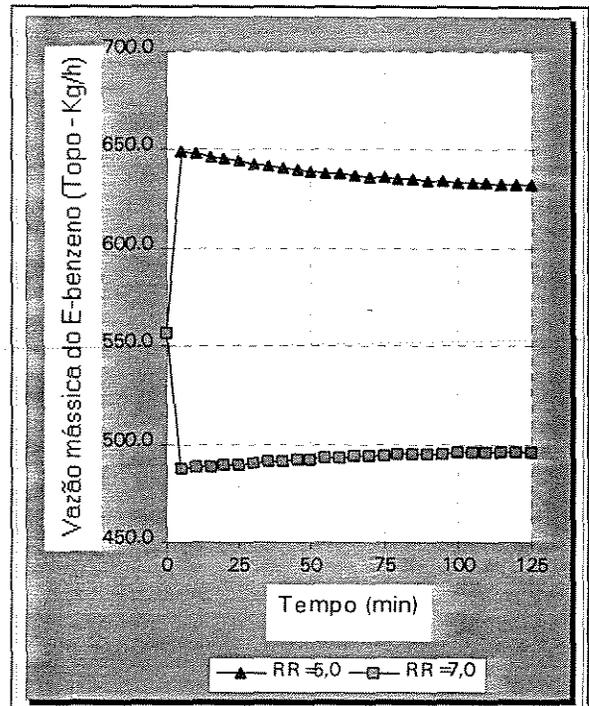


Figura 5.6 - Vazão mássica de E-benzeno no topo para a razão de refluxo $RR=5,0$ e $RR=7,0$.

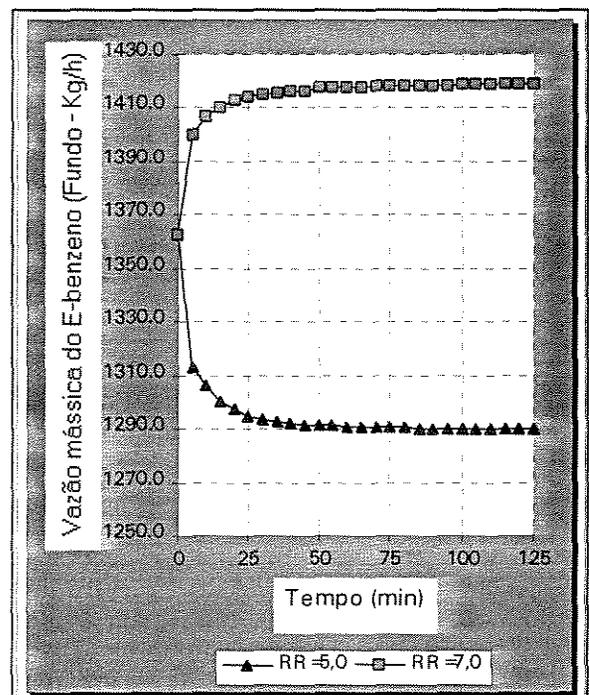


Figura 5.7 - Vazão mássica do E-benzeno no fundo para a razão de refluxo $RR=5,0$ e $RR=7,0$.

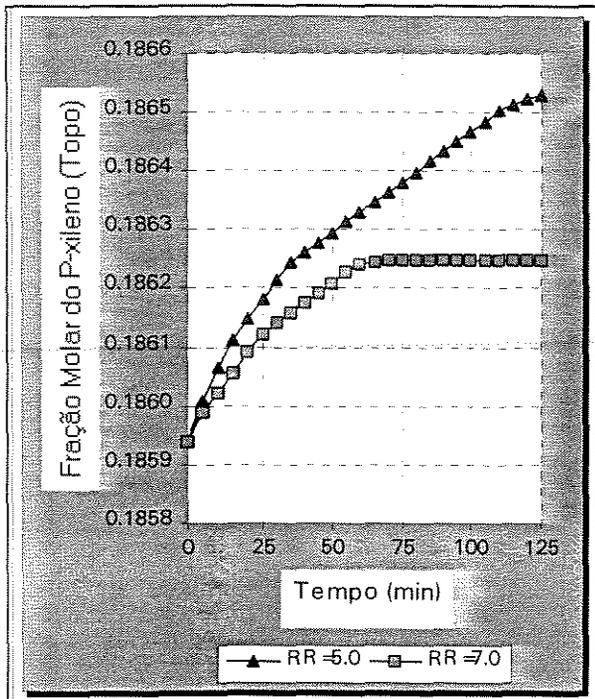


Figura 5.8 - Fração molar do P-xileno (topo) quando a razão de refluxo foi alterada de RR=6,0 para RR=5,0 e RR=6,0 para RR=7,0

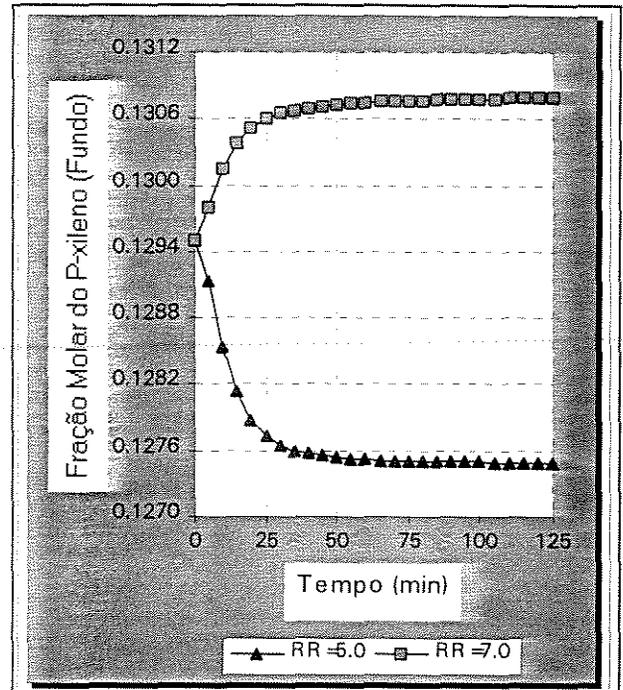


Figura 5.9 - Fração molar do P-xileno (fundo) quando a razão de refluxo foi alterada de RR=6,0 para RR=5,0 e RR=6,0 para RR=7,0.

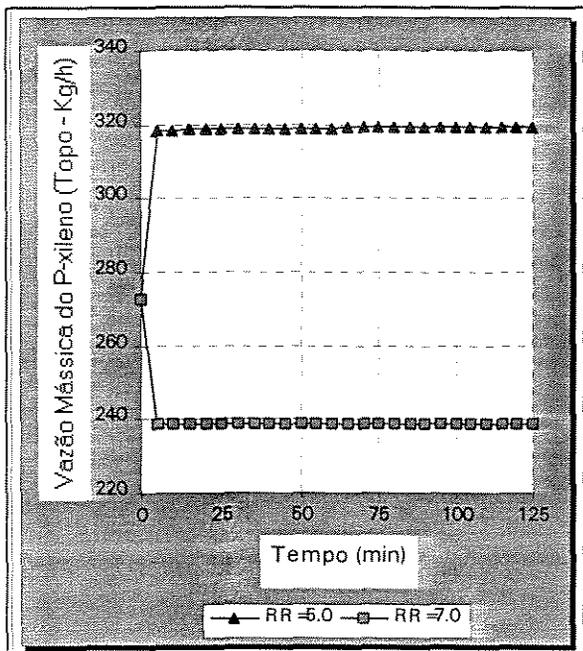


Figura 5.10 - Vazão mássica de P-xileno no topo para a razão de refluxo RR=5,0 e RR=7,0.

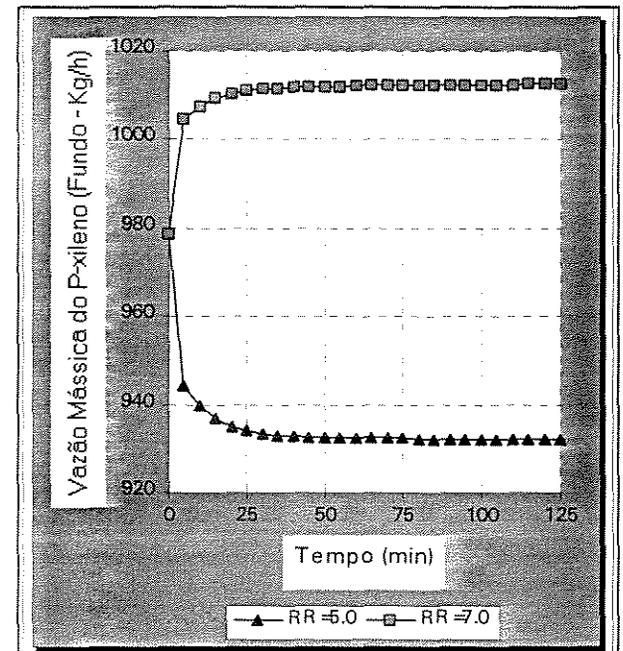


Figura 5.11 - Vazão mássica de P-xileno no fundo para a razão de refluxo RR=5,0 e RR=7,0.

No fundo da coluna o meta-xileno se comporta como os demais componentes. A concentração aumenta para $RR=7,0$ e diminui quando $RR=5,0$. Também as vazões mássicas de topo e de fundo tem o mesmo comportamento dos demais componentes.

Como a concentração do orto-xileno na corrente de topo é muito pequena, a variação na razão de refluxo praticamente não altera esta concentração em termos absolutos. Porém na corrente de fundo o orto-xileno tem um comportamento diferente dos demais componentes, quando a razão de refluxo aumenta a concentração inicialmente cresce, mas logo em seguida começa a diminuir conforme mostra a Figura 5.17. Este comportamento diferenciado pode ser entendido mediante a vazão de fundo da coluna. Através da Figura 5.19, podemos observar que logo após o sistema ser perturbado a vazão de orto-xileno aumenta, sendo que ao passar do tempo a vazão começa a diminuir até atingir o novo estado estacionário. A vazão de topo além de ser pequena tem o mesmo comportamento dos demais componentes.

O último componente, 124-trimetil-benzeno, é o componente de maior ponto de ebulição entre os componentes existentes, caracterizando-se como um produto de fundo e em todas situações a vazão mássica de 124-trimetil-benzeno existente na carga sai pelo fundo da coluna. Logo como este componente

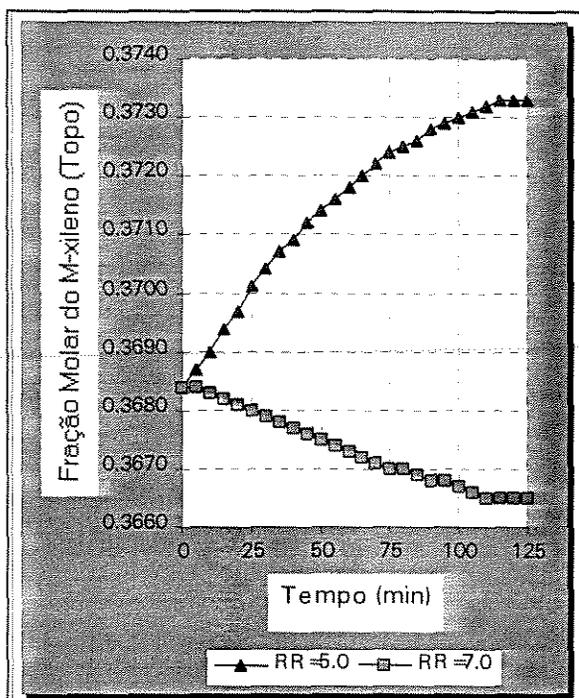


Figura 5.12 - Fração molar do M-xileno (topo) quando a razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e $RR=6,0$ para $RR=7,0$.

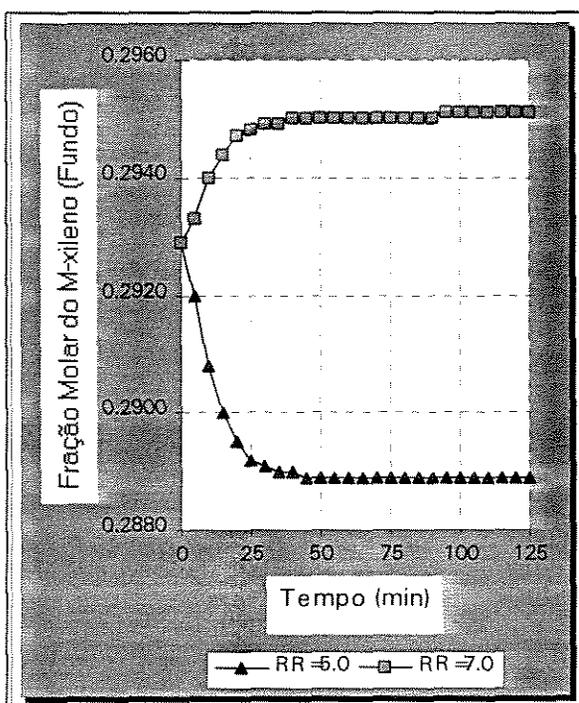


Figura 5.13 - Fração molar de M-xileno (fundo) quando a razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e $RR=6,0$ para $RR=7,0$.

não sofreu modificações quando o sistema foi perturbado, achamos desnecessário traçar gráficos do seu comportamento.

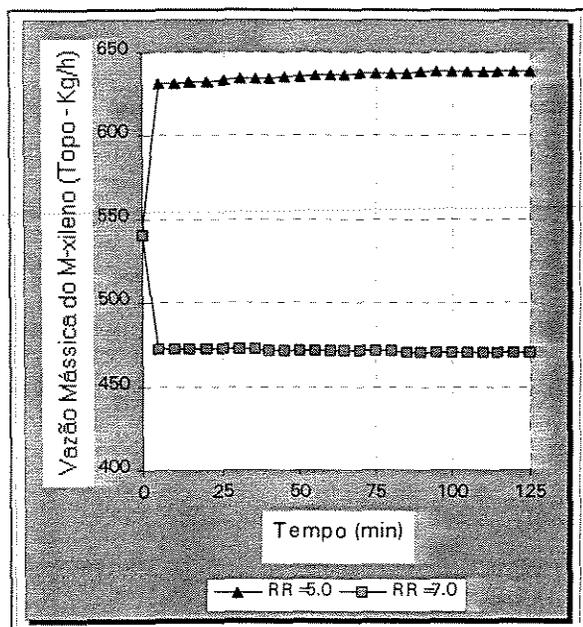


Figura 5.14 - Vazão mássica de M-xileno no topo para a razão de refluxo $RR=5,0$ e $RR=7,0$.

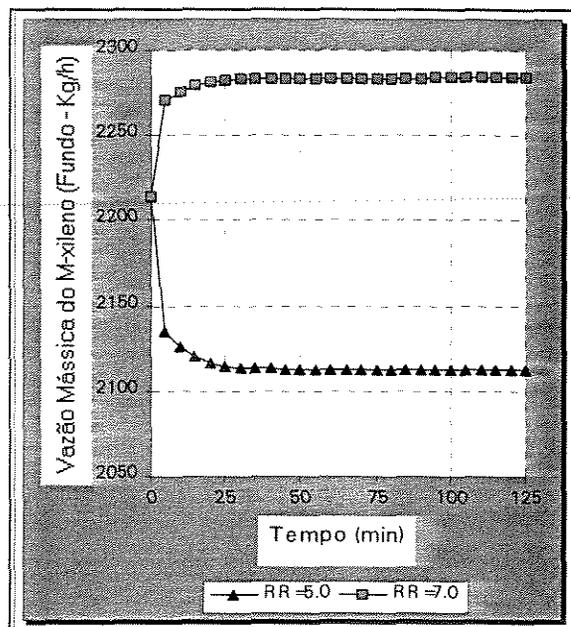


Figura 5.15 - Vazão mássica de M-xileno no fundo para a razão de refluxo $RR=5,0$ e $RR=7,0$.

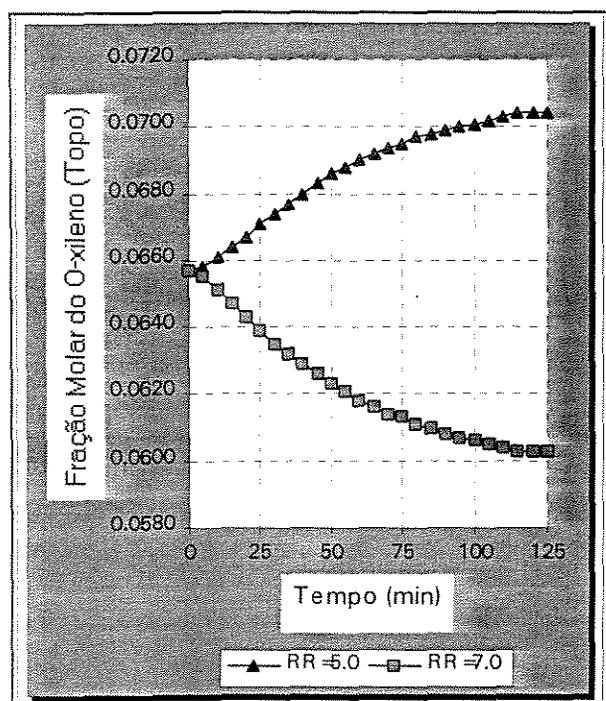


Figura 5.16 - Fração molar de O-xileno (topo) quando a razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e $RR=6,0$ para $RR=7,0$.

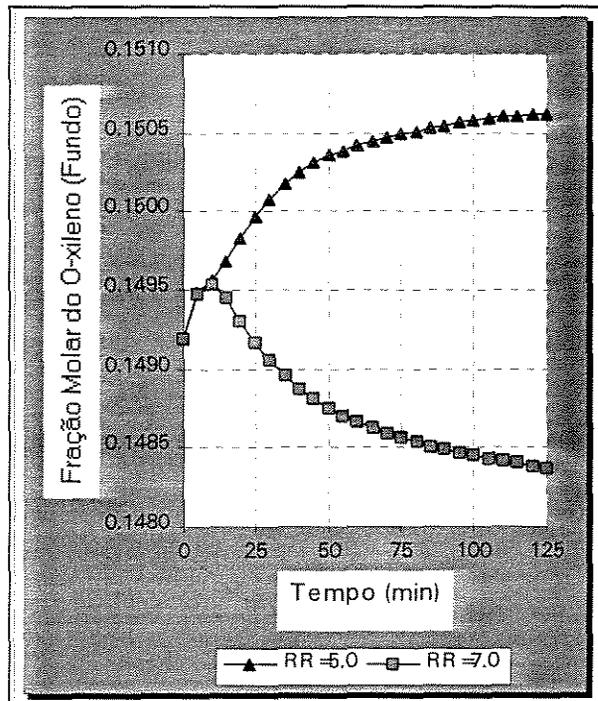


Figura 5.17 - Fração molar de O-xileno (fundo) quando a razão de refluxo foi alterada de $RR=6,0$ para $RR=5,0$ e $RR=6,0$ para $RR=7,0$.

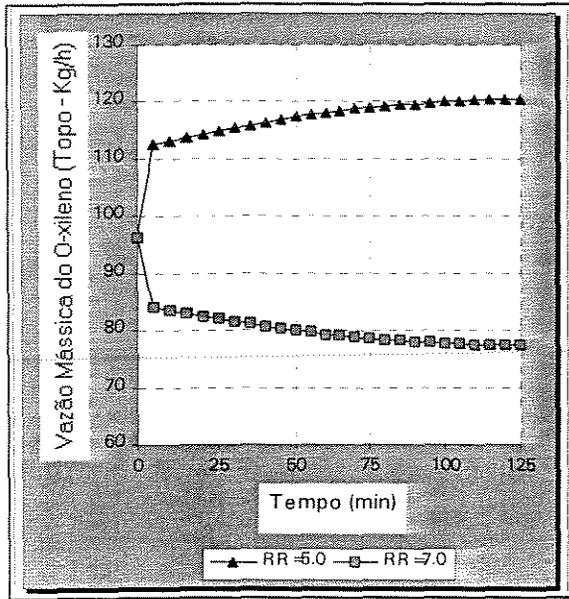


Figura 5.18 - Vazão mássica de O-xileno no topo para a razão de refluxo $RR=5,0$ e $RR=7,0$.

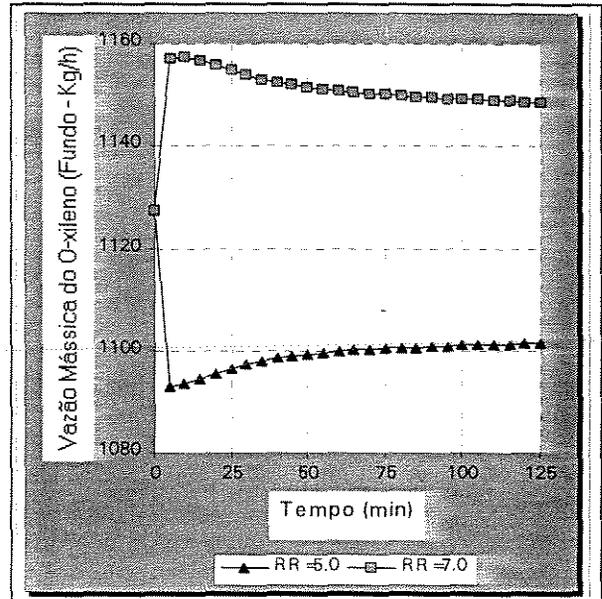


Figura 5.19 - Vazão mássica de O-xileno no fundo para a razão de refluxo $RR=5,0$ e $RR=7,0$.

5.4.2 Alteração na Vazão de Carga (F)

Inicialmente foi mostrado o comportamento dos componentes nas correntes de topo e de fundo da coluna quando a razão de refluxo foi alterada. A seguir serão analisados os efeitos causados pela variação da vazão de carga no componente etil-benzeno, tanto na corrente de topo, como na corrente de fundo. A vazão de carga foi incrementada positivamente em 20% e posteriormente incrementada negativamente também de 20%, ou seja, a carga inicial de $F=85,0$ Kmol/h foi alterada primeiramente para $F=102,0$ Kmol/h e posteriormente para $F=68,0$ Kmol/h mantendo-se os demais parâmetros constantes e iguais a configuração padrão.

Nas Figuras 5.20 e 5.22 podemos observar que o etil-benzeno na corrente de topo

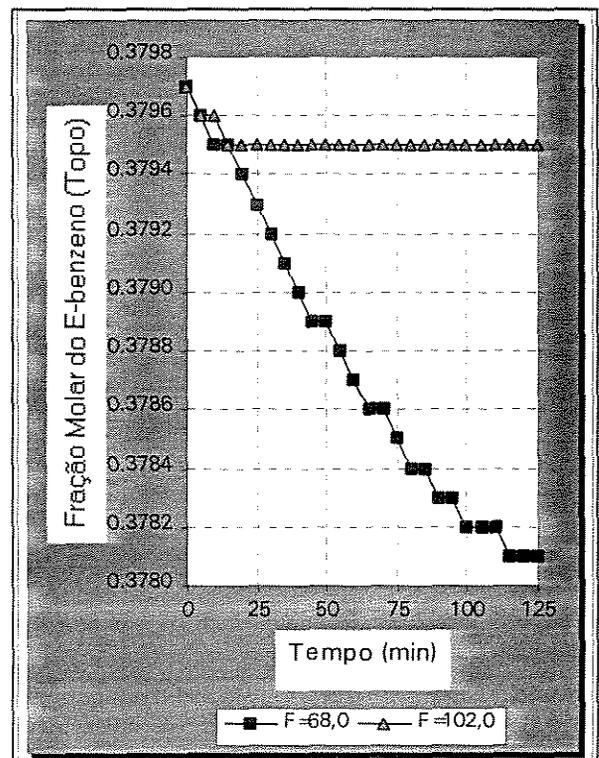


Figura 5.20 - Fração molar do E-benzeno (topo) quando a vazão de carga foi alterada de $F=85,0$ para $F=68,0$ e $F=85,0$ para $F=102,0$

praticamente não é influenciado pelas perturbações nas vazões da corrente de carga. Quando a vazão de carga é diminuída para $F=68,0$ a composição de topo varia lentamente, quase que linearmente, até atingir o novo estado estacionário. Para o caso de aumento de vazão $F=102,0$ a mudança de composição do etil-benzeno é praticamente desprezível. Através da Figura 5.22 verifica-se que a vazão mássica do etil-benzeno no topo permanece praticamente inalterada. Enquanto que, no topo da coluna não se observa resposta significativas as perturbações, na região de fundo este comportamento é totalmente diferente. Nas Figuras 5.21 e 5.23 é mostrado que não só a composição sofre alteração, como

principalmente a vazão de fundo. O aumento da vazão de carga para $F=102,0$, provoca um aumento na concentração e também da vazão de etil-benzeno pelo fundo. A diminuição da carga provoca uma diminuição da concentração e da vazão.

Um outro detalhe a ser comentado é o desvio sofrido pela concentração de etil-benzeno quando o sistema é perturbado em relação ao estado padrão inicial. Apesar do incremento ter a mesma amplitude, o desvio sofrido é diferente. Observando a Figura 5.21 pode-se constatar que o desvio da concentração foi maior para o caso onde a vazão de carga foi menor ($F=68,0$). Este fenômeno pode ser explicado da seguinte forma: como o etil-benzeno é o produto que deverá sair pelo topo, a redução de vazão tem como consequência uma melhoria no fator de separação. Logo, há um enriquecimento do etil-benzeno na região de topo e um empobrecimento na região de fundo.

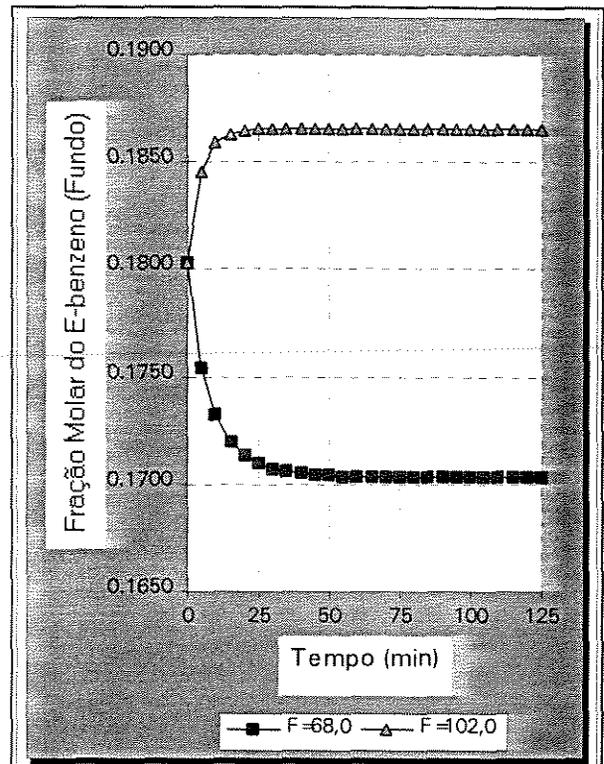


Figura 5.21 - Fração molar do E-benzeno (fundo) quando a vazão de carga foi alterada de $F=85,0$ para $F=68,0$ e $F=85,0$ para $F=102,0$.

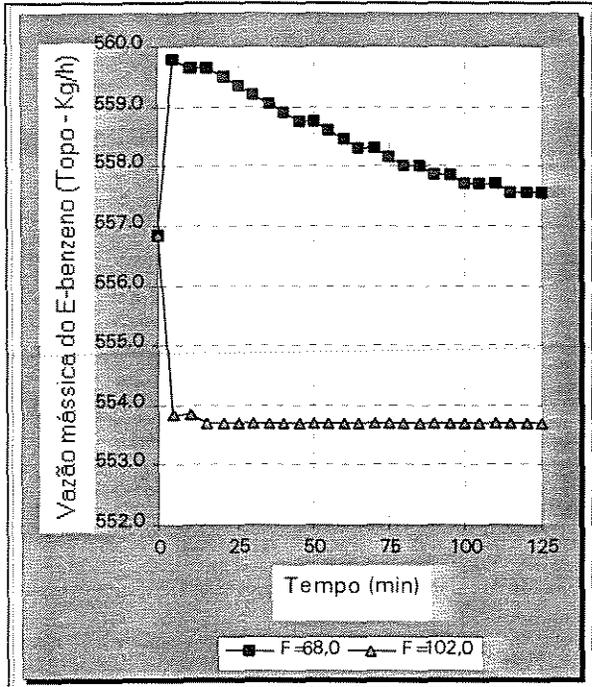


Figura 5.22 - Vazão mássica de E-benzeno no topo para a vazão de carga $F=68,0$ e $F=102,0$.

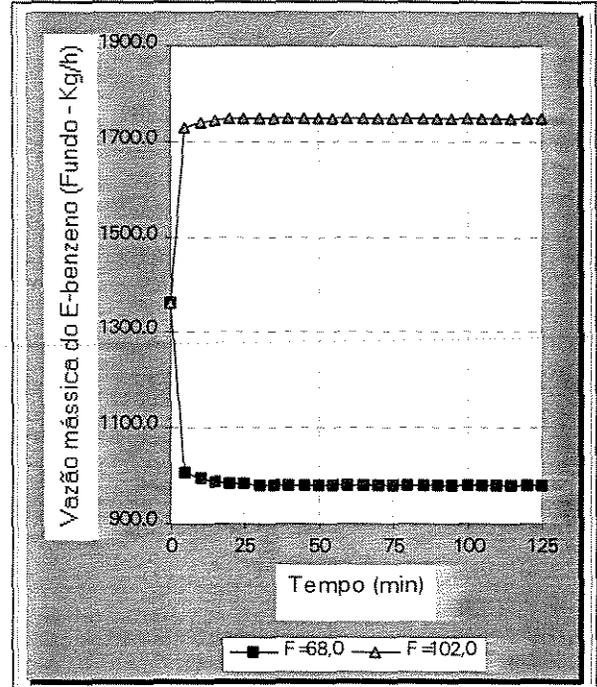


Figura 5.23 - Vazão mássica do E-benzeno no fundo para a vazão de carga $F=68,0$ e $F=102,0$.

5.4.3 Alteração na Carga Térmica (QR)

Como etapa final da análise do transiente da coluna convencional, estudou-se o comportamento do componente etil-benzeno, tanto na corrente de topo, como na corrente de fundo, para o caso onde a carga térmica do sistema foi perturbada. Semelhante aos casos anteriores, a análise novamente será feita através de um incremento de 20% positivo e de 20% negativo na carga térmica e a partir desta perturbação, na forma “degrau”, será avaliada a composição e a vazão do etil-benzeno no topo e no fundo da coluna.

A representação gráfica mostradas nas Figuras 5.24 a 5.27 revelam o comportamento

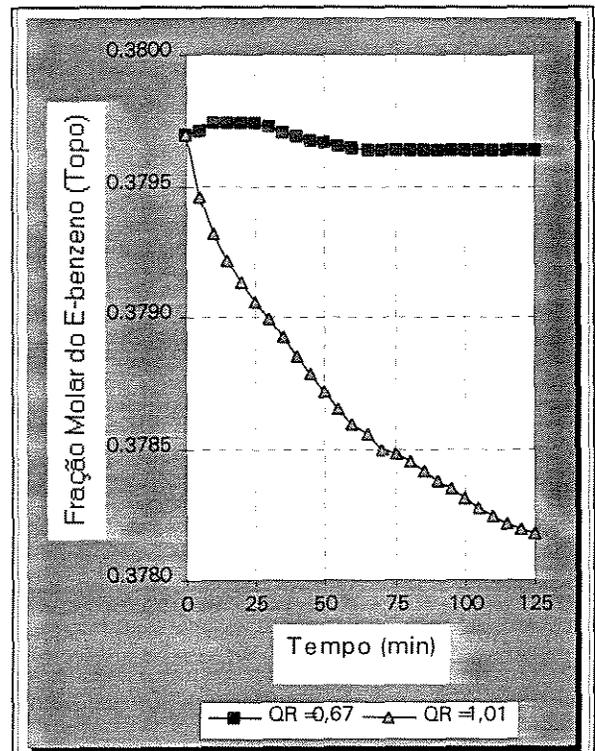


Figura 5.24 - Fração molar do E-benzeno (topo) quando a carga térmica foi alterada de $QR=0,845$ para $QR=0,67$ e $QR=0,845$ para $QR=1,01$.

do etil-benzeno após as perturbações realizadas no sistema. Quando a carga térmica é reduzida para $QR=0,67$ MMKcal/h a vazão de topo do etil-benzeno diminui ao mesmo tempo em que aumenta a vazão de fundo. Porém a composição se comporta de forma diferente, praticamente não se altera na corrente de topo. Verifica-se, no entanto, um aumento de concentração na corrente de fundo da coluna. Para a segunda perturbação $QR=1,01$ MMKcal/h, as vazões de topo e de fundo têm um comportamento inverso à perturbação anterior, ou seja, a vazão do etil-benzeno aumenta no topo e diminui no fundo. A composição tanto diminui na corrente de topo como na corrente de fundo.

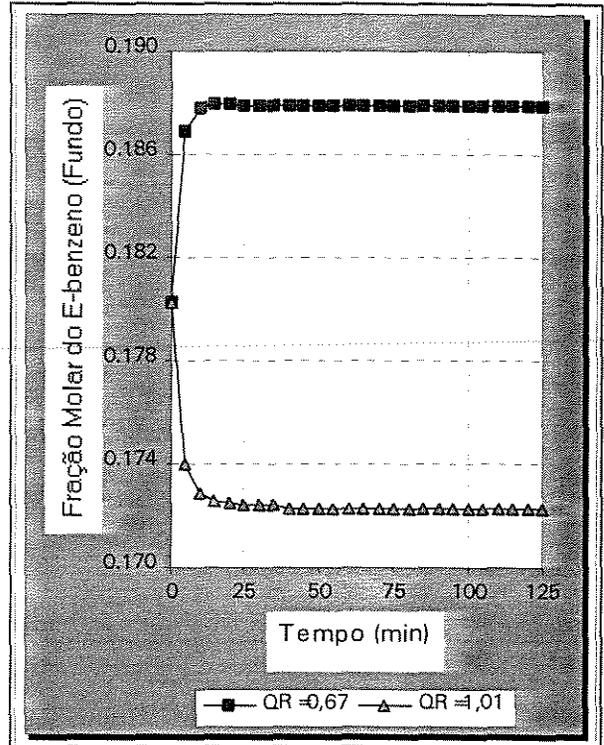


Figura 5.25 - Fração molar de E-benzeno (fundo) quando a carga térmica foi alterada de $QR=0,845$ para $QR=0,67$ e $QR=0,845$ para $QR=1,01$.

O aumento na carga térmica provoca a elevação para a corrente de topo, além do etil-

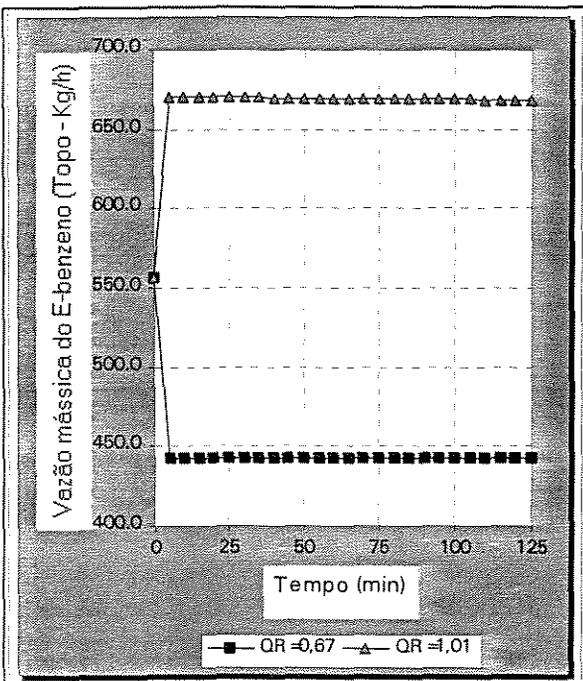


Figura 5.26 - Vazão mássica de E-benzeno no topo para a carga térmica $QR=0,67$ e $QR=1,01$.

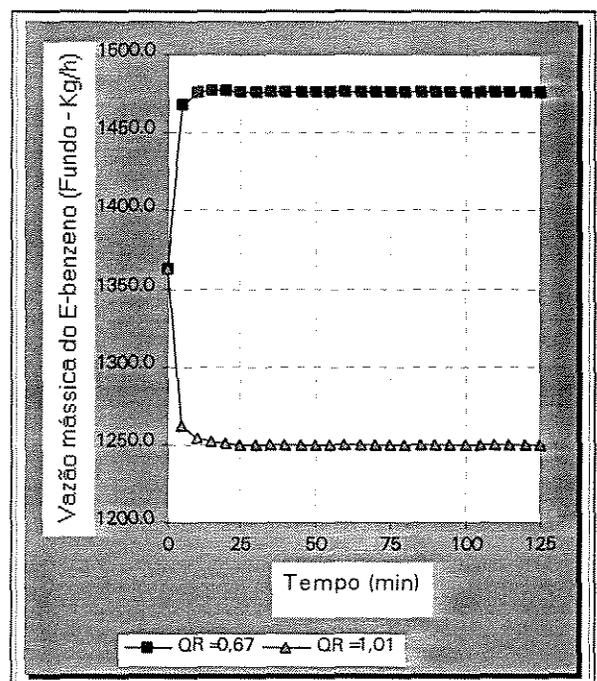


Figura 5.27 - Vazão mássica de E-benzeno no fundo para a carga térmica $QR=0,67$ e $QR=1,01$.

benzeno, o para-xileno e o meta-xileno, porém proporcionalmente a vazão de para-xileno mais meta-xileno é maior que a vazão de etil-benzeno. Logo, explica-se a diminuição da concentração no topo.

5.5 ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE A SIMULAÇÃO DINÂMICA E O SIMULADOR ASPEN-PLUS

Nesta seção será feita uma análise comparativa entre o perfil de temperatura e o balanço de massa gerados pelo programa CLASSIC de simulação dinâmica desenvolvido nesta tese e programa comercial ASPEN-PLUS. Como o ASPEN é um programa para o estado estacionário, o perfil de temperatura e o balanço de massa foram gerados para vários estados estacionários distintos, como mostram as tabelas a seguir. No programa dinâmico o balanço de massa como o perfil de temperatura foram obtidos a partir das perturbações realizadas no sistema, e a cada perturbação, o programa CLASSIC era executado até atingir o novo estado estacionário. A partir deste novo estado estacionário, o balanço de massa gerado era comparado com o balanço gerado pelo ASPEN. A condição estacionária inicial é a configuração 01 descrita no Capítulo 3, ou seja $F=85,0$ Kmol/h, $RR=6,0$ e $QR=0,845$ MMKcal/h.

Nas Tabelas 5.1.a e 5.1.b são mostrados os perfis de temperatura ao longo da coluna para duas condições de: vazões de carga, razões de refluxo e cargas térmicas. Como podemos observar as diferenças de temperatura em cada prato entre o ASPEN e CLASSIC é desprezível.

Nas Tabelas 5.2.a-c são mostradas as vazões mássicas de cada componente e a vazão mássica global no topo e no fundo da coluna para vários casos. A Tabela 5.2.a mostra a variação da razão de refluxo (RR), a Tabela 5.2.b mostra a perturbação na vazão de carga (F) e por último a Tabela 5.2.c mostra a variação na carga térmica (QR).

Observando o erro relativo para cada componente, podemos constatar que o programa CLASSIC apresenta vazões mássicas muito próximas às do ASPEN, com erro inferior a 1% para a maioria dos componentes, o que comprova a eficiência do programa. O erro alto para o componente 124-trimetil-benzeno no topo pode ser explicado facilmente. Por ser uma vazão muito pequena em relação à vazão global, uma diferença absoluta, mesmo que seja mínima, gera um erro relativamente alto, porém isto não altera o resultado final.

Tabela 5.1.a - Análise comparativa entre o perfil de temperatura (°C) gerado pelo ASPEN e pelo CLASSIC

Prato	RR=5,0		QR=1,01 MMKcal/h		F= 102,0 Kmol/h	
	Aspen	Classic	Aspen	Classic	Aspen	Classic
1	141,8	141,8	141,6	141,7	141,8	141,8
2	142,2	142,1	142,1	142,1	142,1	142,1
3	142,5	142,5	142,4	142,4	142,4	142,4
4	142,8	142,8	142,8	142,8	142,8	142,8
5	143,2	143,2	143,1	143,1	143,1	143,1
6	143,5	143,5	143,4	143,4	143,4	143,4
7	143,9	143,9	143,8	143,8	143,8	143,8
8	144,3	144,2	144,2	144,1	144,2	144,2
9	144,7	144,7	144,6	144,6	144,6	144,6
10	145,2	145,2	145,0	145,0	145,1	145,0
11	145,7	145,7	145,6	145,6	145,7	145,6
12	146,4	146,4	146,2	146,2	146,4	146,3
13	147,4	147,4	147,1	147,1	147,4	147,2
14	149,1	149,1	148,8	148,8	149,2	149,0
15	149,3	149,3	149,1	149,0	149,4	149,2
16	149,6	149,6	149,3	149,3	149,7	149,5
17	149,9	149,8	149,6	149,6	149,9	149,7
18	150,2	150,1	149,9	149,9	150,2	150,0
19	150,5	150,5	150,3	150,3	150,5	150,4
20	151,0	151,0	150,9	150,8	150,9	150,9
21	151,7	151,7	151,7	151,7	151,5	151,6
22	153,8	153,8	153,9	153,9	153,4	153,6

Tabela 5.1.b - Análise comparativa entre o perfil de temperatura (°C) gerado pelo ASPEN e pelo CLASSIC

Prato	RR=7,0		QR=0,67 MMKcal/h		F= 68,0 Kmol/h	
	Aspen	Classic	Aspen	Classic	Aspen	Classic
1	141,7	141,7	141,8	141,7	141,8	141,7
2	142,0	142,0	142,1	142,1	142,1	142,1
3	142,4	142,4	142,4	142,4	142,4	142,4
4	142,7	142,7	142,8	142,8	142,8	142,8
5	143,0	143,0	143,1	143,1	143,1	143,1
6	143,4	143,4	143,4	143,4	143,4	143,4
7	143,7	143,7	143,8	143,8	143,8	143,8
8	144,1	144,1	144,2	144,1	144,2	144,1
9	144,5	144,5	144,6	144,6	144,6	144,5
10	145,0	145,0	145,1	145,0	145,0	145,0
11	145,5	145,5	145,7	145,6	145,6	145,5
12	146,2	146,2	146,4	146,4	146,2	146,2
13	147,2	147,2	147,4	147,4	147,1	147,1
14	148,9	148,9	149,2	149,2	148,8	148,7
15	149,2	149,2	149,5	149,5	149,0	149,0
16	149,4	149,4	149,7	149,7	149,3	149,3
17	149,7	149,7	150,0	149,9	149,6	149,5
18	150,0	150,0	150,2	150,2	149,9	149,9
19	150,3	150,3	150,6	150,6	150,3	150,3
20	150,8	150,8	151,0	151,0	150,9	150,8
21	151,5	151,5	151,5	151,5	151,7	151,7
22	153,4	153,4	153,3	153,3	154,0	154,0

Tabela 5.2.a - Tabela comparativa entre a simulação realizada pelo ASPEN e a simulação dinâmica (programa CLASSIC)

Vazão de topo da coluna em Kg/h							
	RR=6,0	RR=5,0			RR=7,0		
	Aspen	Aspen	Classic	Desvio(%)	Aspen	Classic	Desvio(%)
Etil-benzeno	556,72	630,06	632,43	0,38	499,70	496,04	0,73
P-xileno	272,64	318,53	319,29	0,24	237,98	238,91	0,39
M-xileno	540,29	638,27	639,11	0,13	466,97	470,25	0,70
O-xileno	96,39	124,06	120,52	2,85	77,85	77,50	0,45
124-tm-benz	0,38	0,55	0,58	5,45	0,28	0,35	25,00
Vazão	1466,42	1711,47	1711,93	0,03	1282,78	1283,05	0,02
Vazão de fundo da coluna em Kg/h							
	RR=6,0	RR=5,0			RR=7,0		
	Aspen	Aspen	Classic	Desvio(%)	Aspen	Classic	Desvio(%)
Etil-benzeno	1361,93	1289,25	1289,90	0,05	1419,02	1419,05	0,00
P-xileno	978,74	933,12	932,32	0,09	1013,37	1012,61	0,07
M-xileno	2212,94	2114,87	2112,54	0,11	2286,85	2284,58	0,10
O-xileno	1126,88	1099,85	1101,24	0,13	1145,75	1148,87	0,27
124-tm-benz	2122,72	2122,61	2124,12	0,07	2122,60	2125,27	0,13
Vazão	7803,21	7559,70	7560,12	0,01	7987,59	7990,38	0,03

Tabela 5.2.b - Tabela comparativa entre a simulação realizada pelo ASPEN e a simulação dinâmica (programa CLASSIC)

Vazão de topo da coluna em Kg/h							
	F=85,0	F=68,0			F=102,0		
	Aspen	Aspen	Classic	Desvio(%)	Aspen	Classic	Desvio(%)
Etil-benzeno	556,72	557,59	557,58	0,00	554,28	553,70	0,10
P-xileno	272,64	274,83	275,47	0,23	270,87	271,67	0,30
M-xileno	540,29	545,10	546,52	0,26	536,63	538,53	0,35
O-xileno	96,39	96,57	94,82	1,81	96,42	94,55	1,94
124-tm-benz	0,38	0,39	0,44	12,82	0,45	0,49	8,89
Vazão	1466,42	1474,48	1474,83	0,02	1458,65	1458,94	0,02
Vazão de fundo da coluna em Kg/h							
	F=85,0	F=68,0			F=102,0		
	Aspen	Aspen	Classic	Desvio(%)	Aspen	Classic	Desvio(%)
Etil-benzeno	1361,93	977,85	978,35	0,05	1748,58	1748,55	0,00
P-xileno	978,74	726,55	725,57	0,13	1230,37	1230,36	0,00
M-xileno	2212,94	1657,92	1655,09	0,17	2767,17	2765,25	0,07
O-xileno	1126,88	882,55	884,71	0,24	1371,87	1373,72	0,13
124-tm-benz	2122,72	1698,24	1699,05	0,05	2547,01	2550,15	0,12
Vazão	7803,21	5943,11	5942,77	0,01	9665,00	9668,03	0,03

Tabela 5.2.c - Tabela comparativa entre a simulação realizada pelo ASPEN e a simulação dinâmica (programa CLASSIC)

Vazão de topo da coluna em Kg/h							
	QR=0,84	QR=0,67			QR=1,01		
	Aspen	Aspen	Classic	Desvio(%)	Aspen	Classic	Desvio(%)
Etil-benzeno	556,72	442,84	442,49	0,08	669,11	668,72	0,06
P-xileno	272,64	216,36	217,05	0,32	329,17	330,30	0,34
M-xileno	540,29	428,62	430,14	0,35	652,85	655,10	0,34
O-xileno	96,39	77,14	75,65	1,93	115,80	113,69	1,82
124-tm-benz	0,38	0,37	0,39	5,41	0,48	0,60	25,00
Vazão	1466,42	1165,33	1165,72	0,03	1767,41	1768,41	0,06
Vazão de fundo da coluna em Kg/h							
	QR=0,84	QR=0,67			QR=1,01		
	Aspen	Aspen	Classic	Desvio(%)	Aspen	Classic	Desvio(%)
Etil-benzeno	1361,93	1476,47	1476,69	0,01	1249,59	1250,26	0,05
P-xileno	978,74	1035,36	1034,23	0,11	922,32	920,82	0,16
M-xileno	2212,94	2325,16	2323,10	0,09	2100,80	2097,07	0,18
O-xileno	1126,88	1146,77	1148,19	0,12	1108,09	1110,94	0,26
124-tm-benz	2122,72	2122,92	2124,53	0,08	2122,73	2125,09	0,11
Vazão	7803,21	8106,68	8106,74	0,00	7503,53	7504,18	0,01

5.6 CONCLUSÃO

A modelagem matemática rigorosa de uma coluna de destilação multicomponente em regime transiente é extremamente complexa. Para tornar a solução exequível, mesmo contando com os computadores modernos, é necessário a introdução de restrições. Porém as simplificações não devem comprometer a generalidade do modelo que representa o fenômeno físico da separação. Neste trabalho as restrições que foram feitas levaram em consideração a manutenção da generalidade do modelo e a fidelidade com a coluna fisicamente instalada na COPENE. Observando os resultados obtidos da simulação da modelagem dinâmica e os resultados obtidos do programa ASPEN, verificamos que o desvio relativo apresentado nas vazões mássicas foi inferior a 1% para a maioria dos componentes, o que comprova a eficiência do programa e do modelo.

A escolha das variáveis a serem perturbadas foi definida a partir da experiência prática operacional da coluna. As três variáveis manipuladas, ou seja, a vazão de carga da coluna, a carga térmica do refeedor e a razão de refluxo, são os parâmetros que mais sofrem mudanças no “dia-a-dia” da unidade.

Quando a coluna foi perturbada na razão de refluxo observou-se o seguinte comportamento:

- Na seção de topo da coluna a concentração molar dos componentes varia lentamente com o tempo e o novo estado estacionário só ocorre nas proximidades dos 125 minutos, enquanto que na corrente de fundo a estabilidade é atingida nos primeiros 50 minutos. Este fenômeno pode ser entendido mediante dois aspectos: a) a razão de refluxo altera diretamente o cálculo da vazão da corrente de topo e na composição dos seus componentes; b) o acúmulo de líquido no topo da coluna (condensador + vaso de topo) é superior ao acúmulo de líquido no fundo da mesma (refeedor).
- Os demais componentes atingem o novo estado estacionário em um tempo bem menor que o etil-benzeno.
- O aumento da razão de refluxo é benéfico, pois aumenta a pureza do etil-benzeno na corrente de topo, muito embora cause uma redução na vazão total de topo produzida

Quanto à alteração na vazão de alimentação, observamos que o etil-benzeno na corrente de topo praticamente não é influenciado pelas perturbações. Para $F=68,0$ Kmol/h a composição

de topo varia lentamente, até atingir o novo estado estacionário, já para o caso de aumento de vazão $F=102,0$ Kmol/h a variação é praticamente desprezível.

Verificou-se também que a vazão mássica do etil-benzeno no topo permanece praticamente inalterada. Porém, na região de fundo este comportamento é totalmente diferente, não só a composição sofre alteração, como principalmente a vazão de fundo. O aumento da vazão de carga para $F=102,0$, provoca um aumento na concentração e também da vazão de etil-benzeno pelo fundo. A diminuição da carga provoca uma diminuição da concentração e da vazão.

Quando a carga térmica é reduzida para $QR=0,67$ MMKcal/h a vazão de topo do etil-benzeno diminui ao mesmo tempo em que aumenta a vazão de fundo, porém a composição se comporta de forma diferente, praticamente não se altera na corrente de topo e verifica-se um aumento de concentração na corrente de fundo da coluna. Para a segunda perturbação $QR=1,01$ MMKcal/h, as vazões de topo e de fundo têm um comportamento inverso à perturbação anterior, ou seja, a vazão do etil-benzeno aumenta no topo e diminui no fundo, já a composição tanto diminui na corrente de topo como na corrente de fundo.

CAPÍTULO 6

MODELAGEM DINÂMICA COM RECOMPRESSÃO DE VAPOR

6.1 INTRODUÇÃO

No Capítulo 3 deste trabalho foi realizada a simulação da coluna em estudo no estado estacionário e na forma convencional. No Capítulo 4 estudou-se a coluna ainda no estado estacionário, porém introduzindo um sistema de recompressão de vapor do topo, com o objetivo de se eliminar a utilização de vapor d'água no refeedor. Por último no Capítulo 5 observamos o comportamento dinâmico da coluna na sua forma convencional, com condensador e refeedor. Para a última etapa deste trabalho, foi feita uma síntese dos estudos realizados nos Capítulos 4 e 5, ou seja, neste capítulo se analisará a dinâmica da coluna após a implementação do sistema de recompressão de vapor.

O objetivo desta etapa é de observar o comportamento dos componentes na corrente de topo e na corrente de fundo, no sistema com recompressão de vapor, quando este é perturbado por alguma variável, como por exemplo: alterações na razão de refluxo, na carga térmica do refeedor ou na vazão de carga da coluna. Novamente utilizou-se a mesma estratégia do capítulo anterior, ou seja, a cada incremento implementado em uma das variáveis citadas acima, foi observado, via análise gráfica, o comportamento ao longo do tempo das demais variáveis.

Também foi feita uma análise comparativa entre o comportamento dinâmico da coluna convencional e da coluna com recompressão de vapor, com o objetivo de se determinar a influência do sistema de recompressão no tempo de resposta das variáveis.

6.2 MODELAGEM DINÂMICA DO SISTEMA DE RECOMPRESSÃO DE VAPOR

A partir do programa desenvolvido no Capítulo 5, novas rotinas foram desenvolvidas e adaptadas ao programa original da seguinte forma:

1. Retirou-se do programa original a etapa de cálculo do condensador.
2. Modelou-se dinamicamente todas as etapas do sistema de recompressão.
3. Codificou-se em FORTRAN todas as novas equações, usando a mesma notação do programa original.

4. Fez-se a junção do programa original com a parte do programa referente as etapas de recompressão.

Na Figura 6.1 é mostrado um esquema básico das novas rotinas introduzidas no programa original. Os quadrados com o fundo branco representam estas rotinas.

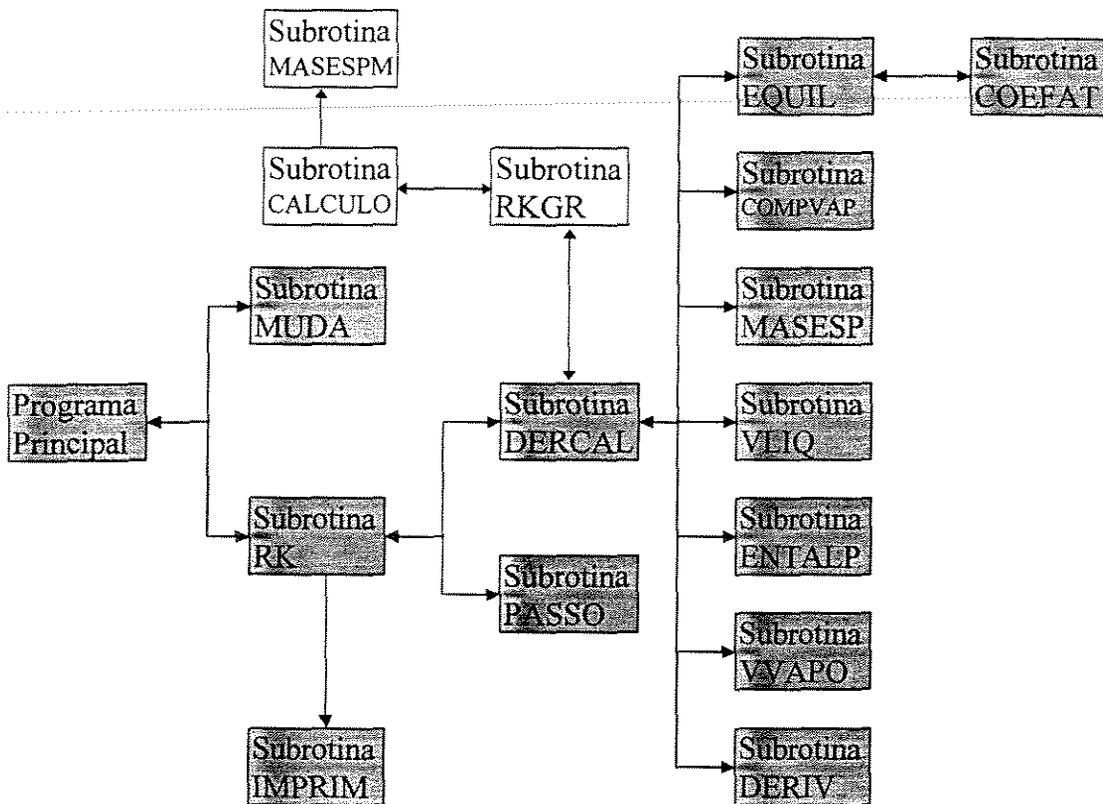


Figura 6.1 - Diagrama de blocos simplificado para a simulação com recompressão

As subrotinas tem o mesmo significado já descritos no Capítulo 5, exceto as que foram acrescentadas para o cálculo da recompressão:

SUBROTINAS:

- CALCULO: Calcula a vazão de líquido e a composição da fase líquida.
- MASESPM: Calcula a densidade pelo método de Rackett para o sistema de recompressão.
- RKGR: Faz a integração do sistema de equações diferenciais do balanço de massa do sistema de recompressão através do método de Runge-Kutta. Esta rotina é específica para o sistema de recompressão.

Nos itens a seguir, será feita a modelagem matemática, tanto do balanço de massa como do balanço de energia em cada equipamento utilizado no sistema de recompressão de vapor. Porém não será considerada a modelagem do sistema de tubulação, pois apesar de aumentar significativamente a quantidade de dutos do sistema de recompressão em relação ao sistema convencional, a velocidade de escoamento é muito alta, sendo assim, podemos desconsiderar o tempo gasto neste percurso.

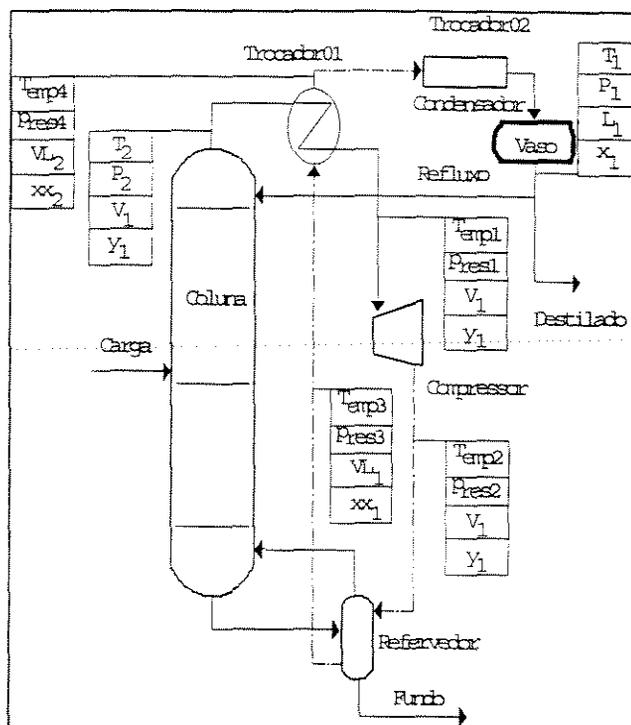


Figura 6.2 - Diagrama esquemático da recompressão

Para uma melhor ilustração das próximas etapas, utilizaremos como referência a Figura 6.2.

6.2.1 Trocador de Calor de Superaquecimento (Trocador 01-lado frio)

Este trocador tem a finalidade de superaquecer o vapor saturado do topo da coluna com o objetivo de evitar a condensação durante a recompressão. Como a velocidade de vapor é muito alta, cerca de 20 a 30 m/s, o “hold-up” de vapor neste trocador é praticamente desprezível, logo não se comete erro significativo desconsiderando-se o transiente deste sistema.

Para efeito de modelagem, consideramos apenas a transferência de calor no estado estacionário, mantendo sempre a temperatura de saída (T_{emp1}) em 152,0 °C.

$$Q_1 = \sum_{i=1}^{NC} (M_i C_{pi}^v) (T_{emp1} - T_2) \tag{6.1}$$

6.2.2 Compressor

O compressor tem como função a elevação da temperatura e da pressão da corrente de vapor superaquecido, até atingir a quantidade de energia necessária para a coluna e para o

superaquecimento. Neste caso há apenas transferência de energia para o sistema, a massa que entra e que sai permanece inalterada.

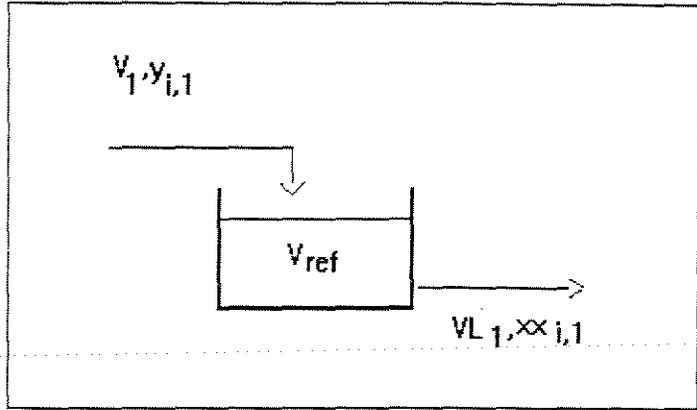


Figura 6.3 - Diagrama esquemático do refervedor/condensador

Heyen e seus colaboradores (1994) estudando a dinâmica de turbinas a gás e compressores constataram que estes sistemas quando perturbados, rapidamente atingem o novo estado

estacionário. Os autores modelaram dinamicamente um sistema composto de um compressor e uma válvula controladora a jusante. Foi introduzido no sistema uma perturbação através da variação de abertura da válvula. A válvula foi aberta de 15 para 25% e segundo os autores, o tempo que o sistema (compressor + válvula) levou para atingir o novo estado estacionário foi inferior a 1,5 segundos.

Levando em consideração a análise feita no Capítulo 5, a coluna em estudo para algumas perturbações, leva cerca 125 minutos para se estabilizar em um novo estado estacionário. Logo, comparando o tempo requerido pelo sistema e o tempo requerido pelo compressor, podemos considerar, para efeito de modelagem, o compressor como um sistema estático.

$$\frac{P_{res1}}{P_{res2}} = \left(\frac{T_{emp1}}{T_{emp2}} \right)^{\frac{n}{n-1}} \tag{6.2}$$

$$\frac{n}{n-1} = \left(\frac{k}{k-1} \right) E_p \tag{6.3}$$

$$k = \frac{\sum_{i=1}^{NC} y_i C_p}{\sum_{i=1}^{NC} y_i C_v} \tag{6.4}$$

onde E_p e coeficiente politrópico e $C_v=C_p-R$.

6.2.3 Refervedor

A modelagem do refervedor/condensador foi realizada considerando este sistema como tanque de mistura perfeita e volume constante, ou seja, o acúmulo de massa no refervedor é igual a diferença entre a massa que entra no sistema e a massa que sai, ver Figura 6.3.

$$\frac{dM_{ref}}{dt} = V_1 - VL_1 \quad (6.5)$$

$$\frac{d(M_{ref} xx_{i,1})}{dt} = V_1 y_{i,1} - VL_1 xx_{i,1} \quad (6.6)$$

Como,

$$xx_{i,1} \frac{dM_{ref}}{dt} + M_{ref} \frac{dxx_{i,1}}{dt} = V_1 y_{i,1} - VL_1 xx_{i,1} \quad (6.7)$$

Substituindo a Equação (6.5) em (6.7), temos:

$$\frac{dxx_{i,1}}{dt} = \frac{V_1}{M_{ref}} (y_{i,1} - xx_{i,1}) \quad (6.8)$$

Sabendo-se que:

$$M_{ref} = V_{ref} \rho_{ref} \quad (6.9)$$

$$\frac{dM_{ref}}{dt} = V_{ref} \frac{d\rho_{ref}}{dt} \quad (6.10)$$

Logo a vazão de líquido que sai do refervedor é calculada por:

$$VL_1 = V_1 - V_{ref} \frac{d\rho_{ref}}{dt} \quad (6.11)$$

onde,

$$\frac{d\rho_{ref}}{dt} = \rho_{ref}^2 \left[\frac{1}{\rho_{NC}} \sum_{i=1}^{NC-1} \frac{dxx_{i,1}}{dt} - \sum_{i=1}^{NC-1} \frac{1}{\rho_i} \frac{dxx_{i,1}}{dt} \right] \quad (6.12)$$

Devido a complexidade da dinâmica do balanço de energia no estado transiente para sistemas com mudança de fase, e por considerarmos que a transferência de calor é muito mais rápida que a transferência de massa, adotamos para o cálculo do balanço de energia o estado estacionário com o seguinte algoritmo:

1. Cálculo do ponto de bolha da corrente comprimida. Após determinar a temperatura do ponto de bolha, calcula-se a quantidade de calor sensível fornecido ao fundo da coluna.

2. Cálculo da quantidade de calor latente fornecido.
3. Resfriamento do líquido até a temperatura na qual todo calor necessário para o aquecimento do fundo da coluna tenha sido fornecido.

6.2.4 Trocador de Calor de Superaquecimento (Trocador 01-lado quente)

A corrente comprimida após trocar calor no refeedor e se liqüefazer, é enviada para o trocador de calor para fornecer energia para o superaquecimento da corrente de topo, conforme item 6.2.1. É importante lembrar que no cálculo do compressor foi considerado que a corrente de vapor após a compressão fornecerá energia para o refeedor e para o superaquecimento do vapor de topo.

Na Figura 6.4 é mostrado um esquema para o cálculo do trocador. Para a modelagem dinâmica do trocador, foram feitas as mesmas restrições definidas no refeedor, ou seja, para o cálculo de balanço de massa considerou-se um tanque de mistura perfeita e volume constante. Para o cálculo do

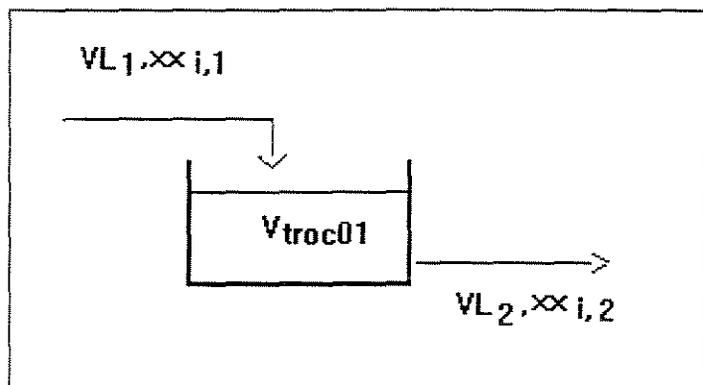


Figura 6.4 - Diagrama esquemático do pré-aquecedor

balanço de energia, sabendo-se a quantidade de calor que foi necessária para o superaquecimento (Q_1), calculou-se a temperatura de saída da corrente da quente. Para este trocador, o importante é manter constante a temperatura de saída da corrente de vapor a ser comprimida.

$$\frac{dM_{\text{troc01}}}{dt} = VL_1 - VL_2 \tag{6.13}$$

$$\frac{d(M_{\text{troc01}} xx_{i,2})}{dt} = VL_1 xx_{i,1} - VL_2 xx_{i,2} \tag{6.14}$$

Como,

$$xx_{i,2} \frac{dM_{\text{troc01}}}{dt} + M_{\text{troc01}} \frac{dxx_{i,2}}{dt} = VL_1 xx_{i,1} - VL_2 xx_{i,2} \tag{6.15}$$

Substituindo a Equação (6.14) em (6.15), temos:

$$\frac{dxx_{i,2}}{dt} = \frac{VL_1}{M_{\text{troc01}}} (xx_{i,1} - xx_{i,2}) \tag{6.16}$$

Sabendo-se que:

$$M_{\text{troc01}} = V_{\text{troc01}} \rho_{\text{troc01}} \tag{6.17}$$

$$\frac{dM_{\text{troc01}}}{dt} = V_{\text{troc01}} \frac{d\rho_{\text{troc01}}}{dt} \tag{6.18}$$

Logo a vazão de líquido que sai do trocador 01 é calculada por:

$$VL_2 = VL_1 - V_{\text{troc01}} \frac{d\rho_{\text{troc01}}}{dt} \tag{6.19}$$

onde,

$$\frac{d\rho_{\text{troc01}}}{dt} = \rho_{\text{troc01}}^2 \left[\frac{1}{\rho_{\text{NC}}} \sum_{i=1}^{\text{NC}-1} \frac{dxx_{i,2}}{dt} - \sum_{i=1}^{\text{NC}-1} \frac{1}{\rho_i} \frac{dxx_{i,2}}{dt} \right] \tag{6.20}$$

Para o cálculo de balanço de energia:

$$T_{\text{emp4}} = T_{\text{emp3}} - \frac{Q_1}{\sum_{i=1}^{\text{NC}} (M_i C_{pi}^L)} \tag{6.21}$$

6.2.5 Condensador + Vaso de topo (Trocador 02)

Como última etapa do sistema de recompressão, o trocador 02 (condensador+vaso de topo) tem a finalidade de resfriar a corrente de líquido condensado até atingir a temperatura de refluxo. A fonte de refrigeração depende da utilidade futura do produto de topo. Quando este é destinado para a produção de p-xileno via processo de adsorção, a presença de água na corrente deve ser praticamente zero, logo o produto refrigerante mais indicado para este caso é o ar atmosférico; se o produto de topo destina-se a outras finalidades, deve-se analisar qual fluido refrigerante é o mais apropriado. Na Figura 6.5 é mostrado um esquema para o cálculo do trocador.

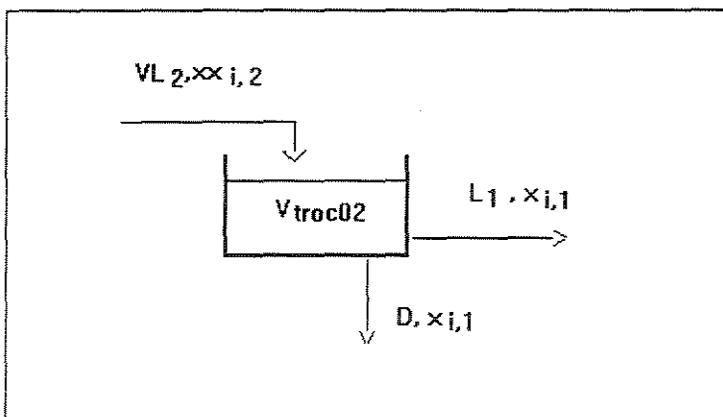


Figura 6.5 - Diagrama esquemático do condensador

Quanto à modelagem, novamente foram feitas as mesmas restrições utilizadas tanto no refeedor, como no trocador 01.

$$\frac{dM_{\text{troc02}}}{dt} = VL_2 - L_1 - D \quad (6.22)$$

$$\frac{d(M_{\text{troc02}} x_{i,1})}{dt} = VL_2 x_{i,2} - L_1 x_{i,1} - Dx_{i,1} \quad (6.23)$$

Como,

$$x_{i,1} \frac{dM_{\text{troc02}}}{dt} + M_{\text{troc02}} \frac{dx_{i,1}}{dt} = VL_2 x_{i,2} - L_1 x_{i,1} - Dx_{i,1} \quad (6.24)$$

Substituindo a Equação (6.22) em (6.24), tem-se:

$$\frac{dx_{i,1}}{dt} = \frac{VL_2}{M_{\text{troc02}}} (x_{i,2} - x_{i,1}) \quad (6.25)$$

Como:

$$D = \frac{L_1}{RR} \quad (6.26)$$

Sabendo-se que:

$$M_{\text{troc02}} = V_{\text{troc02}} \rho_{\text{troc02}} \quad (6.27)$$

$$\frac{dM_{\text{troc02}}}{dt} = V_{\text{troc02}} \frac{d\rho_{\text{troc02}}}{dt} \quad (6.28)$$

Substituindo a Equação (6.26) em (6.22) tem-se:

$$\frac{dM_{\text{troc02}}}{dt} = VL_2 - L_1 - \frac{L_1}{RR} \quad (6.29)$$

Substituindo a Equação (6.28) em (6.29) e reorganizando temos a vazão de líquido que sai do trocador 02:

$$L_1 = \frac{VL_2 - V_{\text{troc02}} \frac{d\rho_{\text{troc02}}}{dt}}{1 + \frac{1}{RR}} \quad (6.30)$$

onde,

$$\frac{d\rho_{\text{troc02}}}{dt} = \rho_{\text{troc02}}^2 \left[\frac{1}{\rho_{\text{NC}}} \sum_{i=1}^{\text{NC}-1} \frac{dx_{i,1}}{dt} - \sum_{i=1}^{\text{NC}-1} \frac{1}{\rho_i} \frac{dx_{i,1}}{dt} \right] \quad (6.31)$$

Para o cálculo de balanço de energia:

$$Q_2 = \sum_{i=1}^{NC} (M_i C_{pi}^L) (T_{emp4} - T_1) \tag{6.32}$$

6.3 ANÁLISE COMPARATIVA DA DINÂMICA DA COLUNA CONVENCIONAL E COM RECOMPRESSÃO DE VAPOR

Nesta seção se fará uma análise comparativa do comportamento dinâmico da coluna na sua forma convencional, conforme resultados mostrados no Capítulo 5, e após ser implementado o sistema de recompressão de vapor. Esta análise tem como objetivo verificar o atraso no tempo de resposta das composições e vazões dos componentes, tanto no topo como no fundo, em virtude do sistema de recompressão.

Novamente a partir da configuração básica já descrita nos capítulos anteriores, o sistema será perturbado nas mesmas variáveis, ou seja, razão de refluxo, carga térmica no refeedor e na vazão de alimentação. O incremento realizado em cada uma das variáveis anteriormente citadas também obedece os mesmos critérios descritos no Capítulo 5.

Para se fazer uma análise completa envolvendo todos os componentes seria necessário

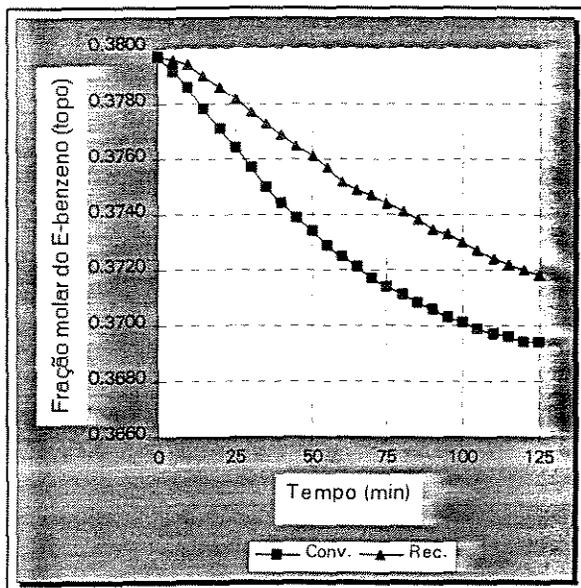


Figura 6.6 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de topo no sistema convencional e com recompressão para RR=5

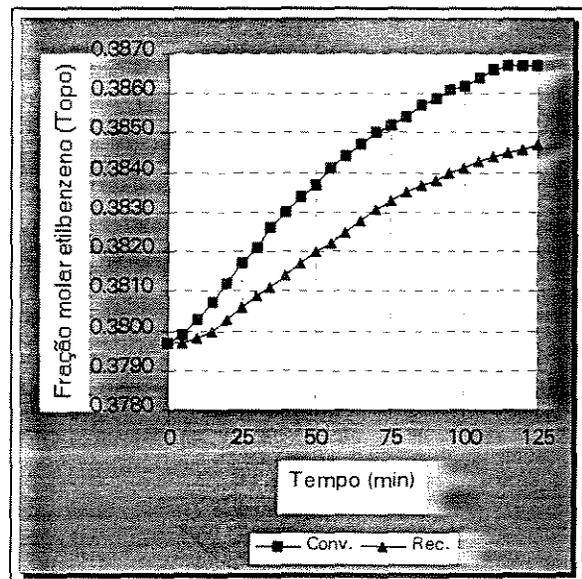


Figura 6.7 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de topo para o sistema convencional e com recompressão para RR=7

avaliar 120 gráficos retratando o comportamento de cada componente após a perturbação. Porém, como o objetivo principal é avaliar o comportamento do componente etil-benzeno, o estudo será feito apenas nos casos onde a mudança no comportamento foi significativa.

Nos gráficos que serão mostrados a seguir, as curvas caracterizadas com ícones quadrados representam a composição molar e a vazão mássica na coluna convencional e as curvas caracterizadas com os ícones triangulares representam a composição molar e a vazão mássica da coluna com o sistema de recompressão de vapor.

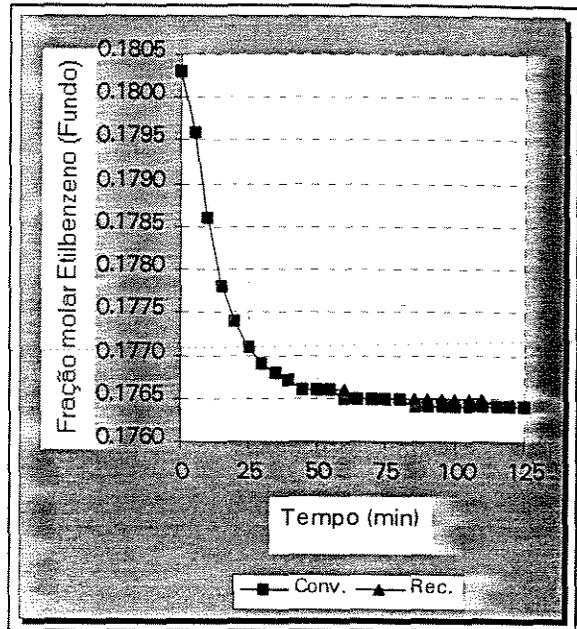


Figura 6.8 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo para o sistema convencional e com recompressão para RR=5

6.3.1 Perturbação na Razão de Refluxo (RR)

A perturbação na razão de refluxo no sistema com recompressão obedeceu os mesmos valores do sistema sem recompressão, ou seja, variou-se de RR=6,0 para RR=5,0 e de RR=6,0 para RR=7,0. A análise gráfica será feita comparando a composição e a vazão do componente etil-benzeno na corrente de topo e na corrente de fundo.

Na Figura 6.6 é mostrado a variação da fração molar do componente etil-benzeno na corrente de topo quando a razão de refluxo foi alterada de RR=6,0 para RR=5,0. Observa-se que ao término de 125 minutos o sistema

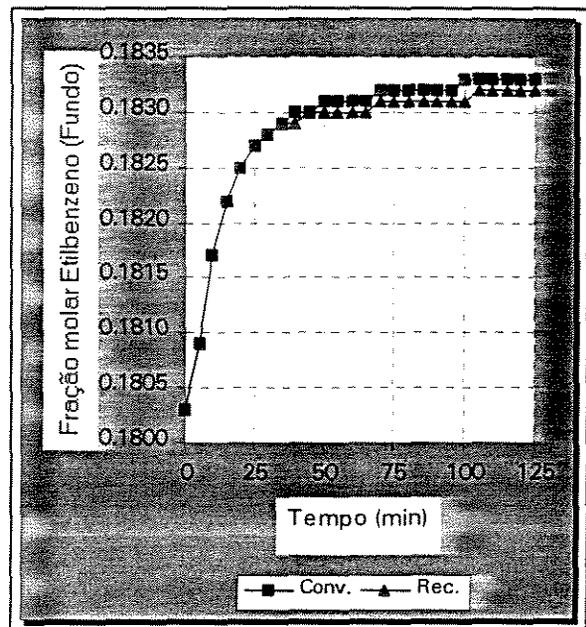


Figura 6.9 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo para o sistema convencional e com recompressão para RR=7

convencional está próximo do novo estado estacionário enquanto que o sistema com recompressão encontra-se ainda distante desse estado. O mesmo comportamento é observado quando a razão de refluxo é alterada de $RR=6,0$ para $RR=7,0$, conforme mostrado na Figura 6.7.

Na região de fundo da coluna, como mostram as Figuras 6.8 e 6.9, a variação da razão de refluxo não provoca alterações significativas no perfil de composição. Tanto o sistema convencional quanto o sistema com recompressão de vapor apresentam praticamente o mesmo perfil de composição.

Os resultados observados nas Figuras 6.6 a 6.9 de certa forma já eram esperados, pois o sistema de recompressão acrescenta na região de topo da coluna novos equipamentos, introduzindo volumes mortos que provocam amortecimento no tempo de resposta do sistema, quando perturbado. Como na região de fundo não foi introduzido nenhum novo equipamento, a semelhança entre os perfis é justificada.

Na região de topo da coluna apesar de apresentar variação no perfil de composição, a variação em termos de vazão mássica é praticamente desprezível. Observando as Figuras 6.10 e 6.11 nota-se que a variação da vazão mássica do componente etil-benzeno não sofre mudanças significativas com a implementação do sistema de recompressão.

Na região de fundo da coluna o perfil de vazão mássica apresentou o mesmo comportamento observado no perfil de composição, ou seja, não foi verificada alteração da vazão do sistema com recompressão em relação ao sistema convencional, conforme Figuras 6.12 e 6.13

No geral a implementação do sistema de recompressão de vapor, quanto a perturbações na razão de refluxo, não apresentou alterações significativas na região de fundo da coluna e por consequência na vazão e composição da corrente de fundo, as alterações em relação ao sistema convencional foram observadas principalmente na composição da corrente de topo.

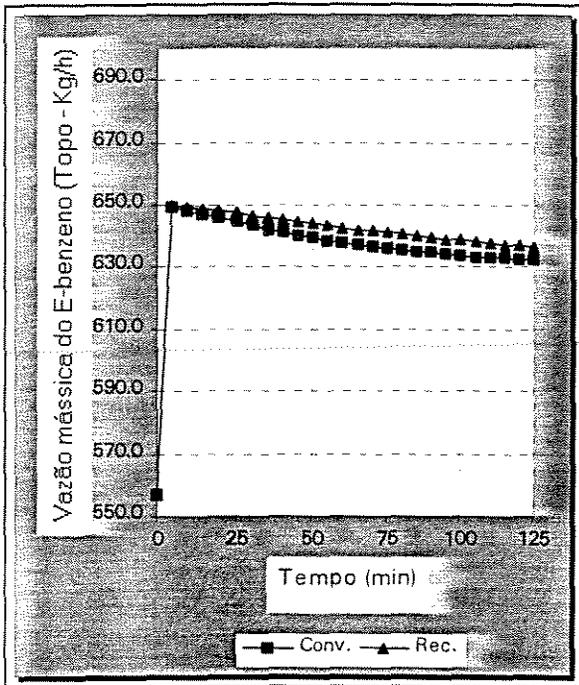


Figura 6.10 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de topo do sistema convencional e com recompressão para RR=5

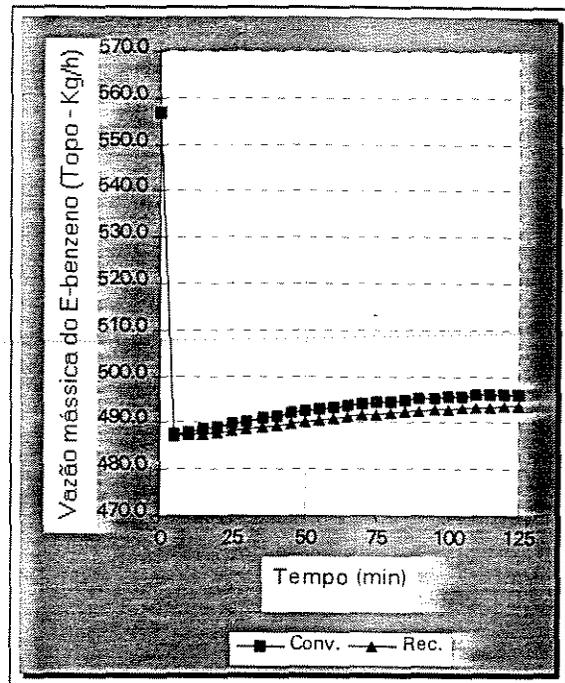


Figura 6.11 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de topo do sistema convencional e com recompressão para RR=7

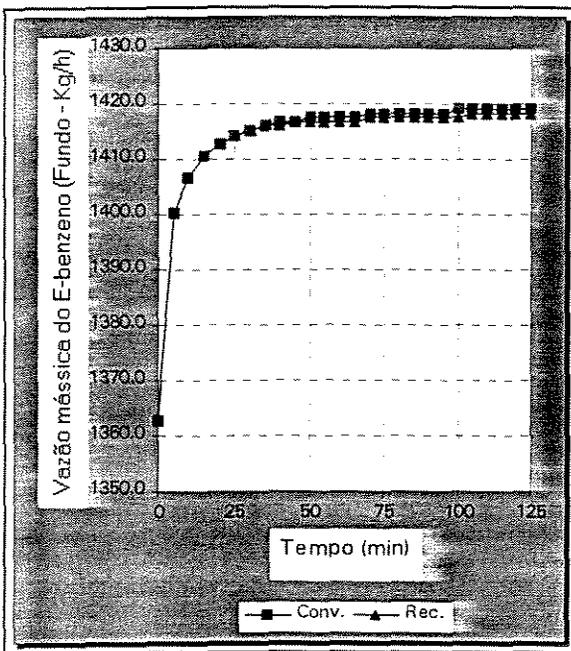


Figura 6.12 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de fundo do sistema convencional e com recompressão para RR=5

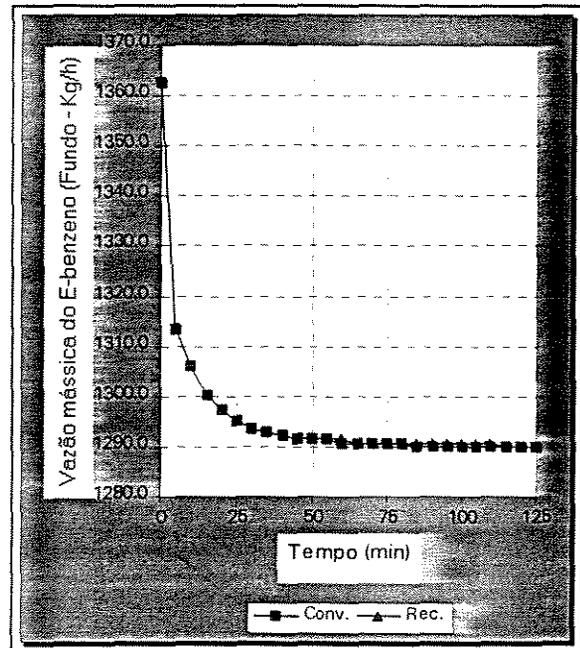


Figura 6.13 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de fundo do sistema convencional e com recompressão para RR=7

6.3.2 Perturbação na Vazão de Alimentação (F)

Para analisar o comportamento do sistema com recompressão quando perturbado na vazão de carga, adotamos os mesmos critérios utilizados no capítulo anterior, ou seja, a partir da configuração básica com vazão mássica de alimentação de 85,0 Kmol/h o sistema foi perturbado inicialmente para uma vazão de 68,0 Kmol/h, e posteriormente para 102,0 Kmol/h. A simbologia usada nos gráficos é a mesma da seção anterior: símbolos quadrados, sistema convencional; símbolos triangulares, sistema com recompressão.

Observando as Figuras 6.14 a 6.17, novamente verificamos que os gráficos resultantes da simulação para variação na vazão de carga apresentaram comportamentos semelhantes aos verificados quando foi alterada a razão de refluxo. Na região de topo da coluna para a vazão de 68,0 Kmol/h o perfil de composição do etil-benzeno foi alterado. A Figura 6.14 mostra nitidamente um retardamento do sistema com recompressão em relação ao sistema convencional, por razões já esclarecidas na seção anterior. Para a vazão de 102,0 Kmol/h o sistema convencional apresentou uma insignificante variação na composição do etil-benzeno de 0,0002, o sistema com recompressão não apresentou a sensibilidade suficiente para detectar esta pequena alteração, ou seja, nenhuma modificação foi sentida em relação ao estado estacionário,

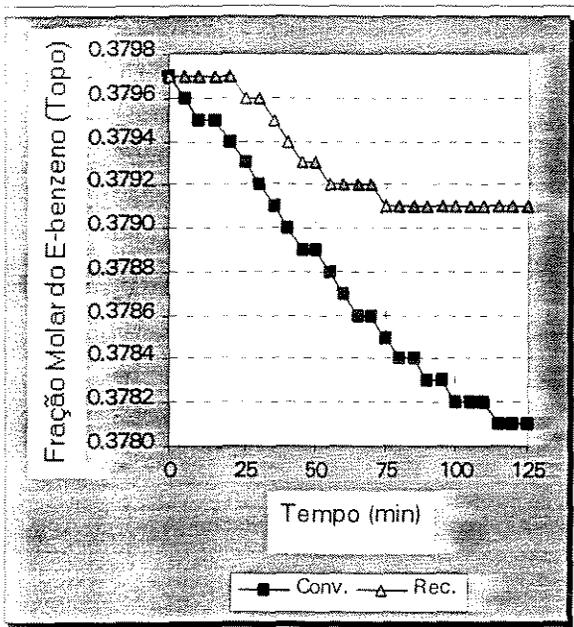


Figura 6.14 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de topo no sistema convencional e com recompressão para $F=68,0$

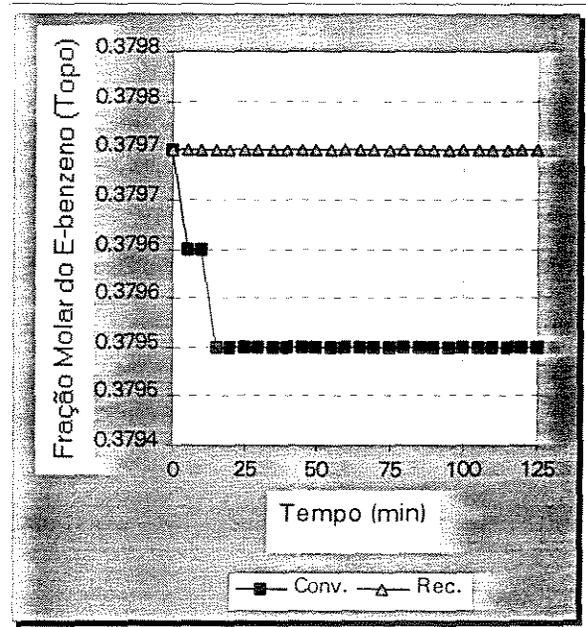


Figura 6.15 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de topo no sistema convencional e com recompressão para $F=102,0$

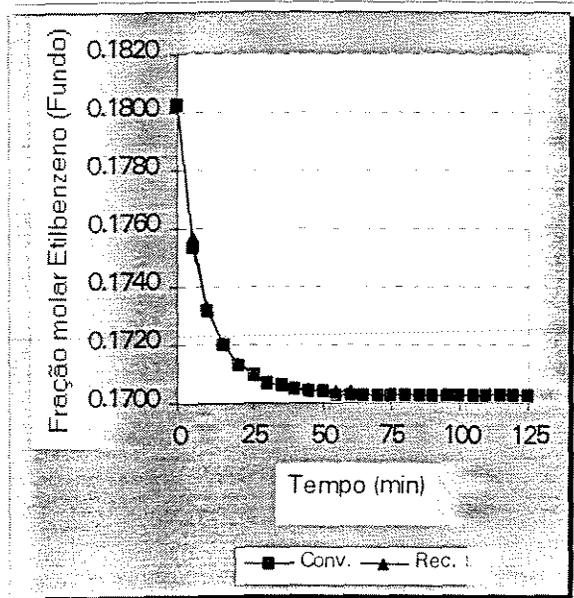


Figura 6.16 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo no sistema convencional e com recompressão para $F=68,0$

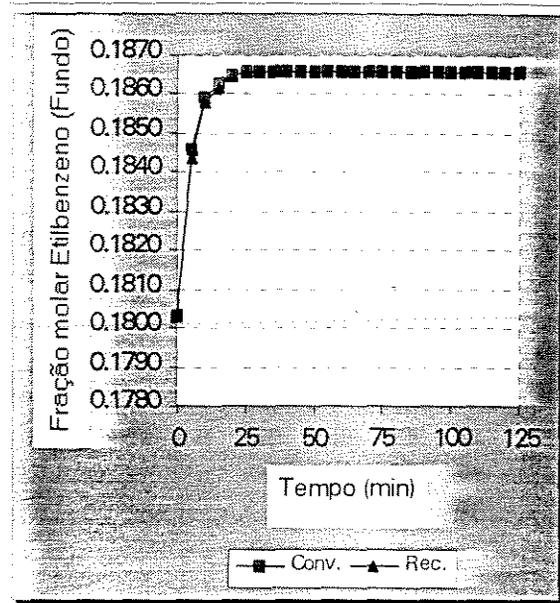


Figura 6.17 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo no sistema convencional e com recompressão para $F=102,0$

o que é perfeitamente aceitável.

As Figuras 6.16 e 6.17 mostram o comportamento da composição do etil-benzeno na região de fundo. Tanto para a diminuição na vazão $F=68,0$ Kmol/h quanto para o aumento $F=102,0$ Kmol/h não foram observadas alterações significativas na composição do etil-benzeno, identicamente ao que foi observado quando o sistema foi perturbado na razão de refluxo.

Em termos de vazão mássica do etil-benzeno, também só foi observada uma pequena mudança do sistema com recompressão em relação ao sistema convencional no topo da coluna para $F=68,0$ Kmol/h. A Figura 6.18 mostra esta pequena diferença existente entre as duas vazões. Para $F=102,0$ Kmol/h não foi observada mudanças nem na vazão de topo, nem na vazão de fundo, também para $F=68,0$ Kmol/h a vazão não se alterou na corrente de fundo. As Figuras 6.19 a 6.21 mostram o comportamento descrito.

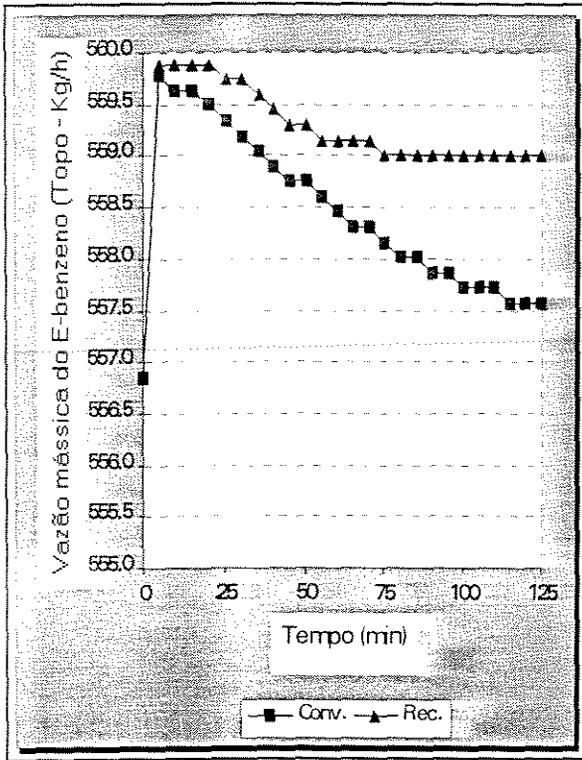


Figura 6.18 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de topo do sistema convencional e com recompressão para $F=68,0$

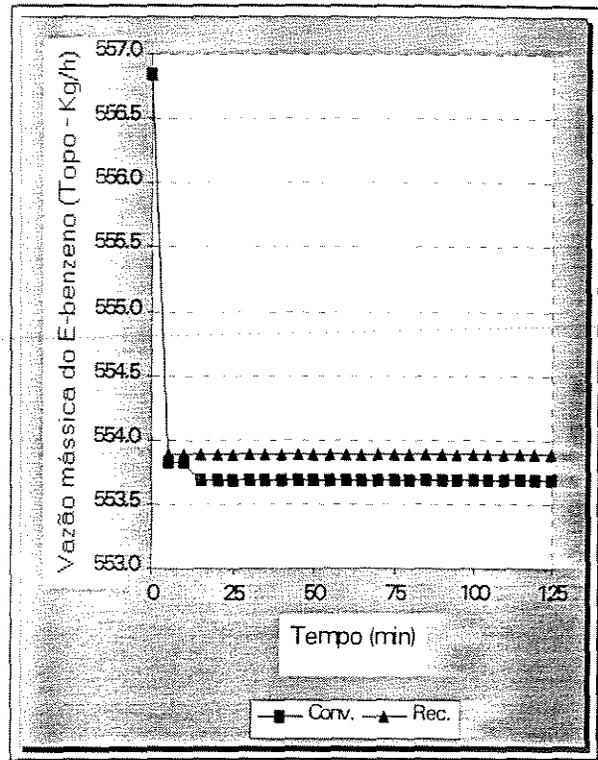


Figura 6.19 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de topo do sistema convencional e com recompressão para $F=102,0$

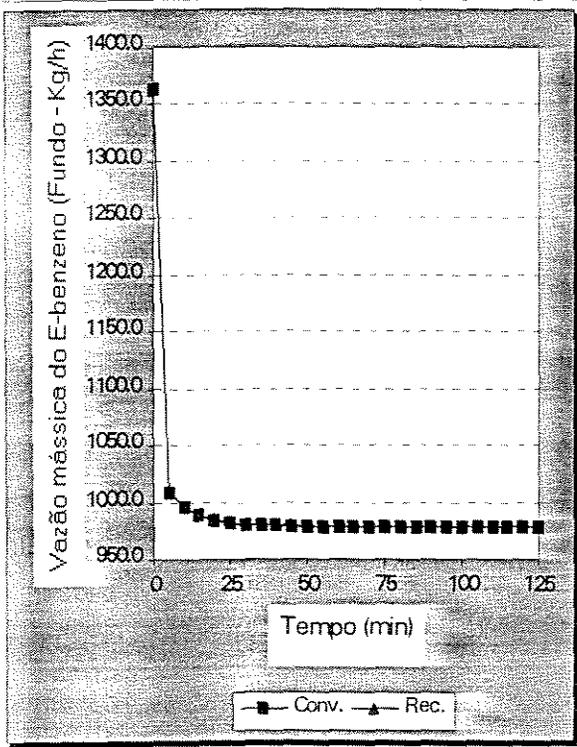


Figura 6.20 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de fundo do sistema convencional e com recompressão para $F=68,0$

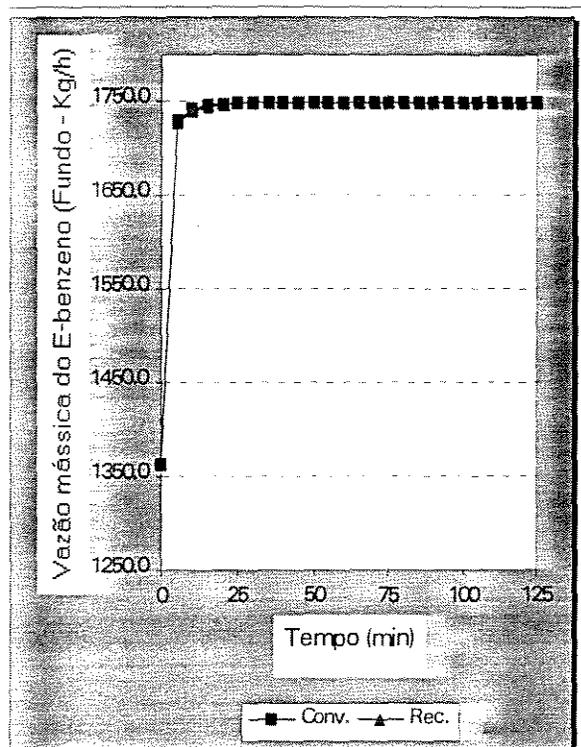


Figura 6.21 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de fundo do sistema convencional e com recompressão para $F=102,0$

6.3.3 Perturbação na Carga Térmica no Refervedor (QR)

Como última etapa deste capítulo estudaremos as variações sofridas pelo componente etil-benzeno no topo e no fundo da coluna com recompressão quando esta é perturbada na carga térmica no refervedor. A análise será feita novamente seguindo os mesmos critérios utilizados no capítulo anterior, a carga térmica de 0,85 MMKcal/h obtida na configuração padrão vai ser alterada inicialmente para 0,67 MMKcal/h e posteriormente alterada para 1,01 MMKcal/h.

A Figura 6.22 mostra o comportamento da composição do etil-benzeno na corrente de topo quando a carga térmica do refervedor foi alterada para $QR=0,67$ MMKcal/h. No sistema convencional observa-se uma pequena variação, quase imperceptível, que cresce inicialmente e que depois decresce. No sistema com recompressão esta pequena variação não é observada, a composição do etil-benzeno permanece igual ao estado estacionário. A Figura 6.23 mostra ainda o comportamento de topo, porém agora para a carga térmica de $QR=1,01$ MMKcal/h e mais uma vez observa-se discrepâncias entre o sistema convencional e o sistema com recompressão. A justificativa para explicar estas diferenças são as mesmas descrita na secção 6.3.1.

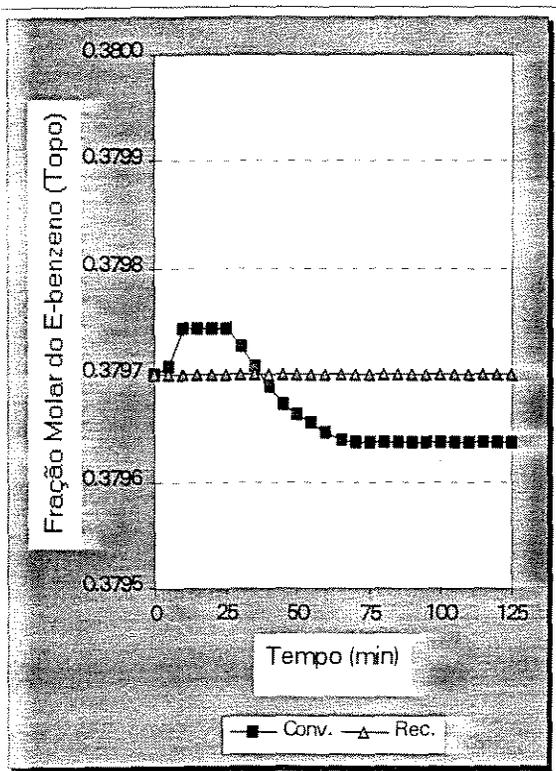


Figura 6.22 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de topo no sistema convencional e com recompressão para $QR=0,67$

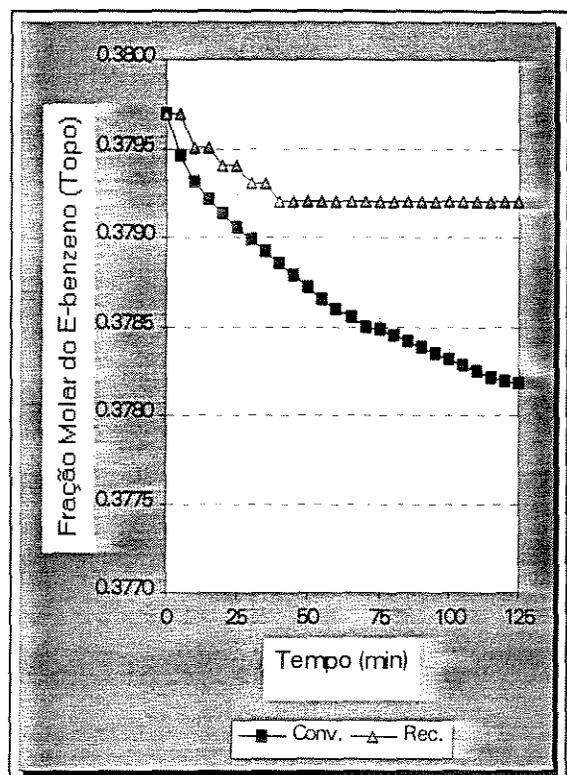


Figura 6.23 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de topo no sistema convencional e com recompressão para $QR=1,01$

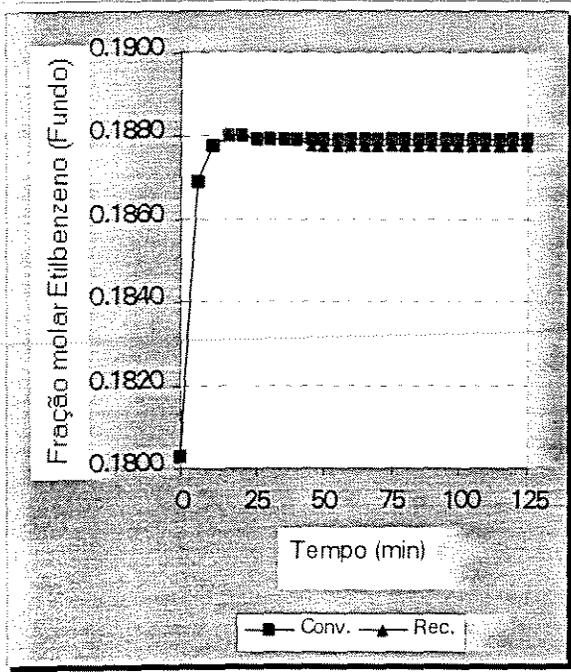


Figura 6.24 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo no sistema convencional e com recompressão para $QR=0,67$

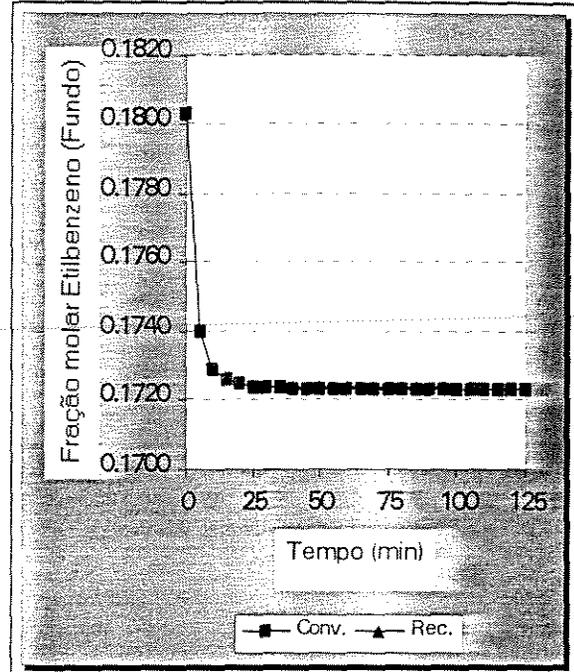


Figura 6.25 - Fração molar do etil-benzeno na corrente de fundo no sistema convencional e com recompressão para $QR=1,01$

As Figuras 6.24 e 6.25 mostram a composição do etil-benzeno no fundo da coluna para o sistema convencional e com recompressão. Como nos casos anteriores não foram observadas mudanças significativas no perfil de composição da corrente de fundo.

Em termos de vazão mássica do etil-benzeno no topo e no fundo, também não se verificou alterações entre o sistema convencional e o sistema com recompressão. Nas Figuras 6.26 a 6.29 é mostrado o comportamento da vazão mássica do etil-benzeno tanto na região de topo quanto na região de fundo para as duas perturbações provocadas na carga térmica do refeedor.

6.4 CONCLUSÃO

O estudo realizado neste capítulo permitiu avaliar a dinâmica da coluna de destilação após implementação de um sistema de recompressão de vapor do topo da coluna. Através de um programa de computação, foi possível simular variações na carga térmica do refeedor, na

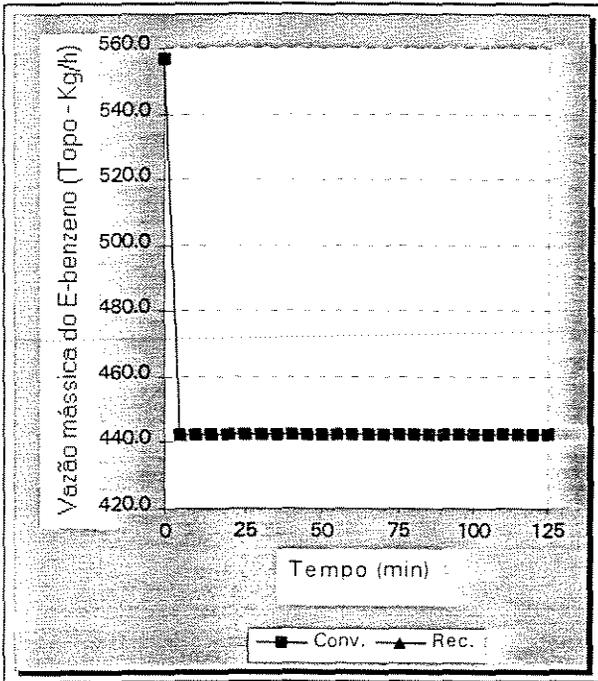


Figura 6.26 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de topo do sistema convencional e com recompressão para $QR=0,67$

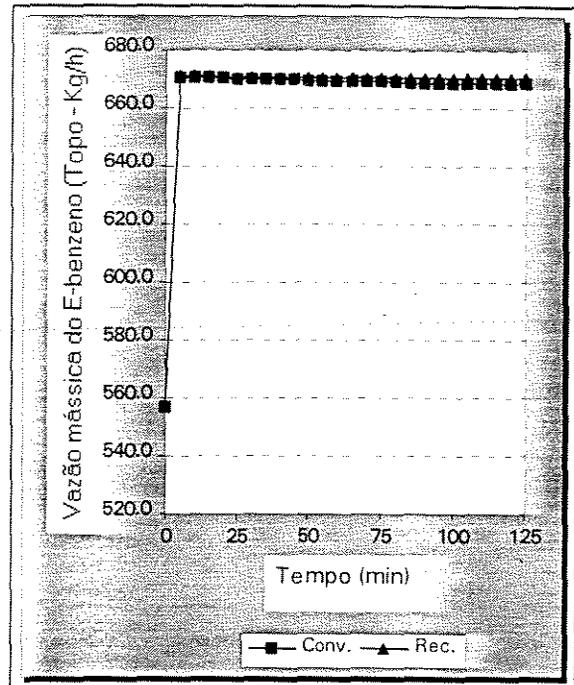


Figura 6.27 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de topo do sistema convencional e com recompressão para $QR=1,01$

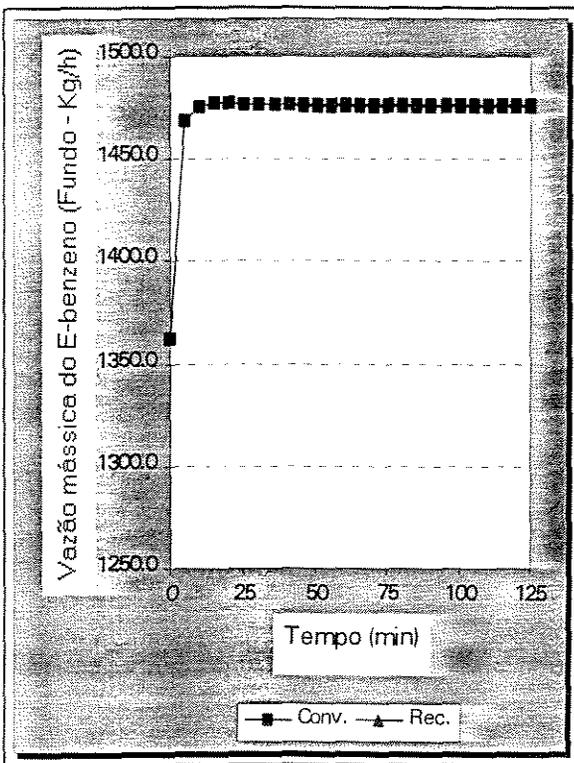


Figura 6.28 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de fundo do sistema convencional e com recompressão para $QR=0,67$

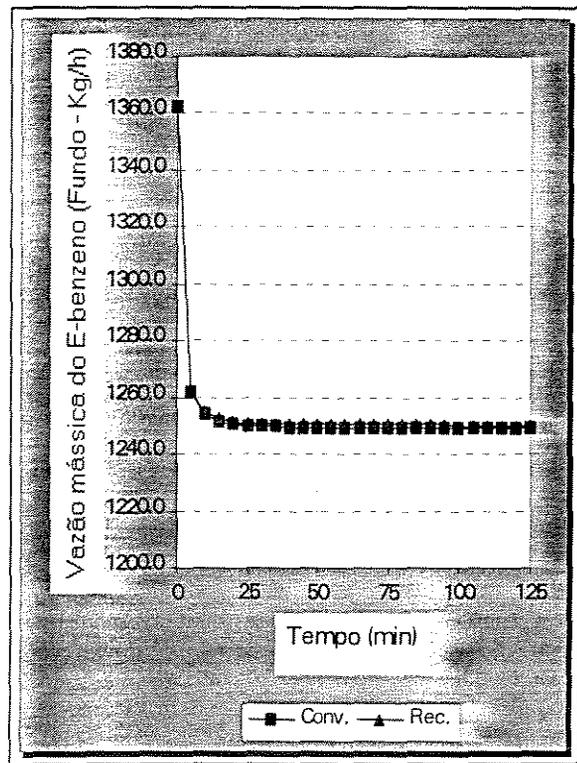


Figura 6.29 - Vazão mássica de etil-benzeno na corrente de fundo do sistema convencional e com recompressão para $QR=1,01$

razão de refluxo e vazão de carga; e após cada perturbação avaliar o comportamento, em relação ao tempo do componente etil-benzeno tanto na corrente de topo como na corrente de fundo.

Para os novos equipamentos introduzidos na coluna de destilação, em virtude da recompressão de vapor, foi feita uma modelagem matemática dinâmica para cada um desses equipamentos. Para o cálculo do balanço de massa, levou-se em consideração a restrição de tanques de mistura homogênea. Para calcular o balanço de energia em cada equipamento, considerou-se o estado estacionário por dois motivos: a) que a transferência de calor é muito mais rápida que a transferência de quantidade de movimento, b) a modelagem dinâmica para o balanço de energia para sistemas com mudanças de fase é extremamente complexa.

Os resultados mostraram que a introdução do sistema de recompressão influenciou apenas na região de topo da coluna. Isto foi observado pela variação, em relação ao sistema convencional, da composição do componente etil-benzeno, principalmente quando o sistema foi perturbado na razão de refluxo, tanto para $RR=5,0$, quanto para $RR=7,0$.

As perturbações na vazão da carga de alimentação e na carga térmica do refeedor, também provocaram alterações na composição de topo do etil-benzeno. Na vazão de alimentação esta alteração só foi percebida para $F=68,0$ Kmol/h, enquanto que para a carga térmica a alteração foi percebida apenas para $QR=1,01$ MMKcal/h.

Na região de fundo da coluna, para todas as perturbações realizadas no sistema, não se verificou alterações na composição do etil-benzeno.

Tanto na região de topo quanto na região de fundo, também não se verificou alterações significativas na vazão mássica do etil-benzeno, o que nos leva a concluir que a implementação do sistema de recompressão de vapor não interfere na região de fundo da coluna.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

7.1 CONCLUSÕES

O processo de globalização da economia mundial tem causado um forte impacto na economia individual de cada país. Além disto, tem provocado mudanças profundas na forma de administração dos meios de produção, cujo reflexo tem sido mais intensivo nos países do chamado “terceiro mundo”, no qual se encontra o Brasil. A competitividade mundial leva os países menos desenvolvidos a uma disputa comercial bastante difícil, pois tem de competir em preço e em qualidade com países denominados de “primeiro mundo”, bem mais aparelhados e desenvolvidos tecnologicamente.

A chave do sucesso industrial consiste em produzir a mesma quantidade, com a mesma qualidade, porém com menor custo; nos últimos anos os fatores que mais influenciaram esta relação foram a informatização e a diminuição do consumo energético. Neste trabalho foi mostrado, através de uma análise teórica, que é possível se obter reduções extremamente significativas no consumo energético de uma planta petroquímica utilizando a técnica da recompressão de vapor.

A destilação foi e ainda é o mecanismo mais utilizado para efetuar a separação de componentes na fase líquida, porém esta técnica quando aplicada na sua forma mais simples torna-se inviável para componentes de baixa volatilidade relativa em virtude do alto consumo energético, como por exemplo, a separação de xilenos mistos. A utilização do vapor do topo comprimido como fonte de energia para o refeedor é ainda um processo pouco estudado, mas que demonstra ser uma alternativa como um futuro extremamente promissor.

Para realização deste estudo utilizou-se uma coluna com 20 pratos existente na COPENE, cuja finalidade é produzir uma corrente de topo rica em etil-benzeno; na alimentação além do etil-benzeno, existe para-xileno, orto-xileno, meta-xileno e 1,2,4-trimetil-benzeno.

Inicialmente, a coluna na sua forma convencional, ou seja com condensador e refeedor foi simulada no estado estacionário, com a finalidade de avaliar se o sistema apresentava características apropriadas para ser aplicada a recompressão de vapor. Os resultados obtidos mostraram que a recompressão de vapor é extremamente benéfica e isto pode ser comprovado em virtude dos seguintes aspectos:

- O vapor de topo da coluna tem carga térmica compatível com a carga térmica requerida pelo refeedor;

- A diferença de temperatura entre o topo e fundo é inferior a 15,0 °C;
- Ao longo da coluna, tanto o perfil de temperatura como o perfil de composição dos componentes não apresentaram pontos de descontinuidades para as diferentes condições operacionais.

Além dos itens acima, também foi visto que a carga térmica necessária no refeedor varia linearmente com a vazão de carga de alimentação, como seria de se esperar, e que um aumento de 50% na razão de refluxo provoca um aumento de cerca de 3 vezes na carga térmica do refeedor.

Apesar do sistema ser favorável a recompressão direta, a instalação de um trocador para superaquecer a corrente de topo traz dois grandes benefícios:

1. Permite a instalação de compressores mais baratos.
2. Aumenta a eficiência térmica global do sistema.

É de extrema importância a procura da temperatura ótima de superaquecimento, da temperatura de recompressão e conseqüentemente da taxa de recompressão. Para o sistema em estudo e adotando como critério um ΔT mínimo de 4,0 °C no refeedor, a temperatura ótima de superaquecimento foi de 152,0 °C, temperatura após a compressão foi de 167,5 °C para uma taxa de recompressão de $\pi=1,8$. Para estes parâmetros a economia em relação ao uso de vapor d'água foi de 80%.

Também foi estudada a relação intrínseca entre o ΔT mínimo requerido no refeedor, a área de troca térmica do refeedor, a razão de recompressão e a potência consumida no compressor. Os pontos ótimos destes parâmetros podem ser encontrados após uma avaliação técnico/econômica relacionando os custos com o investimento inicial e a eficiência térmica desejada.

Além da análise do ponto de vista do estado estacionário, o estudo também foi feito levando em consideração o estado transiente, no qual estudou-se o comportamento dinâmico da coluna, tanto na sua forma convencional, como após a implementação da recompressão de vapor.

A modelagem matemática clássica prato-a-prato foi utilizada e as equações diferenciais foram integradas pelo método de Runge-Kutta. Através de um acompanhamento operacional da coluna, escolheu-se as variáveis para serem perturbadas. No dia-a-dia da unidade as variáveis

que sofriam maiores flutuações eram: a vazão de carga, a carga térmica do refeedor e a razão de refluxo. Por esta razão estas variáveis foram escolhidas para a realização do estudo.

No estado estacionário inicial a razão de refluxo era de $RR=6,0$, a carga térmica do refeedor de $QR=0,845$ MMKcal/h e a vazão de carga de $F=85,0$ Kmol/h. Foram realizadas duas perturbações em cada uma das variáveis, a razão de refluxo foi alterada para $RR=5,0$ e para $RR=7,0$, a carga térmica para $QR=0,67$ e $1,01$ MMkcal/h e vazão de carga para $F=68,0$ e $102,0$ Kmol/h. O comportamento observado foi o seguinte:

- Na seção de topo da coluna a concentração molar dos componentes variam lentamente com o tempo e que o novo estado estacionário só ocorre nas proximidades dos 125 minutos, enquanto que na corrente de fundo a estabilidade é atingida nos primeiros 50 minutos.
- Os demais componentes atingem o novo estado estacionário em um tempo bem menor que o etil-benzeno.
- Que o aumento da razão de refluxo é benéfico, pois aumenta a pureza do etil-benzeno na corrente de topo, muito embora cause uma redução na vazão total de topo produzida, como seria de se esperar para uma mesma carga térmica.
- Observamos que o etil-benzeno na corrente de topo praticamente não é influenciado pelas perturbações na vazão de alimentação. O aumento da vazão de carga para $F=102,0$, provoca um aumento na concentração e também da vazão do etil-benzeno na corrente de fundo. A diminuição da carga provoca uma diminuição da concentração.
- A redução da carga térmica provoca uma diminuição na vazão de topo do etil-benzeno ao mesmo tempo em que aumenta a vazão de fundo. Quando a carga térmica é perturbada para $QR=1,01$ MMKcal/h, as vazões de topo e de fundo têm um comportamento inverso à perturbação anterior, ou seja, a vazão do etil-benzeno aumenta no topo e diminui no fundo, já a composição tanto diminui na corrente de topo como na corrente de fundo.

Analizou-se a influência do sistema de recompressão na dinâmica da coluna. Os resultados mostraram que a introdução do sistema de recompressão influenciou apenas na região de topo da coluna. Na região de fundo, para todas as perturbações realizadas no

sistema, não se verificou alterações significativas. Entre as perturbações realizadas, a razão de refluxo foi a que provocou maior retardamento no tempo de resposta.

Como foi mostrado neste estudo, a recompressão de vapor pode ser aplicada com ganhos energéticos extremamente significativos para separação de xilenos mistos, porém para uma aplicação industrial, devem ser levados em consideração aspectos relevantes como a escala de produção e a disponibilidade de energia elétrica.

7.2 RECOMENDAÇÕES

Para dar prosseguimento à linha de pesquisa estudada neste trabalho, recomendamos os seguintes temas:

- Utilização da dinâmica desenvolvida para definição da filosofia de controle, tanto para a coluna convencional como para a coluna com recompressão em sistemas de malha fechada;
- Refazer o estudo para colunas “splitter” de xilenos com número de pratos que variam entre 130 a 170 e com carga térmica de até 20,0 MMKcal/h. Esta carga térmica é equivalente a 43,4 toneladas de vapor por hora e a redução do consumo energético com a aplicação da recompressão de vapor pode atingir a aproximadamente 3,0 milhões de dólares por ano;
- Estudar o efeito da utilização de recheio estruturado na substituição dos pratos valvulados. Como o recheio estruturado tem perda de carga muito menor que os pratos valvulados, é de se esperar uma melhor performance do sistema;
- Estudar a utilização de trocadores de calor de alta performance no sistema de recompressão com o objetivo de reduzir a área de troca térmica e a razão de recompressão;
- Um outro estudo também pode ser feito usando o método da colocação ortogonal com o intuito de diminuir o tempo de CPU necessário para a integração das equações diferenciais.

ANEXO A

Propriedades Termodinâmicas

Propriedades Termodinâmicas

Componente 1 : etil-benzeno
 Componente 2 : para-xileno
 Componente 3 : meta-xileno
 Componente 4 : orto-xileno
 Componente 5 : 124-trimetil-benzeno

Antoine (Base 10, P^{sat} em mm Hg e Temp. em $^{\circ}\text{C}$) :

A(1): 6.96580	B(1): 1429.55005	C(1): 213.76700
A(2): 6.99053	B(2): 1453.43005	C(2): 215.31000
A(3): 7.00909	B(3): 1462.26599	C(3): 215.11000
A(4): 7.00154	B(4): 1476.39294	C(4): 213.87199
A(5): 7.04380	B(5): 1573.27002	C(5): 208.56000

Massa Específica (mol/cm³ e Temp. em $^{\circ}\text{K}$) :

	Temp. critica ($^{\circ}\text{K}$)	Pres. critica (bar)	Vol. critico (cm ³)	Z de Rackett
1	617.20	36.06	.3740	.2618
2	616.23	35.11	.3790	.2591
3	617.05	35.36	.3760	.2595
4	630.33	37.34	.3690	.2619
5	649.13	32.32	.4300	.2573

Entalpia (C_p em cal/mol C e H_{vap} em cal/mol) :

Temp. Referencia : 148.000 $^{\circ}\text{C}$

C_p liq. (1) : 59.505	C_p vap. (1) : 42.788	H_{vap} (1) : 8325.10
C_p liq. (2) : 57.791	C_p vap. (2) : 41.925	H_{vap} (2) : 8429.22
C_p liq. (3) : 58.237	C_p vap. (3) : 41.994	H_{vap} (3) : 8504.51
C_p liq. (4) : 58.766	C_p vap. (4) : 42.986	H_{vap} (4) : 8719.22
C_p liq. (5) : 64.248	C_p vap. (5) : 49.703	H_{vap} (5) : 9655.79

$k_{ij}=0.0$

ANEXO B

Arquivo Input do Aspen Plus

Arquivo Input do Aspen Plus

TITLE "COLUNA DA-561 "

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='KCAL/HR' &
PRESSURE=ATM TEMPERATURE=C VOLUME=CUM DELTA-T=C PDROP=ATM

DEF-STREAMS CONVEN ALL

RUN-CONTROL MAX-TIME=1200.0

DESCRIPTION " COLUNA DA-561 - TESTE DO MODELO DINAMICO
ARQUIVO COM A BOMBA DE CALOR
NUMERO DE ESTAGIOS REAIS EFF=MURPHREE=75%
CONFIGURACAO 01 - F=9272; RR=6.0 e QR=845911 "

DATABANKS DIPPRPCD / ASPENPCD

PROP-SOURCES DIPPRPCD / ASPENPCD

COMPONENTS

ETILBENZ C8H10-4 ETILBENZ /
P-XILENO C8H10-3 P-XILENO /
M-XILENO C8H10-2 M-XILENO /
O-XILENO C8H10-1 O-XILENO /
124TMBZ C9H12-7 124TMBZ

FLWSHEET FL1

BLOCK DA-561 IN=CARGA OUT=DESTIL1 FUNDO1 REFLUXO1 TOPO REF-EF REF-SF1
BLOCK TROC1 IN=TOPO REF-SQ OUT=COMP-ENT AIR-ENT
BLOCK COMP IN=COMP-ENT OUT=COMP-SAI
BLOCK SEP1 IN=REF-SF OUT=REF-SF2 FUNDO2
BLOCK REFER IN=COMP-SAI REF-EF OUT=REF-SQ REF-SF
BLOCK TROC2 IN=AIR-ENT OUT=AIR-SAI
BLOCK SEP2 IN=AIR-SAI OUT=DESTIL2 REFLUXO2

PROPERTIES SYSOP0

STREAM CARGA

SUBSTREAM MIXED TEMP=148.0 PRES=1.30 MASS-FLOW=9272.00
MASS-FRAC ETILBENZ 20.7 / P-XILENO 13.5 / M-XILENO 29.7 /&
O-XILENO 13.2 / 124TMBZ 22.9

STREAM COMP-ENT TEMP=152.0 PRES=1.1071 MASS-FLOW=12375.0

MOLE-FRAC ETILBENZ 0.3785 / P-XILENO 0.1862 / M-XILENO 0.3693 /&
O-XILENO 0.0655 / 124TMBZ 0.0001

BLOCK DA-561 RADFRAC

PARAM NSTAGE=22 EFF=MURPHREE MAX-SIZE=500000
FEEDS CARGA 14
PRODUCTS DESTIL1 1 L / FUNDO1 22 L
PSEUDO-STREAM REFLUXO1 1 L / TOPO 2 V / REF-EF 21 L / REF-SF1 22 V

P-SPEC 1 1.10 / 22 1.25
COL-SPECS MOLE-RDV=0.0 MOLE-RR=6.0 QN=845911.0
STAGE-EFF 1 1.0 / 2 .750 / 21 .750 / 22 0.10
T-EST 1 104.4 / 2 158.3 / 21 165.1
TRAY-REPORT TRAY-OPTION=ALL-TRAYS PROPERTIES=SET1 SET2

BLOCK TROC1 HEATX
PARAM T-COLD=152
FEEDS HOT=REF-SQ COLD=TOPO
PRODUCTS HOT=AIR-ENT COLD=COMP-ENT

BLOCK COMP COMPR
PARAM TYPE=POLYTROPIC PRATIO=1.9 PEFF=0.75

BLOCK REFER HEATX
PARAM DUTY=1000000 PRES-COLD=1.25
FEEDS HOT=COMP-SAI COLD=REF-EF
PRODUCTS HOT=REF-SQ COLD=REF-SF

BLOCK TROC2 HEATER
PARAM TEMP=141.750 PRES=1.10

BLOCK SEP1 FLASH2
PARAM TEMP=153.9 DUTY=0.0 ;PRES=1.25

BLOCK SEP2 FSPLIT
MOLE-FLOW REFLUXO2 99.90

PROP-SET SET1 RHOMX PHASE=L V UNITS='MOL/CC'

PROP-SET SET2 CPIG UNITS='CAL/MOL-K'

PROP-SET SET3 DHVL UNITS='CAL/MOL'

PROP-SET SET4 CP UNITS='CAL/MOL-K'

STREAM-REPOR MASSFLOW MASSFRAC MOLEFRAC MOLEFLOW PROPERTIES=SET3 SET4

FLWSHEET-RE NOTOTBAL NOSEQUENCE

TRANSFER CALOR
SET BLOCK-VAR BLOCK=REFER SENTENCE=PARAM VARIABLE=DUTY
EQUAL-TO BLOCK-VAR BLOCK=DA-561 SENTENCE=RESULTS VARIABLE=REB-DUTY

SENSITIVITY DELTAT
DEFINE TEMPF STREAM-VAR STREAM=FUNDO1 VARIABLE=TEMP
DEFINE TEMPC STREAM-VAR STREAM=COMP-SAI VARIABLE=TEMP
DEFINE XPOTEN BLOCK-VAR BLOCK=COMP SENTENCE=RESULTS VARIABLE=IND-POWER
DEFINE AREA BLOCK-VAR BLOCK=REFER SENTENCE=RESULTS VARIABLE=AREA-CALC

F DELTAT=TEMPC - TEMPF

TABULATE 1 TEMPC

TABULATE 2 TEMPF

TABULATE 3 XPOTEN

TABULATE 4 AREA

VARY BLOCK-VAR BLOCK=COMP SENTENCE=PARAM VARIABLE=PRATIO

RANGE LIST=1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9 2.0

ANEXO C

Programa Classic

Programa Classic

```

C Programa para calculo dos perfis de composicao e temperatura de
C uma coluna de destilacao a partir da modelagem classica.
C
C
DIMENSION COMP(10,6),EPS(1000),FY(1000),DER(1000)
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/RETAL/Z(10,100),F(100),HF(100),W(100)
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)
COMMON/PFIS3/TC(10),PC(10),VC(10),ZRA(10),DOK(100)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
COMMON/PRI/IMP,TSO
C
C *****
C
C DADOS ESPECIFICOS PARA O SISTEMA DE RECOMPRESSAO
C
DIMENSION DERD(100),FYF(100)
COMMON/RECOMP1/XX(10,5),TEMP(5),ROR(10,5),ROKR(5)
COMMON/RECOMP2/AMA(5),VREFV,VTROC
C
C *****
C
C
OPEN (UNIT=7,FILE='classic.dat',STATUS='OLD')
OPEN (UNIT=9,FILE='termo.dat',STATUS='OLD')
OPEN (UNIT=10,FILE='comp.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=11,FILE='temp.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=12,FILE='inicio.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN (UNIT=13,FILE='saida.dat',STATUS='UNKNOWN')
C
C OPEN (UNIT=10,FILE='comp.dat',STATUS='NEW')
C OPEN (UNIT=11,FILE='temp.dat',STATUS='NEW')
C OPEN (UNIT=12,FILE='inicio.dat',STATUS='NEW')
C OPEN (UNIT=13,FILE='saida.dat',STATUS='NEW')
C
IMP=15
TSO=0.0
C
C DADOS DE ENTRADA
C
WRITE(*,*) 'PASSO DE INTEGRACAO (min) : '
READ(*,*) PASSO
WRITE(*,*) 'TEMPO FINAL DE IMPRESSAO (min) : '
READ(*,*) TFINAL
WRITE(*,*) 'INTERVALO DE IMPRESSAO (min) : '
READ(*,*) FREQ
WRITE(*,*) 'PRECISAO PARA O CALCULO DE (M) E (M.X) : '
READ(*,*) PRECM,PRECMX

```

```

C   CALL TEMPO(1)
   READ(7,*) NC
   READ(7,10)((COMP(I,J),J=1,6),I=1,NC)
10  FORMAT(6A4)
   READ(7,*) NPR,PTOP,PFUND
   READ(7,*) RR,EFIC
   READ(7,*) VCOND,VREF
   READ(7,*) QREF
   READ(7,*) AP,HVF,EE,FLW
   WRITE(12,20)NC,NPR,PTOP,PFUND,RR,VCOND,VREF,QREF
20  FORMAT(/,3X,'COLUNA :',/,3X,'Numero de Componentes : ',I1,/,3
*x,'Numero de Pratos : ',I3,/,3X,'Pressao no Topo (atm) : ',
*F6.2,/,3X,'Pressao no Fundo (atm) : ',F6.2,/,3X,'Razao de Refluxo
* : ',F7.3,/,3X,'Volume do Condensador (cm3) : ',
*E11.5,/,3X,'Volume do Refervedor (cm3) : ',E11.5,/,3X,
*'Potencia do Refervedor (cal/min) : ',E11.5)
   WRITE(12,30)EFIC,AP,HVF,EE,FLW
30  FORMAT(/,3X,'PRATOS :',/,3X,'Eficiencia : ',F5.3,/,3X,'AP
* (cm2) : ',E9.3,/,3X,'HV (cm) : ',F4.2,/,3X,'E
* ',E11.5,/,3X,'LW (cm) : ',F6.2)
C
   NP1=NPR+1
   NP2=NPR+2
C
C   CONDICAOES INICIAIS
C
   TT=0.0
   DO 60 K=1,NP2
   HF(K)=0.0
   F(K)=0.0
   READ(7,*) (X(I,K),I=1,NC-1)
60  CONTINUE
   READ(7,*) (VL(K),K=2,NP1)
C
C   ANTOINE
C
   WRITE(12,70)
70  FORMAT(/,3X,'PROPRIEDADES FISICAS E TERMODINAMICAS :',/)
   DO 90 I=1,NC
   WRITE(12,80)I,(COMP(I,J),J=1,6)
80  FORMAT(3X,'Componente ',I1,': ',6A4)
90  CONTINUE
   WRITE(12,100)
100 FORMAT(/,3X,'Antoine ( Base 10, Psat em mm Hg e Temp. em C ) :')
   DO 120 I=1,NC
   READ(9,*) (ANT(I,K),K=1,3)
   WRITE(12,110) (I,ANT(I,K),K=1,3)
110 FORMAT(3X,'A(',I1,') : ',F10.5,5X,'B(',I1,') : ',F10.5,5X,'C(
* I1,') : ',F10.5)
120 CONTINUE
C
C   MASSA ESPECIFICA
C
   WRITE(12,170)
170 FORMAT(/,3X,'Massa Especifica ( mol/cm3 e Temp. em K ) :')
   DO 172 I=1,NC

```

```

172 READ(9,*) TC(I), PC(I), VC(I), ZRA(I)
    WRITE(12,174)
174 FORMAT(/,3X,'Temp critica (K)',4X,'Pres critica (bar)',
    *4X,'Vol critico (cm3)',4x,'Z de Rackett')
    WRITE(12,176)(I,TC(I),PC(I),VC(I),ZRA(I),I=1,NC)
176 FORMAT(1X,I1,5X,F6.2,15X,F6.2,14X,F6.4,14X,F6.4)
C
C  ENTALPIA
C
    READ(9,*) TR
    WRITE(12,200)TR
200 FORMAT(/,3X,'Entalpia ( Cp em cal/mol.C e Hvap em cal/mol ) :',/,
    *3X,'Temp. Referencia : ',F8.3,' C')
    TR=TR+273.15
    DO 220 I=1,NC
    READ(9,*) CPL(I),CPV(I),HVAP(I)
    WRITE(12,210)I,CPL(I),I,CPV(I),I,HVAP(I)
210 FORMAT(3X,'Cp liq. (',I1,') : ',F7.3,5X,'Cp vap. (',I1,') : ',
    *F7.3,5X,'Hvap. (',I1,') : ',F7.2)
220 CONTINUE
C
C  ALIMENTACAO
C
    READ(7,*) NF
    WRITE(12,240)NF
240 FORMAT(/,3X,'ALIMENTACAO :',/,3X,'Numero de Alimentacoes : ',
    *I2)
    IF(NF.EQ.0) GO TO 300
    DO 290 IA=1,NF
    READ(7,*) NPF, TF, F(NPF)
    WRITE(12,250)NPF, TF, F(NPF)
250 FORMAT(/,3X,'Prato de Alimentacao : ',I2,/,3X,'Temperatura (C)
    * : ',F6.2,/,3X,'Vazao (mol/min) : ',3X,E11.5)
    READ(7,*) (Z(I,NPF),I=1,NC)
    WRITE(12,260)Z(1,NPF)
260 FORMAT(3X,'Composicao : ',3X,'z(1) : ',F6.4)
    HF(NPF)=Z(1,NPF)*CPL(1)
    DT=TF-TR+273.15
    DO 280 I=2,NC
    WRITE(12,270)I,Z(I,NPF)
270 FORMAT(19X,'z(',I1,') : ',F6.4)
    HF(NPF)=HF(NPF)+Z(I,NPF)*CPL(I)
280 CONTINUE
    HF(NPF)=HF(NPF)*DT
290 CONTINUE
C
C  RETIRADA LATERAL
C
300 READ(7,*) NW
    WRITE(12,310)NW
310 FORMAT(/,3X,'RETIRADA LATERAL :',/,3X,'Numero de Retiradas
    * Laterais : ',I2)
    IF(NW.EQ.0) GO TO 350
    DO 340 I=1,NW
    READ(7,*) NPW, W(NPW)
    WRITE(12,320)NPW, W(NPW)

```

```

320 FORMAT(/,3X,'Prato de Retirada Lateral : ',I2/,3X,'Vazao
* (mol/min) : ',E11.5)
340 CONTINUE
350 CONTINUE
C
WRITE(12,360)PASSO,TFINAL,PRECM,PRECMX
360 FORMAT(/,3X,'SIMULACAO :',/,3X,'Passo (min) : ',
*F6.3/,3X,'Tempo Final (min) : ',F7.1/,3X,'Precisao em M (mol)
* : ',F7.3/,3X,'Precisao em M.x (mol) : ',F7.3)
C
C ... PERFIL DE PRESSAO E ESTIMATIVA DA TEMPERATURA INICIAL
C
DO 370 K=2,NP1
370 P(K)=PTOP + (K-1)*(PFUND-PTOP)/NP1
P(1)=PTOP
P(NP2)=PFUND
DO 400 K=2,NP2
SOMT=0.0
DO 390 I=1,NC
390 SOMT=SOMT+ANT(I,2)/(ANT(I,1)-ALOG10(P(K)*760.0))-ANT(I,3)
400 T(K)=SOMT/NC+273.15
C
C CONDICAO INICIAL
C
CALL EQUIL(TT)
CALL MASESP
AM(1)=VCOND*ROK(1)
AM(NP2)=VREF*ROK(NP2)
DO 410 K=2,NP1
AM(K)=AP*ROK(K)*(HVF+EE*(VL(K)/(ROK(K)*FLW))**(2./3.))
EPS(K)=PRECM
410 FY(K)=AM(K)
FY(1)=AM(1)
FY(NP2)=AM(NP2)
EPS(1)=PRECM
EPS(NP2)=PRECM
L=NP2
DO 420 K=1,NP2
DO 420 I=1,NC-1
L=L+1
EPS(L)=PRECMX
420 FY(L)=AM(K)*X(I,K)
N=L
KEY=1
C
C *****
C
C ESTADO ESTACIONARIO PARA A RECOMPRESSAO DE VAPOR
C
C *****
C
TEMP(1)=425.15
TEMP(2)=440.65
TEMP(3)=430.15
TEMP(4)=423.05
TEMP(5)=414.95

```

```

VREFV=1000000
VTROC=1000000
DO 440 K=1,3
DO 440 I=1,NC
440 XX(I,K)=X(I,1)
CALL MASESPM
AMA(1)=VREFV*ROKR(1)
AMA(2)=VTROC*ROKR(2)
AMA(3)=VCOND*ROKR(3)
DO 450 K=1,3
450 FYF(K)=AMA(K)
L=3
DO 460 K=1,3
DO 460 I=1,NC-1
L=L+1
460 FYF(L)=AMA(K)*XX(I,K)
NN=L
TTT=TT
C
C FIM DO ESTADO ESTACIONARIO PARA A RECOMPRESSAO
C
C *****
C
CALL DERCALC(DER,FY,TT,N,DERD,FYF,NN)
DO 480 IT=0,5
TT=IT
480 CALL IMPRIM(FY,DER,TT,N,FREQ)
F(14)=F(14)*1000/60.0
490 CALL MUDA(TT,PASSO,H,TFINAL,E,NPF)
C F(NPF)=F(NPF)*1000/60.0
CALL RKG(FY,DER,TT,N,FREQ,H,DERD,FYF,NN)
IF(TT.LT.TFINAL) GO TO 490
C CALL TEMPO(2)
END
C
C *****
C
SUBROUTINE EQUIL(TT)
C
C CALCULO DA CONSTANTE DE EQUILIBRIO E DA TEMPERATURA DO ESTAGIO
C
DIMENSION EQ(10,100),GAMA(10)
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)
COMMON/DERV/DKDT(10,100),DMDT(100),DMXDT(10,100)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
C
DO 55 K=1,NP2
C
C CALCULO DE X(NC,K)
C
SX=0.0
DO 10 I=1,NC-1
10 SX=SX+X(I,K)

```

```

X(NC,K)=1.0-SX
C
C  NORMALIZACAO DE X, SE NECESSARIO
C
  ITEST=0
  SX=0.0
  DO 20 I=1,NC
    IF(X(I,K).LT.0.0) ITEST=1
    IF(X(I,K).GT.1.0) ITEST=1
20  SX=SX+ABS(X(I,K))
    IF(ITEST.EQ.0) GO TO 50
    WRITE(*,30) TT
30  FORMAT(/,1X,'VALOR DE X FORA DO INTERVALO (0,1) EM t = ',F9.3,
  *'seg.')
```

```

  DO 40 I=1,NC
40  X(I,K)=ABS(X(I,K))/SX
50  CONTINUE
55  CONTINUE
  DO 140 K=2,NP2
    ICONT=0
60  TSAT=T(K)
    CALL COEFAT(K,TSAT,GAMA)
    SOMY=0.0
    SOMP=0.0
    DO 70 I=1,NC
      P1=X(I,K)*GAMA(I)*PSAT(I,TSAT)
      SOMP=SOMP+P1
70  SOMY=SOMY+P1/P(K)
    ICONT=ICONT+1
    SOMY=ABS(1.0-SOMY)
    IF(SOMY.LE.0.00001) GO TO 100
    IF(ICONT.GT.60) GO TO 90
    SOMP=SOMP-P(K)
    TSAT=1.001*TSAT
    CALL COEFAT(K,TSAT,GAMA)
    SOMP1=0.0
    DO 80 I=1,NC
80  SOMP1=SOMP1+X(I,K)*GAMA(I)*PSAT(I,TSAT)
    SOMP1=SOMP1-P(K)
    T(K)=T(K)-0.001*T(K)*SOMP/(SOMP1-SOMP)
    GO TO 60
90  WRITE(*,*) 'EQUIL NAO CONVERGIU EM 60 ITERACOES'
100 CONTINUE
  DO 120 J=1,2
    CALL COEFAT(K,TSAT,GAMA)
    DO 110 I=1,NC
      EQ(I,J)=GAMA(I)*PSAT(I,TSAT)/P(K)
110 CONTINUE
120 TSAT=1.001*TSAT
    TSAT=TSAT/1.001
C
C  CONSTANTE DE EQUILIBRIO E DK/DT
C
  DO 130 I=1,NC
    EQK(I,K)=EQ(I,1)
130 DKDT(I,K)=(EQ(I,2)-EQ(I,1))/(TSAT-T(K))
```

```

140 CONTINUE
   T(1)=T(2) - (T(3)-T(2))
   RETURN
   END
C
C *****
C
FUNCTION PSAT(I,TSAT)
C
COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)
PSAT=10.0**((ANT(I,1)-ANT(I,2)/(TSAT-273.15+ANT(I,3)))/760.0)
RETURN
END
C
C *****
C
SUBROUTINE DERIV
C
C  CALCULO DE DM/DT E D(MX)/DT.
C
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/DERV/DKDT(10,100),DMDT(100),DMXDT(10,100)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
COMMON/RETAL/Z(10,100),F(100),HF(100),W(100)
C
S1=0.0
S2=0.0
DO 10 I=1,NC-1
DXDT=(VL(NP1)*(X(I,NP1)-X(I,NP2))-VV(NP1)*(Y(I,NP1)-X(I,NP2)))/
*AM(NP2)
S1=S1+DXDT
10 S2=S2+DXDT/RO(I,NP2)
DRODT=(S1/RO(NC,NP2)-S2)*(ROK(NP2)**2.0)
C  D=VL(1)/RR
R=VL(NP1)-VV(NP1)-VREF*DRODT
C  DMDT(1)=VV(1)-VL(1)-D
DMDT(NP2)=VL(NP1)-VV(NP1)-R
DO 20 I=1,NC-1
C  DMXDT(I,1)=VV(1)*Y(I,1)-VL(1)*X(I,1)-D*X(I,1)
20 DMXDT(I,NP2)=VL(NP1)*X(I,NP1)-VV(NP1)*Y(I,NP1)-R*X(I,NP2)
DO 40 J=2,NP1
DO 30 I=1,NC-1
30 DMXDT(I,J)=VL(J-1)*X(I,J-1)+VV(J)*Y(I,J)+F(J)*Z(I,J)-VV(J-1)*Y(I,
*J-1)-VL(J)*X(I,J)-W(J)*X(I,J)
40 DMDT(J)=VL(J-1)+VV(J)+F(J)-VL(J)-VV(J-1)-W(J)
RETURN
END
C
C *****
C
SUBROUTINE ENTALP
C
C  CALCULO DAS ENTALPIAS DO LIQUIDO E DO VAPOR
C

```

```

COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
C
DO 20 K=1,NP2
HL(K)=0.0
HV(K)=0.0
DTL=T(K)-TR
DTV=T(K+1)-TR
DO 10 I=1,NC
HL(K)=HL(K)+CPL(I)*X(I,K)
10 HV(K)=HV(K)+(CPV(I)*DTV+HVAP(I))*Y(I,K)
20 HL(K)=HL(K)*DTL
RETURN
END
C
C *****
C
C SUBROUTINE MASESP
C
C CALCULO DE RO PARA O COMPONENTE E PARA O ESTAGIO
C METODO DE RACKETT
C
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS3/TC(10),PC(10),VC(10),ZRA(10),DOK(100)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
DIMENSION PHI(10)
C
DO 6 K=1,NP2
R=83.144
TRO=T(K)
VCM=0.0
ZRAM=0.0
TCM=0.0
DO 2 I=1,NC
TRM=TRO/TC(I)
RO(I,K)=PC(I)/(R*TC(I)*(ZRA(I)**(1+(1-TRM)**0.285714))))
VCM=VCM+X(I,K)*VC(I)
2 ZRAM=ZRAM+X(I,K)*ZRA(I)
DO 3 I=1,NC
3 PHI(I)=X(I,K)*VC(I)/VCM
DO 4 I=1,NC
DO 4 J=1,NC
4 TCM=TCM+PHI(I)*PHI(J)*((TC(I)*TC(J))**0.5)
SOMA=0.0
DO 5 I=1,NC
5 SOMA=SOMA+(X(I,K)*TC(I))/PC(I)
TRM=TRO/TCM
VLM=R*SOMA*(ZRAM**0.285714)
6 ROK(K)=1/VLM
RETURN
END

```

```

C
C *****
C
C SUBROUTINE COEFAT(K,TSAT,GAMA)
C
C CALCULO DO COEFICIENTE DE ATIVIDADE UTILIZANDO A EQUACAO DE WILSON
C
C DIMENSION G(10,10),GAMA(10)
C COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
C COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)
C COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
C
C DO 10 I=1,NC
10 GAMA(I)=1.0
RETURN
END
C
C *****
C
C SUBROUTINE COMPVAP
C
C CALCULO DA COMPOSICAO DO VAPOR
C
C COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
C COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
C COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
C
C DO 10 I=1,NC
Y(I,NP1)=X(I,NP2)*EQK(I,NP2)
DO 10 K=1,NPR
J=NP1-K
Y(I,J)=X(I,J+1)*EQK(I,J+1)
10 Y(I,J)=(Y(I,J)-Y(I,J+1))*EFIC+Y(I,J+1)
C
C NORMALIZACAO DE Y
C
C DO 40 K=1,NP1
SY=0.0
DO 30 I=1,NC
30 SY=SY+ABS(Y(I,K))
DO 40 I=1,NC
40 Y(I,K)=ABS(Y(I,K))/SY
RETURN
END
C
C *****
C
C SUBROUTINE VVAPOR
C
C CALCULO DAS VAZOES DE VAPOR
C
C DIMENSION ALFA(10,100)
C COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
C COMMON/RETAL/Z(10,100),F(100),HF(100),W(100)
C COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
C COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)

```

```

COMMON/DERV/DKDT(10,100),DMDT(100),DMXDT(10,100)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
C
C  ALFA
C
DO 30 L=2,NP2
S=0.0
DHDT=0.0
DO 10 I=1,NC
S=S+X(I,L)*DKDT(I,L)
10  DHDT=DHDT+X(I,L)*CPL(I)
S1=DHDT/S
DO 20 I=1,NC
20  ALFA(I,L)=-S1*EQK(I,L)+(T(L)-TR)*(CPL(I)-CPL(NC))
30  CONTINUE
C
C  REFERVEDOR
C
S2=0.0
S3=0.0
DO 40 I=1,NC
S2=S2+ALFA(I,NP2)*(X(I,NP1)-X(I,NP2))
40  S3=S3+ALFA(I,NP2)*(Y(I,NP1)-X(I,NP2))
VV(NP1)=((HL(NP2)-HL(NP1)+S2)*VL(NP1)-QREF)/(HL(NP2)-HV(NP1)+S3)
C
C  VAZOES DE VAPOR
C
S1=0.0
DO 50 I=1,NC
50  S1=S1+(Y(I,1)-X(I,1))/RO(I,1)
S1=(S1*ROK(1)+1.0)/(1.0+1.0/RR)
NPR1=NPR-1
DO 70 K=1,NPR1
S2=0.0
S3=0.0
J=NP2-K
DO 60 I=1,NC
S2=S2+ALFA(I,J)*(VL(J-1)*X(I,J-1)+VV(J)*Y(I,J)+F(J)*Z(I,J)-
*X(I,J)*(VL(J-1)+VV(J)+F(J)))
60  S3=S3+ALFA(I,J)*(X(I,J)-Y(I,J-1))
70  VV(J-1)=(S2-VL(J-1)*HL(J-1)-VV(J)*HV(J)-F(J)*HF(J)+HL(J)*
*(VL(J-1)+VV(J)+F(J)))/(HL(J)-HV(J-1)-S3)
S2=0.0
S3=0.0
S4=0.0
DO 80 I=1,NC
S2=S2+ALFA(I,2)*(VV(2)*Y(I,2)+F(2)*Z(I,2)-X(I,2)*(VV(2)+F(2)))
S3=S3+ALFA(I,2)*(X(I,2)-Y(I,1))
80  S4=S4+ALFA(I,2)*(X(I,1)-X(I,2))
VV(1)=(S2-VV(2)*HV(2)-F(2)*HF(2)+HL(2)*(VV(2)-F(2)))/(HL(2)-HV(1)
*-S3-S1*(S4-HL(1)+HL(2)))
C  VL(1)=S1*VV(1)
RETURN
END
C

```

```

C *****
C
C SUBROUTINE DERCALC(DER,FY,TT,N,DERD,FYF,NN)
C
C CALCULO DAS DERIVADAS PARCIAIS
C
C DIMENSION DER(1000),FY(1000),DERD(100),FYF(100)
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS2/TR,HVAP(10),WIL(10,10),VM(10),ANT(10,3)
COMMON/DERV/DKDT(10,100),DMDT(100),DMXDT(10,100)
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
COMMON/TESTE/VRO
C
C J=0
DO 10 K=1,NP2
J=J+1
10 AM(K)=FY(J)
VRO=VCOND*ROK(1)
DO 20 K=1,NP2
DO 20 I=1,NC-1
J=J+1
20 X(I,K)=FY(J)/AM(K)
CALL EQUIL(TT)
CALL COMPVAP
CALL MASESP
IF(TT.EQ.0.0)GO TO 30
CALL VLIQ
30 CONTINUE
CALL ENTALP
CALL VVAPOR
IF(TT.GT.0.0)GO TO 35
CALL CALCULO(DERD,FYF,NN,TT)
35 CONTINUE
IF(TT.LE.5.0)GO TO 38
CALL RKGR(FYF,DERD,NN,TT)
38 CONTINUE
CALL DERIV
J=0
DO 40 K=1,NP2
J=J+1
40 DER(J)=DMDT(K)
DO 50 K=1,NP2
DO 50 I=1,NC-1
J=J+1
50 DER(J)=DMXDT(I,K)
RETURN
END
C
C *****
C
C SUBROUTINE VLIQ
C
C CALCULO DAS VAZOES DE LIQUIDO ATRAVES DA EQUACAO DE FRANCIS
C

```

```

COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
C
DO 10 K=2,NP1
10 VL(K)=ROK(K)*FLW*((AM(K)/(AP*ROK(K))-HVF)/EE)**1.5
RETURN
END
C
C *****
C .....
C SUBROUTINE IMPRIM(FY,DER,TT,N,FREQ)
C
C IMPRESSAO DOS RESULTADOS
C
C DIMENSION FY(1000),DER(1000),TE(100)
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS3/TC(10),PC(10),VC(10),ZRA(10),DOK(100)
COMMON/PRI/IMP,TS0
COMMON/RETAL/Z(10,100),F(100),HF(100),W(100)
COMMON/TESTE/VRO
common/cont/icont
C
DO 1 I=1,NP2
1 TE(I)=T(I)-273.15
if(tt.lt.10.)icont=icont+9
icont=icont+1
if(icont.eq.50)then
    icont=0
    go to 4
else
    go to 5
endif
4 WRITE(10,2)TT,D,R,(X(I,1),I=1,NC),(X(I,NP2),I=1,NC),(X(I,37),I=
*1,NC),(X(I,38),I=1,NC)
2 FORMAT(1X,F9.3,2(1X,E11.5),12(1X,F6.4))
WRITE(11,3)TT,(TE(K),K=1,NP2)
3 FORMAT(1X,F9.3,15(1X,F6.2))
5 continue
IF((TT-TS0).LT.FREQ.AND.TT.NE.0.0)RETURN
TS0=TT
WRITE(12,8)TT,D,R
WRITE(*,8)TT,D,R
8 FORMAT(/,1X,'Tempo : ',F7.1,' min',12x,'Destilado : ',E11.5,
*' mol/min ',/,25x,'Produto de Fundo : ',E11.5,' mol/min '/')
WRITE(12,9)(I,I=1,NC)
WRITE(*,9)(I,I=1,NC)
9 FORMAT(5X,'Temp(C) VL(mol/min) VV(mol/min) ',10('x(',I2,' ')
DO 20 K=1,NP2
WRITE(12,11)K,TE(K),VL(K),VV(K),AM(K),(X(I,K),I=1,NC)
WRITE(*,10)K,TE(K),VL(K),VV(K),(X(I,K),I=1,NC)
WRITE(*,12)K,AM(K)
12 FORMAT(1X,'M(',I2,') = ',F10.2)

```

```

10  FORMAT(1X,I2,3X,F5.1,2(1X,E11.5),10(1X,F6.4))
11  FORMAT(1X,I2,3X,F5.1,2(1X,E11.5),2X,F12.4,10(1X,F6.4))
20  CONTINUE
    WRITE(13,13)1,(X(I,1),I=1,NC)
    WRITE(13,14)NP2,(X(I,NP2),I=1,NC)
13  FORMAT(/,1X,I2,3X,10(1X,F6.4))
14  FORMAT(1X,I2,3X,10(1X,F6.4))
    RETURN
    END
C
C *****
C =====
C
C     SUBROUTINE MUDA(TT,H0,H,TFIM,E,NPF)
C
C     SUBROTINA PARA FAZER MODIFICACOES NA COLUNA EM QUALQUER TEMPO
C     E' CONSTRUIDA DE ACORDO COM AS NECESSIDADES DA SIMULACAO.
C
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/RETAL/Z(10,100),F(100),HF(100),W(100)
COMMON/MUD/ICAS1
    IF(TT.NE.0.0.AND.ICAS1.EQ.1) GO TO 10
    ICAS1=1
    H=H0
    E=TFIM
C10 IF(TT.GT.5.0)RR=5.0
10  IF(TT.GT.5.0)RR=7.0
C10 IF(TT.GT.5.0)QREF=1.6918216E+07
C10 IF(TT.GT.5.0)QREF=1.12788E+07
C10 IF(TT.GT.5.0)F(NPF)=102.0
C10 IF(TT.GT.5.0)F(NPF)=68.0
    RETURN
    END
C
C =====
C
C     SUBROUTINE TEMPO(I)
C
C     SE I=1 - RELOGIO E ATIVADO
C     SE I=2 - MOSTRA TEMPO DE CPU
C
C     EXTERNAL LIB$INIT_TIMER,LIB$SHOW_TIMER,ITEMPO
C     COMMON/PRI/IMP,TS0
C
C     GOTO(10,20) I
C10  CALL LIB$INIT_TIMER
C     RETURN
C
C20  WRITE(IMP,30)
C30  FORMAT(/)
C     CALL LIB$SHOW_TIMER(2,ITEMPO,2)
C     RETURN
C     END
C
C     FUNCTION ITEMPO (STATS)
C

```

```

C  COMMON/PRI/IMP.TS0
C  CHARACTER*(*) STATS
C
C  WRITE(IMP,*) STATS
C  RETURN
C  END
C
C  SUBROUTINE RKG(X,F,Z0,N,TIMP,PASSO,DERD,FYF,NN)
C
C  SUBROTINA DE INTEGRACAO RUNGE-KUTTA-GILL DE 4ª ORDEM
C
C  DIMENSION C(4,1000),X(1000),Y(1000),F(1000)
C  DIMENSION DERD(100),FYF(100)
C
C      CO = SQRT(2.0)
C      DO 10 I = 1 , N
10  Y(I) = X(I)
C      Z1=Z0
C      CALL DERCALC(F,X,Z0,N,DERD,FYF,NN)
C      DO 20 I = 1 , N
C      C(1,I) = PASSO*F(I)
20  X(I) = X(I) + C(1,I)/2
C      Z0 = Z0 + PASSO/2
C      CALL DERCALC(F,X,Z0,N,DERD,FYF,NN)
C      DO 30 I = 1 , N
C      C(2,I) = PASSO*F(I)
C      X(I) = Y(I) + (CO - 1.0)*C(1,I)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I)/2.0
30  CONTINUE
C      CALL DERCALC(F,X,Z0,N,DERD,FYF,NN)
C      DO 40 I = 1 , N
C      C(3,I) = PASSO*F(I)
C      X(I) = Y(I) - CO*C(2,I)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I)
40  CONTINUE
C      Z0 = Z1 + PASSO
C      CALL DERCALC(F,X,Z0,N,DERD,FYF,NN)
C      DO 50 I = 1 , N
C      C(4,I) = PASSO*F(I)
C      X(I) = Y(I) + (C(1,I) + C(4,I))/6.0 + (2.0 - CO)
1 *C(2,I)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I)/3.0
50  CONTINUE
C      CALL IMPRIM(X,F,Z0,N,TIMP)
C      RETURN
C      END
C
C
C
C *****
C
C  SUBROUTINE CALCULO(DERD,FYF,NN,TT)
C
C  CALCULO DA VL(1) E X(I,1) COM RECOMPRESSAO
C
C  DIMENSION DERD(100),FYF(100),DMDTD(5),DMXDTD(10,5)

```

```

COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/EQL/X(10,100),Y(10,100),T(100),EQK(10,100)
COMMON/GERAL/AM(100),D,R,HL(100),HV(100),VL(100),VV(100),NP1,NP2
COMMON/DERV/DKDT(10,100),DMDT(100),DMXDT(10,100)
C
C  DADOS ESPECIFICOS PARA O SISTEMA DE RECOMPRESSAO
C
COMMON/RECOMP1/XX(10,5),TEMP(5),ROR(10,5),ROKR(5)
COMMON/RECOMP2/AMA(5),VREFV,VTROC
C
  J=0
  DO 10 K=1,3
  J=J+1
10  AMA(K)=FYF(J)
  DO 20 K=1,3
  DO 20 I=1,NC-1
  J=J+1
20  XX(I,K)=FYF(J)/AMA(K)
  DO 25 I=1,NC-1
25  X(I,1)=XX(I,3)
  CALL MASESPM
C
C  CALCULO DAS VASOES
C
C  REFERVERDOR - LADO DO VAPOR
C
  S1=0.0
  S2=0.0
  DO 30 I=1,NC-1
  DXDT1=(VV(1)*(Y(I,1)-XX(I,1)))/AMA(1)
  S1=S1 + DXDT1
30  S2=S2 + DXDT1/ROR(I,1)
  DRODT1=(S1/ROR(NC,1) - S2)*(ROKR(1)**2)
  VL1=VV(1) - VREFV*DRODT1
C
C  TROCADOR PRE-AQUECEDOR - LADO LIQUIDO
C
  S1=0.0
  S2=0.0
  DO 40 I=1,NC-1
  DXDT2=(VL1*(XX(I,1)-XX(I,2)))/AMA(2)
  S1=S1 + DXDT2
40  S2=S2 + DXDT2/ROR(I,2)
  DRODT2=(S1/ROR(NC,2) - S2)*(ROKR(2)**2)
  VL2=VL1 - VTROC*DRODT2
C
C  CONDENSADOR E VASO DE TOPO
C
  S1=0.0
  S2=0.0
  DO 50 I=1,NC-1
  DXDT3=(VL2*(XX(I,2)-X(I,1)))/AMA(3)
  S1=S1 + DXDT3
50  S2=S2 + DXDT3/ROR(I,3)
  DRODT3=(S1/ROR(NC,3) - S2)*(ROKR(3)**2)
  VL(1)=(VL2 - VCOND*DRODT3)/(1 + 1/RR)

```

```

D=VL(1)/RR
C
C  CALCULO DA DERIVADAS
C
DMDTD(1)=VV(1) - VL1
DMDTD(2)=VL1 - VL2
DMDTD(3)=VL2 - VL(1) - D
DMDT(1)=DMDTD(3)
DO 60 I=1,NC-1
DMXDTD(I,1)=VV(1)*Y(I,1) - VL1*XX(I,1)
DMXDTD(I,2)=VL1*XX(I,1) - VL2*XX(I,2)
DMXDTD(I,3)=VL2*XX(I,2) - VL(1)*X(I,1) - D*X(I,1)
60  DMXDT(I,1)=DMXDTD(I,3)
J=0.0
DO 70 K=1,3
J=J + 1
70  DERD(J)=DMDTD(K)
DO 80 K=1,3
DO 80 I=1,NC-1
J=J + 1
80  DERD(J)=DMXDTD(I,K)
C  WRITE(13,2)TT,VL1,VL(1),D,R,RR
C2  FORMAT(1X,F9.3,5(2X,E11.5))
C  WRITE(13,4)(X(I,1),I=1,NC),(X(I,NP2),I=1,NC),(XX(I,3),I=1,NC)
C4  FORMAT(1X,20(2X,F6.4))
C  WRITE(13,6)DMDTD(1),DMDTD(2),DMDTD(3)
C6  FORMAT(1X,3(2X,F8.4))
C  WRITE(13,90)VL(1),VL1,VL2,VV(1)
C  WRITE(13,4)FYF(1),FYF(2),FYF(3),AMA(1),AMA(2),AMA(3)
C4  FORMAT(1X,6(2X,F12.4))
C2  FORMAT(1X,4(2X,F12.4))
RETURN
END
C
C
C
C  *****
C
SUBROUTINE MASESPM
C
C  CALCULO DE ROR PARA O COMPONENTE E ROKR PARA O SISTEMA DE RECOMPRESSAO
C  METODO DE RACKETT
C
COMMON/COLUN/P(100),VCOND,VREF,QREF,NPR,RR,FLW,AP,EE,HVF,NC,EFIC
COMMON/PFIS1/CRO(10,2),RO(10,100),ROK(100),CPL(10),CPV(10)
COMMON/PFIS3/TC(10),PC(10),VC(10),ZRA(10),DOK(100)
COMMON/RECOMP1/XX(10,5),TEMP(5),ROR(10,5),ROKR(5)
DIMENSION PHI(10)
C
DO 10 K=1,3
R=83.144
TRO=TEMP(K+2)
VCM=0.0
ZRAM=0.0
TCM=0.0
DO 20 I=1,NC

```

```

TRM=TRO/TC(I)
ROR(I,K)=PC(I)/(R*TC(I)*(ZRA(I)**(1 + (1 - TRM)**0.285714)))
VCM=VCM + XX(I,K)*VC(I)
20  ZRAM=ZRAM + XX(I,K)*ZRA(I)
DO 30 I=1,NC
30  PHI(I)=XX(I,K)*VC(I)/VCM
DO 40 I=1,NC
DO 40 J=1,NC
40  TCM=TCM + PHI(I)*PHI(J)*((TC(I)*TC(J))**0.5
SOMA=0.0
DO 50 I=1,NC
50  SOMA=SOMA + (XX(I,K)*TC(I))/PC(I)
TRM=TRO/TCM
VLM=R*SOMA*(ZRAM**(1 + (1 - TRM)**0.285714))
10  ROKR(K)=1/VLM
RETURN
END
C
C
C  *****
C
SUBROUTINE RKGR(X,F,NN,TT)
C
C  SUBROTINA DE INTEGRACAO RUNGE-KUTTA-GILL DE 4ª ORDEM
C  SISTEMA DE RECOMPRESSAO
C
DIMENSION C(4,100),X(100),Y(100),F(100)
C
CO = SQRT(2.0)
DO 10 I = 1 , NN
10  Y(I) = X(I)
C  Z1=Z0
PASSO=0.00125
CALL CALCULO(F,X,NN,TT)
DO 20 I = 1 , NN
C(1,I) = PASSO*F(I)
20  X(I) = X(I) + C(1,I)/2
C  Z0 = Z0 + PASSO/2
CALL CALCULO(F,X,NN,TT)
DO 30 I = 1 , NN
C(2,I) = PASSO*F(I)
X(I) = Y(I) + (CO - 1.0)*C(1,I)/2.0 + (2.0
1 - CO)*C(2,I)/2.0
30  CONTINUE
CALL CALCULO(F,X,NN,TT)
DO 40 I = 1 , NN
C(3,I) = PASSO*F(I)
X(I) = Y(I) - CO*C(2,I)/2.0 + (CO/2.0
1 + 1.0)*C(3,I)
40  CONTINUE
C  Z0 = Z1 + PASSO
CALL CALCULO(F,X,NN,TT)
DO 50 I = 1 , N
C(4,I) = PASSO*F(I)
X(I) = Y(I) + (C(1,I) + C(4,I))/6.0 + (2.0 - CO)
1 *C(2,I)/6.0 + (CO/2.0 + 1.0)*C(3,I)/3.0

```

```
50 CONTINUE
C  CALL IMPRIM(X,F,Z0.N,TIMP)
   RETURN
   END
C
```

ANEXO D

**Arquivo de Saída do Programa
Classic**

Arquivo de Saída do Programa Classic

COLUNA :

Numero de Componentes : 5
 Numero de Pratos : 20
 Pressao no Topo (atm) : 1.10
 Pressao no Fundo (atm) : 1.25
 Razao de Refluxo : 6.000
 Volume do Condensador (cm3) : .20000E+07
 Volume do Refervedor (cm3) : .10000E+07
 Potencia do Refervedor (cal/min) : .14098E+08

PRATOS :

Eficiencia : .750
 AP (cm2) : .123E+05
 HV (cm) : 7.62
 E : .93450E-02
 LW (cm) : 87.78

PROPRIEDADES FISICAS E TERMODINAMICAS :

Componente 1 : Ebenze
 Componente 2 : Pxilen
 Componente 3 : Mxilen
 Componente 4 : Oxilen
 Componente 5 : 124tmb

Antoine (Base 10. Psat em mm Hg e Temp. em C) :

A(1) : 6.96580 B(1) : 1429.55005 C(1) : 213.76700
 A(2) : 6.99053 B(2) : 1453.43005 C(2) : 215.31000
 A(3) : 7.00909 B(3) : 1462.26599 C(3) : 215.11000
 A(4) : 7.00154 B(4) : 1476.39294 C(4) : 213.87199
 A(5) : 7.04380 B(5) : 1573.27002 C(5) : 208.56000

Massa Especifica (mol/cm3 e Temp. em K) :

Temp critica (K)	Pres critica (bar)	Vol critico (cm3)	Z de Rackett
1 617.20	36.06	.3740	.2618
2 616.23	35.11	.3790	.2591
3 617.05	35.36	.3760	.2595
4 630.33	37.34	.3690	.2619
5 649.13	32.32	.4300	.2573

Entalpia (Cp em cal/mol.C e Hvap em cal/mol) :

Temp. Referencia : 148.000 C

Cp liq. (1) : 59.505 Cp vap. (1) : 42.788 Hvap. (1) : 8325.10
 Cp liq. (2) : 57.791 Cp vap. (2) : 41.925 Hvap. (2) : 8429.22
 Cp liq. (3) : 58.237 Cp vap. (3) : 41.994 Hvap. (3) : 8504.51
 Cp liq. (4) : 58.766 Cp vap. (4) : 42.986 Hvap. (4) : 8719.22
 Cp liq. (5) : 64.248 Cp vap. (5) : 49.703 Hvap. (5) : 9655.79

ALIMENTACAO :

Numero de Alimentacoes : 1

Prato de Alimentacao : 14

Temperatura (C) : 148.00

Vazao (mol/min) : .85000E+02

Composicao : z(1): .2126

z(2): .1387

z(3): .3051

z(4): .1356

z(5): .2078

RETIRADA LATERAL :

Numero de Retiradas Laterais : 0

SIMULACAO :

Passo (min) : .005

Tempo Final (min) : 126.0

Precisao em M (mol) : .001

Precisao em M.x (mol) : .001

Tempo : .0 min Destilado : .23362E+03 mol/min
Produto de Fundo : .11859E+04 mol/min

	Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.8	.14017E+04	.16353E+04	14201.8887	.3797	.1859	.3684	.0657	.0003
2	142.1	.13812E+04	.16350E+04	802.2239	.3638	.1864	.3750	.0743	.0005
3	142.4	.13808E+04	.16348E+04	801.9763	.3496	.1865	.3803	.0828	.0008
4	142.8	.13805E+04	.16345E+04	801.7250	.3370	.1863	.3843	.0911	.0013
5	143.1	.13802E+04	.16341E+04	801.4489	.3257	.1857	.3872	.0993	.0022
6	143.4	.13798E+04	.16337E+04	801.1267	.3155	.1848	.3890	.1072	.0035
7	143.8	.13792E+04	.16331E+04	800.7186	.3062	.1837	.3898	.1148	.0056
8	144.2	.13783E+04	.16321E+04	800.1761	.2975	.1821	.3894	.1221	.0089
9	144.6	.13770E+04	.16308E+04	799.4222	.2893	.1801	.3877	.1288	.0141
10	145.0	.13750E+04	.16287E+04	798.3388	.2810	.1776	.3843	.1348	.0223
11	145.6	.13718E+04	.16255E+04	796.7433	.2724	.1742	.3788	.1398	.0348
12	146.3	.13672E+04	.16208E+04	794.4117	.2628	.1696	.3704	.1433	.0540
13	147.2	.13562E+04	.16097E+04	790.7363	.2514	.1634	.3581	.1446	.0825
14	149.0	.27967E+04	.16111E+04	868.5571	.2313	.1509	.3314	.1403	.1460
15	149.2	.28000E+04	.16136E+04	868.4821	.2305	.1509	.3316	.1408	.1462
16	149.5	.28017E+04	.16160E+04	868.3002	.2293	.1507	.3317	.1416	.1466
17	149.7	.28050E+04	.16182E+04	868.1533	.2276	.1505	.3317	.1426	.1476
18	150.0	.28067E+04	.16201E+04	867.8228	.2251	.1499	.3313	.1441	.1496
19	150.4	.28067E+04	.16212E+04	867.1943	.2213	.1489	.3300	.1460	.1538
20	150.9	.28067E+04	.16208E+04	866.1309	.2154	.1469	.3269	.1483	.1625
21	151.6	.27967E+04	.16107E+04	863.6655	.2061	.1431	.3201	.1506	.1801
22	153.6	.00000E+00	.00000E+00	6823.9937	.1803	.1295	.2929	.1492	.2481

Tempo : 5.0 min Destilado : .23362E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .11859E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.8	.14017E+04	.16353E+04	14201.8887	.3797	.1859	.3684	.0657 .0003
2	142.1	.13812E+04	.16350E+04	802.2239	.3638	.1864	.3750	.0743 .0005
3	142.4	.13808E+04	.16348E+04	801.9763	.3496	.1865	.3803	.0828 .0008
4	142.8	.13805E+04	.16345E+04	801.7250	.3370	.1863	.3843	.0911 .0013
5	143.1	.13802E+04	.16341E+04	801.4489	.3257	.1857	.3872	.0993 .0022
6	143.4	.13798E+04	.16337E+04	801.1267	.3155	.1848	.3890	.1072 .0035
7	143.8	.13792E+04	.16331E+04	800.7186	.3062	.1837	.3898	.1148 .0056
8	144.2	.13783E+04	.16321E+04	800.1761	.2975	.1821	.3894	.1221 .0089
9	144.6	.13770E+04	.16308E+04	799.4222	.2893	.1801	.3877	.1288 .0141
10	145.0	.13750E+04	.16287E+04	798.3388	.2810	.1776	.3843	.1348 .0223
11	145.6	.13718E+04	.16255E+04	796.7433	.2724	.1742	.3788	.1398 .0348
12	146.3	.13672E+04	.16208E+04	794.4117	.2628	.1696	.3704	.1433 .0540
13	147.2	.13562E+04	.16097E+04	790.7363	.2514	.1634	.3581	.1446 .0825
14	149.0	.27967E+04	.16111E+04	868.5571	.2313	.1509	.3314	.1403 .1460
15	149.2	.28000E+04	.16136E+04	868.4821	.2305	.1509	.3316	.1408 .1462
16	149.5	.28017E+04	.16160E+04	868.3002	.2293	.1507	.3317	.1416 .1466
17	149.7	.28050E+04	.16182E+04	868.1533	.2276	.1505	.3317	.1426 .1476
18	150.0	.28067E+04	.16201E+04	867.8228	.2251	.1499	.3313	.1441 .1496
19	150.4	.28067E+04	.16212E+04	867.1943	.2213	.1489	.3300	.1460 .1538
20	150.9	.28067E+04	.16208E+04	866.1309	.2154	.1469	.3269	.1483 .1625
21	151.6	.27967E+04	.16107E+04	863.6655	.2061	.1431	.3201	.1506 .1801
22	153.6	.00000E+00	.00000E+00	6823.9937	.1803	.1295	.2929	.1492 .2481

Tempo : 10.0 min Destilado : .20138E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12147E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14096E+04	.16110E+04	14201.8887	.3797	.1859	.3684	.0657 .0003
2	142.1	.14095E+04	.16108E+04	804.1013	.3645	.1864	.3748	.0738 .0005
3	142.4	.14093E+04	.16106E+04	803.8676	.3508	.1866	.3799	.0819 .0008
4	142.7	.14091E+04	.16104E+04	803.6228	.3384	.1863	.3840	.0900 .0013
5	143.1	.14088E+04	.16102E+04	803.3528	.3272	.1858	.3869	.0980 .0021
6	143.4	.14085E+04	.16098E+04	803.0360	.3170	.1850	.3888	.1059 .0034
7	143.8	.14080E+04	.16093E+04	802.6398	.3076	.1838	.3897	.1135 .0054
8	144.1	.14071E+04	.16085E+04	802.1131	.2989	.1823	.3894	.1208 .0086
9	144.5	.14059E+04	.16073E+04	801.3792	.2906	.1804	.3878	.1276 .0137
10	145.0	.14039E+04	.16053E+04	800.3209	.2822	.1778	.3846	.1337 .0216
11	145.6	.14009E+04	.16023E+04	798.7659	.2735	.1745	.3793	.1389 .0339
12	146.3	.13964E+04	.15978E+04	796.4700	.2638	.1700	.3710	.1426 .0526
13	147.2	.13854E+04	.15869E+04	792.8303	.2523	.1638	.3588	.1442 .0809
14	148.9	.28262E+04	.16110E+04	870.2261	.2319	.1512	.3320	.1402 .1447
15	149.2	.28287E+04	.16135E+04	870.1053	.2311	.1511	.3322	.1407 .1449
16	149.4	.28312E+04	.16160E+04	869.9559	.2299	.1510	.3322	.1415 .1454
17	149.7	.28334E+04	.16183E+04	869.7480	.2282	.1507	.3322	.1425 .1465
18	150.0	.28353E+04	.16201E+04	869.4201	.2256	.1502	.3317	.1440 .1485
19	150.4	.28364E+04	.16213E+04	868.8457	.2219	.1491	.3304	.1459 .1528
20	150.8	.28360E+04	.16209E+04	867.7676	.2160	.1472	.3272	.1482 .1614
21	151.5	.28260E+04	.16110E+04	865.3157	.2068	.1433	.3205	.1506 .1789
22	153.5	.00000E+00	.00000E+00	6825.2056	.1809	.1298	.2933	.1495 .2465

Tempo : 15.0 min Destilado : .20138E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12150E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14097E+04	.16110E+04	14201.8887	.3798	.1859	.3684	.0656 .0003
2	142.1	.14095E+04	.16109E+04	804.1026	.3649	.1864	.3747	.0735 .0005
3	142.4	.14093E+04	.16107E+04	803.8687	.3513	.1866	.3798	.0815 .0008
4	142.7	.14092E+04	.16105E+04	803.6245	.3391	.1864	.3838	.0894 .0012
5	143.1	.14089E+04	.16103E+04	803.3560	.3280	.1859	.3868	.0973 .0020
6	143.4	.14086E+04	.16099E+04	803.0422	.3179	.1851	.3887	.1050 .0033
7	143.8	.14081E+04	.16094E+04	802.6504	.3086	.1839	.3896	.1126 .0053
8	144.1	.14073E+04	.16086E+04	802.1299	.2998	.1825	.3894	.1198 .0084
9	144.5	.14060E+04	.16074E+04	801.4037	.2915	.1805	.3879	.1267 .0134
10	145.0	.14041E+04	.16055E+04	800.3544	.2831	.1780	.3848	.1329 .0212
11	145.6	.14011E+04	.16025E+04	798.8089	.2743	.1747	.3795	.1381 .0334
12	146.3	.13965E+04	.15979E+04	796.5203	.2644	.1702	.3712	.1420 .0522
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8804	.2528	.1640	.3590	.1437 .0804
14	148.9	.28263E+04	.16111E+04	870.2588	.2322	.1513	.3321	.1399 .1444
15	149.2	.28289E+04	.16136E+04	870.1437	.2314	.1512	.3323	.1405 .1446
16	149.4	.28314E+04	.16161E+04	870.0012	.2302	.1511	.3324	.1412 .1451
17	149.7	.28336E+04	.16184E+04	869.8021	.2285	.1509	.3323	.1423 .1460
18	150.0	.28355E+04	.16203E+04	869.4859	.2261	.1503	.3319	.1437 .1480
19	150.3	.28367E+04	.16214E+04	868.9268	.2223	.1493	.3306	.1456 .1521
20	150.8	.28364E+04	.16212E+04	867.8702	.2166	.1474	.3276	.1480 .1605
21	151.5	.28265E+04	.16113E+04	865.4535	.2074	.1436	.3209	.1504 .1777
22	153.5	.00000E+00	.00000E+00	6826.4883	.1817	.1301	.2940	.1495 .2446

Tempo : 20.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12152E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14097E+04	.16111E+04	14201.8887	.3800	.1859	.3684	.0654 .0003
2	142.1	.14095E+04	.16109E+04	804.1042	.3652	.1865	.3747	.0732 .0004
3	142.4	.14094E+04	.16107E+04	803.8688	.3517	.1866	.3798	.0811 .0007
4	142.7	.14092E+04	.16106E+04	803.6236	.3396	.1864	.3838	.0890 .0012
5	143.1	.14090E+04	.16103E+04	803.3550	.3285	.1859	.3868	.0968 .0020
6	143.4	.14086E+04	.16100E+04	803.0416	.3184	.1851	.3887	.1045 .0032
7	143.8	.14081E+04	.16095E+04	802.6509	.3091	.1840	.3896	.1120 .0052
8	144.1	.14073E+04	.16087E+04	802.1328	.3004	.1826	.3894	.1192 .0084
9	144.5	.14061E+04	.16075E+04	801.4099	.2920	.1806	.3879	.1261 .0133
10	145.0	.14042E+04	.16055E+04	800.3643	.2836	.1781	.3848	.1323 .0211
11	145.6	.14012E+04	.16025E+04	798.8223	.2747	.1748	.3795	.1376 .0333
12	146.3	.13966E+04	.15980E+04	796.5363	.2648	.1703	.3713	.1415 .0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8961	.2531	.1641	.3591	.1434 .0803
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2689	.2324	.1513	.3322	.1398 .1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1553	.2316	.1513	.3324	.1403 .1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0149	.2304	.1512	.3325	.1410 .1449
17	149.7	.28337E+04	.16184E+04	869.8187	.2288	.1509	.3324	.1421 .1459
18	150.0	.28356E+04	.16203E+04	869.5065	.2263	.1504	.3320	.1435 .1478
19	150.3	.28368E+04	.16215E+04	868.9547	.2226	.1494	.3307	.1454 .1518
20	150.8	.28365E+04	.16213E+04	867.9105	.2169	.1475	.3277	.1478 .1602
21	151.5	.28268E+04	.16115E+04	865.5180	.2078	.1437	.3211	.1502 .1772
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.2153	.1822	.1304	.2944	.1494 .2436

Tempo : 25.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12152E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)	x(8)
1	141.7	.14097E+04	.16111E+04	14201.8887	.3803	.1859	.3684	.0651	.0003	
2	142.1	.14096E+04	.16109E+04	804.1022	.3655	.1865	.3746	.0730	.0004	
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8684	.3521	.1866	.3798	.0808	.0007	
4	142.7	.14092E+04	.16106E+04	803.6248	.3399	.1865	.3838	.0886	.0012	
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3570	.3289	.1860	.3868	.0964	.0020	
6	143.4	.14087E+04	.16100E+04	803.0447	.3188	.1852	.3887	.1040	.0032	
7	143.7	.14082E+04	.16095E+04	802.6548	.3095	.1841	.3897	.1116	.0052	
8	144.1	.14074E+04	.16087E+04	802.1371	.3008	.1826	.3895	.1188	.0083	
9	144.5	.14061E+04	.16075E+04	801.4144	.2924	.1807	.3880	.1257	.0133	
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3692	.2839	.1782	.3849	.1319	.0211	
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8278	.2750	.1749	.3796	.1373	.0332	
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5422	.2651	.1703	.3714	.1413	.0519	
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.9017	.2533	.1641	.3592	.1432	.0802	
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2726	.2325	.1514	.3322	.1396	.1443	
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1595	.2317	.1513	.3324	.1402	.1445	
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0199	.2305	.1512	.3325	.1409	.1449	
17	149.7	.28337E+04	.16184E+04	869.8249	.2289	.1509	.3324	.1419	.1458	
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5146	.2265	.1504	.3320	.1434	.1477	
19	150.3	.28368E+04	.16216E+04	868.9662	.2228	.1494	.3308	.1453	.1517	
20	150.8	.28366E+04	.16213E+04	867.9282	.2171	.1475	.3278	.1476	.1600	
21	151.5	.28269E+04	.16116E+04	865.5485	.2080	.1438	.3212	.1501	.1769	
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7041	.1825	.1305	.2947	.1493	.2430	

Tempo : 30.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)	x(8)
1	141.7	.14097E+04	.16111E+04	14201.8887	.3806	.1859	.3683	.0649	.0004	
2	142.1	.14096E+04	.16109E+04	804.0951	.3658	.1865	.3746	.0727	.0005	
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8617	.3524	.1866	.3797	.0805	.0008	
4	142.7	.14092E+04	.16106E+04	803.6180	.3402	.1865	.3837	.0883	.0013	
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3511	.3292	.1860	.3867	.0961	.0020	
6	143.4	.14087E+04	.16100E+04	803.0394	.3191	.1852	.3887	.1037	.0032	
7	143.7	.14082E+04	.16095E+04	802.6504	.3098	.1841	.3896	.1112	.0052	
8	144.1	.14074E+04	.16087E+04	802.1339	.3011	.1827	.3895	.1185	.0083	
9	144.5	.14062E+04	.16075E+04	801.4125	.2926	.1808	.3880	.1253	.0133	
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3688	.2842	.1783	.3849	.1316	.0211	
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8287	.2752	.1749	.3796	.1370	.0332	
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5446	.2652	.1704	.3714	.1411	.0519	
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.9047	.2534	.1641	.3592	.1430	.0802	
14	148.9	.28265E+04	.16111E+04	870.2755	.2325	.1514	.3322	.1396	.1443	
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1627	.2317	.1513	.3324	.1401	.1444	
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0233	.2306	.1512	.3325	.1408	.1449	
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8290	.2290	.1510	.3325	.1418	.1458	
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5198	.2266	.1505	.3320	.1432	.1477	
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9731	.2229	.1495	.3308	.1451	.1517	
20	150.8	.28367E+04	.16213E+04	867.9384	.2172	.1475	.3278	.1475	.1599	
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5655	.2082	.1438	.3213	.1499	.1768	
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1827	.1306	.2948	.1492	.2427	

Tempo : 35.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14097E+04	.16111E+04	14201.8887	.3809	.1859	.3682	.0646	.0004
2	142.1	.14096E+04	.16109E+04	804.0889	.3660	.1865	.3745	.0724	.0005
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8550	.3526	.1867	.3797	.0802	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16106E+04	803.6115	.3405	.1865	.3837	.0880	.0013
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3442	.3294	.1860	.3867	.0958	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16100E+04	803.0322	.3194	.1852	.3887	.1034	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16095E+04	802.6434	.3100	.1841	.3896	.1109	.0052
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1273	.3013	.1827	.3895	.1182	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16075E+04	801.4061	.2928	.1808	.3880	.1251	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3631	.2843	.1783	.3849	.1314	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8239	.2754	.1749	.3796	.1368	.0332
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5406	.2653	.1704	.3714	.1409	.0519
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.9018	.2535	.1642	.3592	.1429	.0802
14	148.9	.28265E+04	.16111E+04	870.2740	.2326	.1514	.3322	.1395	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1614	.2318	.1514	.3324	.1400	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0225	.2307	.1512	.3325	.1407	.1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8284	.2290	.1510	.3325	.1417	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5198	.2266	.1505	.3320	.1432	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9744	.2230	.1495	.3308	.1450	.1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9416	.2173	.1476	.3278	.1474	.1599
21	151.5	.28271E+04	.16117E+04	865.5726	.2083	.1439	.3213	.1498	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1828	.1306	.2949	.1491	.2426

Tempo : 40.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12154E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14097E+04	.16111E+04	14201.8887	.3811	.1859	.3682	.0643	.0004
2	142.1	.14096E+04	.16109E+04	804.0835	.3663	.1865	.3745	.0721	.0006
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8494	.3529	.1867	.3796	.0800	.0009
4	142.7	.14092E+04	.16106E+04	803.6055	.3407	.1865	.3837	.0878	.0013
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3382	.3297	.1860	.3867	.0955	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16100E+04	803.0264	.3195	.1853	.3887	.1032	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16095E+04	802.6373	.3102	.1842	.3896	.1107	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1209	.3014	.1827	.3895	.1180	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16075E+04	801.4001	.2929	.1808	.3880	.1249	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3573	.2844	.1783	.3849	.1312	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8181	.2754	.1749	.3797	.1367	.0333
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5355	.2654	.1704	.3714	.1408	.0520
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8975	.2536	.1642	.3592	.1428	.0802
14	148.9	.28265E+04	.16111E+04	870.2719	.2326	.1514	.3322	.1395	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1594	.2318	.1514	.3324	.1399	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0205	.2307	.1512	.3325	.1407	.1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8265	.2291	.1510	.3325	.1417	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5182	.2267	.1505	.3320	.1431	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9730	.2230	.1495	.3308	.1450	.1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9406	.2174	.1476	.3278	.1473	.1599
21	151.5	.28271E+04	.16117E+04	865.5729	.2083	.1439	.3213	.1497	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1829	.1307	.2949	.1490	.2425

Tempo : 45.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)	x(8)
1	141.7	.14097E+04	.16111E+04	14201.8887	.3814	.1859	.3681	.0641	.0004	
2	142.1	.14096E+04	.16109E+04	804.0792	.3666	.1865	.3745	.0719	.0006	
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8447	.3531	.1867	.3796	.0797	.0009	
4	142.7	.14093E+04	.16106E+04	803.6007	.3409	.1865	.3837	.0875	.0014	
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3333	.3298	.1861	.3867	.0953	.0021	
6	143.4	.14087E+04	.16100E+04	803.0211	.3197	.1853	.3887	.1030	.0033	
7	143.7	.14082E+04	.16095E+04	802.6318	.3104	.1842	.3896	.1105	.0053	
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1155	.3016	.1827	.3895	.1178	.0084	
9	144.5	.14062E+04	.16075E+04	801.3950	.2931	.1808	.3880	.1247	.0134	
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3523	.2845	.1783	.3849	.1311	.0212	
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8134	.2755	.1750	.3797	.1366	.0333	
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5309	.2655	.1704	.3715	.1407	.0520	
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8936	.2536	.1642	.3592	.1427	.0802	
14	148.9	.28265E+04	.16111E+04	870.2696	.2326	.1514	.3322	.1394	.1443	
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1570	.2319	.1514	.3324	.1399	.1445	
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0182	.2307	.1512	.3325	.1406	.1449	
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8243	.2291	.1510	.3325	.1416	.1458	
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5159	.2267	.1505	.3320	.1430	.1477	
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9707	.2231	.1495	.3308	.1449	.1517	
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9387	.2174	.1476	.3278	.1472	.1599	
21	151.5	.28271E+04	.16117E+04	865.5714	.2084	.1439	.3213	.1497	.1767	
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1829	.1307	.2949	.1489	.2425	

Tempo : 50.0 min Destilado : .20139E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)	x(8)
1	141.7	.14098E+04	.16111E+04	14201.8887	.3817	.1859	.3681	.0638	.0004	
2	142.1	.14096E+04	.16110E+04	804.0770	.3668	.1865	.3744	.0717	.0006	
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8423	.3533	.1867	.3796	.0795	.0009	
4	142.7	.14093E+04	.16106E+04	803.5977	.3411	.1865	.3837	.0873	.0014	
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3298	.3300	.1861	.3867	.0951	.0021	
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0171	.3199	.1853	.3887	.1028	.0034	
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6274	.3105	.1842	.3896	.1103	.0053	
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1111	.3017	.1828	.3895	.1176	.0084	
9	144.5	.14062E+04	.16075E+04	801.3904	.2932	.1808	.3880	.1246	.0134	
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3475	.2846	.1783	.3849	.1310	.0212	
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8088	.2756	.1750	.3797	.1364	.0333	
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5267	.2655	.1704	.3715	.1406	.0520	
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8901	.2536	.1642	.3592	.1427	.0803	
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2676	.2326	.1514	.3322	.1394	.1443	
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1550	.2319	.1514	.3324	.1399	.1445	
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0159	.2308	.1512	.3325	.1406	.1449	
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8222	.2291	.1510	.3325	.1416	.1458	
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5138	.2267	.1505	.3320	.1430	.1477	
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9684	.2231	.1495	.3308	.1449	.1517	
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9365	.2174	.1476	.3278	.1472	.1599	
21	151.5	.28271E+04	.16117E+04	865.5692	.2084	.1439	.3213	.1496	.1768	
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1830	.1307	.2949	.1489	.2425	

Tempo : 55.0 min Destilado : .20140E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

	Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14098E+04	.16112E+04	14201.8887	.3820	.1859	.3681	.0636	.0004
2	142.1	.14096E+04	.16110E+04	804.0757	.3671	.1865	.3744	.0714	.0006
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8409	.3536	.1867	.3796	.0793	.0009
4	142.7	.14093E+04	.16106E+04	803.5962	.3413	.1865	.3837	.0871	.0014
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3278	.3302	.1861	.3867	.0949	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0148	.3200	.1853	.3887	.1026	.0034
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6251	.3106	.1842	.3897	.1101	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1083	.3018	.1828	.3895	.1175	.0084
9	144.5	.14061E+04	.16075E+04	801.3873	.2933	.1809	.3880	.1244	.0134
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3447	.2847	.1783	.3849	.1308	.0212
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8063	.2757	.1750	.3797	.1363	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5244	.2656	.1704	.3715	.1405	.0520
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8879	.2537	.1642	.3592	.1426	.0803
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2664	.2327	.1514	.3322	.1393	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1537	.2319	.1514	.3324	.1398	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0150	.2308	.1513	.3325	.1405	.1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8210	.2292	.1510	.3325	.1416	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5126	.2268	.1505	.3321	.1430	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9672	.2231	.1495	.3308	.1448	.1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9348	.2175	.1476	.3279	.1472	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5668	.2084	.1439	.3213	.1496	.1768
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1830	.1307	.2949	.1488	.2425

Tempo : 60.0 min Destilado : .20140E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

	Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14098E+04	.16112E+04	14201.8887	.3822	.1859	.3680	.0634	.0003
2	142.1	.14096E+04	.16110E+04	804.0756	.3673	.1865	.3744	.0712	.0006
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8399	.3538	.1867	.3796	.0791	.0009
4	142.7	.14093E+04	.16106E+04	803.5947	.3415	.1866	.3837	.0869	.0014
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3265	.3304	.1861	.3867	.0947	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0142	.3202	.1853	.3887	.1024	.0034
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6246	.3108	.1842	.3897	.1100	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1077	.3019	.1828	.3895	.1173	.0084
9	144.5	.14061E+04	.16075E+04	801.3863	.2934	.1809	.3881	.1243	.0134
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3432	.2848	.1784	.3850	.1307	.0212
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8041	.2757	.1750	.3797	.1362	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5217	.2656	.1704	.3715	.1404	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8854	.2537	.1642	.3593	.1426	.0803
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2646	.2327	.1514	.3323	.1393	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1521	.2319	.1514	.3324	.1398	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0132	.2308	.1513	.3325	.1405	.1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8195	.2292	.1510	.3325	.1415	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5111	.2268	.1505	.3321	.1429	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9660	.2231	.1495	.3308	.1448	.1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9334	.2175	.1476	.3279	.1471	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5654	.2084	.1439	.3214	.1495	.1768
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1830	.1307	.2950	.1488	.2425

Tempo : 65.0 min Destilado : .20140E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14098E+04	.16112E+04	14201.8887	.3825	.1859	.3680	.0632	.0003
2	142.1	.14096E+04	.16110E+04	804.0768	.3675	.1865	.3744	.0710	.0006
3	142.4	.14094E+04	.16108E+04	803.8412	.3540	.1867	.3796	.0789	.0009
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5958	.3417	.1866	.3836	.0867	.0013
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3271	.3306	.1861	.3867	.0945	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0142	.3203	.1854	.3887	.1023	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6245	.3109	.1843	.3897	.1098	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1077	.3020	.1828	.3895	.1172	.0084
9	144.5	.14061E+04	.16075E+04	801.3865	.2934	.1809	.3881	.1242	.0134
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3431	.2849	.1784	.3850	.1306	.0212
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8041	.2758	.1750	.3797	.1362	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5217	.2657	.1705	.3715	.1403	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8848	.2537	.1642	.3593	.1425	.0803
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2634	.2327	.1514	.3323	.1393	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1505	.2319	.1514	.3324	.1398	.1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0116	.2308	.1513	.3325	.1405	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8177	.2292	.1510	.3325	.1415	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5093	.2268	.1505	.3321	.1429	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9641	.2231	.1495	.3308	.1448	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9318	.2175	.1476	.3279	.1471	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5638	.2084	.1439	.3214	.1495	.1768
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1830	.1307	.2950	.1488	.2426

Tempo : 70.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14098E+04	.16112E+04	14201.8887	.3828	.1859	.3679	.0630	.0002
2	142.1	.14096E+04	.16110E+04	804.0789	.3678	.1865	.3743	.0708	.0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8429	.3542	.1867	.3795	.0787	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5974	.3419	.1866	.3836	.0866	.0013
5	143.1	.14090E+04	.16104E+04	803.3286	.3307	.1861	.3867	.0944	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0155	.3205	.1854	.3887	.1021	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6254	.3110	.1843	.3897	.1097	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1086	.3021	.1828	.3896	.1171	.0084
9	144.5	.14061E+04	.16076E+04	801.3873	.2935	.1809	.3881	.1241	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3443	.2849	.1784	.3850	.1305	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8054	.2758	.1750	.3797	.1361	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5233	.2657	.1705	.3715	.1403	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8867	.2538	.1642	.3593	.1425	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2649	.2327	.1514	.3323	.1393	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1520	.2319	.1514	.3324	.1398	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0130	.2308	.1513	.3325	.1405	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8187	.2292	.1510	.3325	.1415	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5100	.2268	.1505	.3321	.1429	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9643	.2232	.1495	.3308	.1448	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9315	.2175	.1476	.3279	.1471	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5633	.2085	.1439	.3214	.1495	.1768
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1830	.1307	.2950	.1487	.2425

Tempo : 75.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12152E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14099E+04	.16112E+04	14201.8887	.3831	.1859	.3679	.0628	.0002
2	142.1	.14096E+04	.16110E+04	804.0813	.3680	.1865	.3743	.0707	.0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8455	.3544	.1867	.3795	.0785	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5999	.3421	.1866	.3836	.0864	.0013
5	143.0	.14091E+04	.16104E+04	803.3311	.3309	.1862	.3867	.0942	.0020
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0181	.3206	.1854	.3887	.1020	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6284	.3112	.1843	.3897	.1096	.0052
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1115	.3022	.1828	.3896	.1170	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3902	.2936	.1809	.3881	.1240	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3473	.2850	.1784	.3850	.1304	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8081	.2759	.1750	.3798	.1360	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5254	.2658	.1705	.3716	.1402	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8876	.2538	.1642	.3593	.1424	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2648	.2327	.1514	.3323	.1392	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1519	.2320	.1514	.3324	.1397	.1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0126	.2308	.1513	.3325	.1404	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8182	.2292	.1510	.3325	.1415	.1458
18	150.0	.28356E+04	.16204E+04	869.5094	.2268	.1505	.3321	.1429	.1477
19	150.3	.28368E+04	.16216E+04	868.9640	.2232	.1495	.3308	.1447	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9315	.2175	.1476	.3279	.1470	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5634	.2085	.1439	.3214	.1495	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1487	.2425

Tempo : 80.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3833	.1859	.3678	.0626	.0002
2	142.1	.14097E+04	.16111E+04	804.0857	.3683	.1865	.3742	.0705	.0004
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8493	.3547	.1867	.3795	.0784	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.6035	.3423	.1866	.3836	.0862	.0012
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3344	.3311	.1862	.3867	.0941	.0020
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0209	.3208	.1854	.3887	.1018	.0032
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6307	.3113	.1843	.3897	.1094	.0052
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1135	.3024	.1829	.3896	.1168	.0083
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3923	.2937	.1810	.3882	.1239	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3490	.2851	.1784	.3851	.1303	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8099	.2760	.1751	.3798	.1359	.0332
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5270	.2658	.1705	.3716	.1402	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8889	.2538	.1642	.3593	.1424	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2656	.2327	.1514	.3323	.1392	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1525	.2320	.1514	.3324	.1397	.1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0134	.2309	.1513	.3326	.1404	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8192	.2292	.1510	.3325	.1414	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5108	.2268	.1505	.3321	.1428	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9654	.2232	.1495	.3309	.1447	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9330	.2175	.1476	.3279	.1470	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5654	.2085	.1439	.3214	.1494	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1487	.2425

Tempo : 85.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12152E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3835	.1859	.3678	.0625 .0002
2	142.1	.14097E+04	.16111E+04	804.0836	.3685	.1865	.3742	.0703 .0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8485	.3548	.1867	.3795	.0782 .0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.6039	.3425	.1866	.3836	.0861 .0012
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3359	.3312	.1862	.3867	.0939 .0020
6	143.4	.14088E+04	.16101E+04	803.0238	.3209	.1854	.3887	.1017 .0032
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6346	.3114	.1843	.3897	.1093 .0052
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1182	.3025	.1829	.3896	.1167 .0083
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3976	.2938	.1810	.3882	.1238 .0132
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3549	.2852	.1784	.3851	.1303 .0210
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8158	.2760	.1751	.3798	.1359 .0332
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5329	.2659	.1705	.3716	.1401 .0519
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8940	.2539	.1643	.3593	.1423 .0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2689	.2328	.1514	.3323	.1592 .1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1559	.2320	.1514	.3325	.1397 .1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0164	.2309	.1513	.3326	.1404 .1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8223	.2293	.1510	.3325	.1414 .1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5134	.2269	.1505	.3321	.1428 .1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9679	.2232	.1495	.3309	.1447 .1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9352	.2176	.1476	.3279	.1470 .1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5671	.2085	.1439	.3214	.1494 .1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1487 .2425

Tempo : 90.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3837	.1859	.3677	.0623 .0001
2	142.1	.14097E+04	.16111E+04	804.0782	.3686	.1865	.3742	.0702 .0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8433	.3550	.1868	.3794	.0781 .0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5989	.3426	.1866	.3836	.0859 .0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3314	.3313	.1862	.3867	.0938 .0020
6	143.4	.14088E+04	.16101E+04	803.0195	.3210	.1854	.3887	.1016 .0032
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6309	.3115	.1843	.3897	.1092 .0052
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1153	.3026	.1829	.3896	.1166 .0083
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3953	.2939	.1810	.3882	.1237 .0133
10	145.0	.14043E+04	.16056E+04	800.3534	.2852	.1785	.3851	.1302 .0211
11	145.5	.14013E+04	.16026E+04	798.8153	.2761	.1751	.3798	.1358 .0332
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5333	.2659	.1705	.3716	.1401 .0519
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8954	.2539	.1643	.3593	.1423 .0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2704	.2328	.1514	.3323	.1392 .1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1580	.2320	.1514	.3325	.1397 .1444
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0188	.2309	.1513	.3326	.1404 .1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8247	.2293	.1510	.3325	.1414 .1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5162	.2269	.1505	.3321	.1428 .1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9707	.2232	.1496	.3309	.1447 .1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9384	.2176	.1476	.3279	.1470 .1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5707	.2085	.1439	.3214	.1494 .1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1486 .2425

Tempo : 95.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

	Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3838	.1859	.3677	.0622	.0001
2	142.1	.14097E+04	.16111E+04	804.0742	.3687	.1865	.3742	.0700	.0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8392	.3551	.1868	.3794	.0779	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5950	.3427	.1866	.3836	.0858	.0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3273	.3314	.1862	.3867	.0937	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0153	.3211	.1854	.3887	.1014	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6266	.3116	.1843	.3897	.1091	.0052
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1111	.3026	.1829	.3896	.1165	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3912	.2940	.1810	.3882	.1236	.0133
10	145.0	.14043E+04	.16056E+04	800.3495	.2853	.1785	.3851	.1301	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8118	.2761	.1751	.3798	.1357	.0332
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5302	.2659	.1705	.3716	.1400	.0519
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8932	.2539	.1643	.3593	.1423	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2692	.2328	.1514	.3323	.1392	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1566	.2320	.1514	.3325	.1397	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0175	.2309	.1513	.3326	.1404	.1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8237	.2293	.1510	.3325	.1414	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5153	.2269	.1505	.3321	.1428	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9701	.2233	.1496	.3309	.1446	.1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9381	.2176	.1476	.3279	.1470	.1599
21	151.5	.28271E+04	.16117E+04	865.5708	.2085	.1440	.3214	.1494	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1486	.2425

Tempo : 100.0 min Destilado : .20141E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

	Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3840	.1859	.3677	.0620	.0001
2	142.1	.14097E+04	.16111E+04	804.0715	.3689	.1865	.3742	.0699	.0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8362	.3552	.1868	.3794	.0778	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5916	.3428	.1866	.3836	.0857	.0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3235	.3315	.1862	.3867	.0935	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0112	.3212	.1854	.3887	.1013	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6226	.3117	.1843	.3897	.1090	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1069	.3027	.1829	.3896	.1164	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3868	.2940	.1810	.3882	.1235	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3455	.2853	.1785	.3851	.1300	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8082	.2762	.1751	.3798	.1357	.0333
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5268	.2660	.1705	.3716	.1400	.0520
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8901	.2539	.1643	.3593	.1422	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2676	.2328	.1514	.3323	.1392	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1551	.2320	.1514	.3325	.1396	.1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0161	.2309	.1513	.3326	.1403	.1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8223	.2293	.1510	.3325	.1414	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5139	.2269	.1505	.3321	.1428	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9688	.2233	.1496	.3309	.1446	.1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9368	.2176	.1476	.3279	.1469	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5694	.2086	.1440	.3214	.1494	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1486	.2425

Tempo : 105.0 min Destilado : .20142E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3841	.1859	.3677	.0619 .0001
2	142.1	.14097E+04	.16111E+04	804.0692	.3690	.1865	.3742	.0698 .0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8338	.3553	.1868	.3794	.0776 .0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5889	.3429	.1866	.3836	.0856 .0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3209	.3316	.1862	.3867	.0934 .0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0084	.3213	.1854	.3887	.1012 .0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6194	.3117	.1844	.3897	.1089 .0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1035	.3027	.1829	.3896	.1163 .0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3836	.2941	.1810	.3882	.1234 .0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3422	.2854	.1785	.3851	.1300 .0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8049	.2762	.1751	.3798	.1356 .0333
12	146.2	.13967E+04	.15980E+04	796.5239	.2660	.1705	.3716	.1399 .0520
13	147.2	.13857E+04	.15870E+04	792.8877	.2540	.1643	.3593	.1422 .0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2663	.2328	.1514	.3323	.1391 .1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1538	.2320	.1514	.3325	.1396 .1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0149	.2309	.1513	.3326	.1403 .1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8210	.2293	.1510	.3325	.1413 .1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5127	.2269	.1505	.3321	.1427 .1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9675	.2233	.1496	.3309	.1446 .1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9354	.2176	.1476	.3279	.1469 .1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5678	.2086	.1440	.3214	.1493 .1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1831	.1307	.2950	.1486 .2425

Tempo : 110.0 min Destilado : .20142E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3843	.1859	.3677	.0618 .0000
2	142.0	.14097E+04	.16111E+04	804.0677	.3691	.1865	.3741	.0696 .0006
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8321	.3554	.1868	.3794	.0775 .0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5870	.3430	.1866	.3836	.0854 .0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3184	.3317	.1862	.3867	.0933 .0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0058	.3214	.1854	.3887	.1011 .0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6165	.3118	.1844	.3898	.1088 .0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.1004	.3028	.1829	.3896	.1163 .0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3802	.2941	.1810	.3882	.1234 .0134
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3386	.2854	.1785	.3851	.1299 .0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8012	.2762	.1751	.3798	.1356 .0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5202	.2660	.1705	.3716	.1399 .0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8846	.2540	.1643	.3593	.1422 .0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2643	.2328	.1514	.3323	.1391 .1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1518	.2320	.1514	.3325	.1396 .1445
16	149.4	.28315E+04	.16162E+04	870.0128	.2309	.1513	.3326	.1403 .1449
17	149.7	.28338E+04	.16185E+04	869.8188	.2293	.1510	.3325	.1413 .1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5106	.2269	.1505	.3321	.1427 .1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9653	.2233	.1496	.3309	.1446 .1517
20	150.8	.28367E+04	.16214E+04	867.9333	.2176	.1476	.3279	.1469 .1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5657	.2086	.1440	.3214	.1493 .1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1832	.1307	.2950	.1486 .2425

Tempo : 115.0 min Destilado : .20142E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12153E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14099E+04	.16114E+04	14201.8887	.3844	.1859	.3677	.0616	.0000
2	142.0	.14097E+04	.16111E+04	804.0674	.3693	.1865	.3741	.0695	.0006
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8319	.3556	.1868	.3794	.0774	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5864	.3431	.1867	.3836	.0853	.0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3177	.3318	.1862	.3867	.0932	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16101E+04	803.0051	.3214	.1855	.3887	.1010	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6157	.3119	.1844	.3898	.1087	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.0996	.3028	.1829	.3896	.1162	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3794	.2941	.1810	.3882	.1233	.0134
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3379	.2854	.1785	.3851	.1298	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8005	.2762	.1751	.3798	.1355	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5192	.2660	.1705	.3716	.1398	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8831	.2540	.1643	.3594	.1421	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2629	.2328	.1515	.3323	.1391	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1503	.2321	.1514	.3325	.1396	.1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0112	.2309	.1513	.3326	.1403	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8173	.2293	.1510	.3325	.1413	.1458
18	150.0	.28357E+04	.16204E+04	869.5089	.2269	.1505	.3321	.1427	.1477
19	150.3	.28369E+04	.16216E+04	868.9635	.2233	.1496	.3309	.1446	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9308	.2176	.1476	.3279	.1469	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5629	.2086	.1440	.3214	.1493	.1767
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1832	.1307	.2950	.1485	.2425

Tempo : 120.0 min Destilado : .20142E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12152E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3845	.1859	.3676	.0615	.0001
2	142.0	.14097E+04	.16111E+04	804.0666	.3694	.1865	.3741	.0694	.0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8310	.3557	.1868	.3794	.0773	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5858	.3432	.1867	.3836	.0852	.0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3172	.3319	.1862	.3867	.0931	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16102E+04	803.0046	.3215	.1855	.3887	.1009	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6155	.3119	.1844	.3898	.1086	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.0999	.3029	.1829	.3897	.1161	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3801	.2942	.1810	.3882	.1232	.0134
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3382	.2855	.1785	.3851	.1298	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.8006	.2763	.1751	.3799	.1355	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5195	.2660	.1705	.3716	.1398	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8835	.2540	.1643	.3594	.1421	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2632	.2328	.1515	.3323	.1391	.1443
15	149.2	.28290E+04	.16137E+04	870.1505	.2321	.1514	.3325	.1396	.1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0111	.2310	.1513	.3326	.1403	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8170	.2293	.1510	.3325	.1413	.1458
18	150.0	.28356E+04	.16204E+04	869.5082	.2269	.1505	.3321	.1427	.1477
19	150.3	.28368E+04	.16216E+04	868.9626	.2233	.1496	.3309	.1446	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9300	.2176	.1476	.3279	.1469	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5615	.2086	.1440	.3214	.1493	.1768
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1832	.1307	.2950	.1485	.2425

Tempo : 125.0 min Destilado : .20142E+03 mol/min
 Produto de Fundo : .12152E+04 mol/min

Temp(C)	VL(mol/min)	VV(mol/min)	x(1)	x(2)	x(3)	x(4)	x(5)	x(6)	x(7)
1	141.7	.14099E+04	.16113E+04	14201.8887	.3847	.1859	.3676	.0614	.0001
2	142.0	.14097E+04	.16111E+04	804.0678	.3695	.1866	.3741	.0693	.0005
3	142.4	.14095E+04	.16109E+04	803.8318	.3558	.1868	.3794	.0772	.0008
4	142.7	.14093E+04	.16107E+04	803.5862	.3433	.1867	.3836	.0851	.0013
5	143.0	.14091E+04	.16105E+04	803.3174	.3320	.1862	.3867	.0930	.0021
6	143.4	.14087E+04	.16102E+04	803.0043	.3216	.1855	.3888	.1009	.0033
7	143.7	.14082E+04	.16096E+04	802.6149	.3120	.1844	.3898	.1086	.0053
8	144.1	.14074E+04	.16088E+04	802.0988	.3030	.1829	.3897	.1160	.0084
9	144.5	.14062E+04	.16076E+04	801.3784	.2942	.1810	.3882	.1232	.0133
10	145.0	.14042E+04	.16056E+04	800.3362	.2855	.1785	.3851	.1297	.0211
11	145.5	.14012E+04	.16026E+04	798.7979	.2763	.1751	.3799	.1354	.0333
12	146.2	.13966E+04	.15980E+04	796.5163	.2661	.1705	.3716	.1398	.0520
13	147.2	.13856E+04	.15870E+04	792.8802	.2540	.1643	.3594	.1421	.0802
14	148.9	.28264E+04	.16111E+04	870.2612	.2328	.1515	.3323	.1391	.1443
15	149.2	.28289E+04	.16137E+04	870.1485	.2321	.1514	.3325	.1396	.1445
16	149.4	.28314E+04	.16162E+04	870.0094	.2310	.1513	.3326	.1403	.1449
17	149.7	.28337E+04	.16185E+04	869.8156	.2293	.1510	.3325	.1413	.1458
18	150.0	.28356E+04	.16204E+04	869.5072	.2269	.1505	.3321	.1427	.1477
19	150.3	.28368E+04	.16216E+04	868.9618	.2233	.1496	.3309	.1445	.1517
20	150.8	.28366E+04	.16214E+04	867.9294	.2176	.1476	.3279	.1469	.1599
21	151.5	.28270E+04	.16117E+04	865.5614	.2086	.1440	.3214	.1493	.1768
22	153.4	.00000E+00	.00000E+00	6827.7314	.1832	.1307	.2950	.1485	.2425

**REFERÊNCIAS
BIBLIOGRÁFICAS**

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- “Aspen Plus Manual,” User Guide Volume I e II. Aspen Technology, Inc., Cambridge, Massachussets, USA, 1994.
- Becker, F. E. and Zakak, A. I., Mechanical Vapor Recompression for Energy Recovery in Distillation. Presented at the National AIChE Meeting, March, 1985 (a).
- Becker, F. E. and Zakak, A. I., Recovering Energy by Mechanical Vapor Recompression. CEP, July, 1985 (b).
- Becker, F. E. and Zakak, A. I., Recover Heat by Mechanical Vapor Recompression. Hydrocarbon Processing, May, 1985 (c).
- Boston, J. F. and Sullivan, S. L., Canadian Journal of Chemical Engineering, 50:663, 1972.
- Boston, J. F. and Sullivan, S. L., A New Class of Solution Methods for Multicomponent, Multistage Separation Processes. Canadian Journal of Chemical Engineering, 52, February, 1974.
- Broyden, C. G., A Class of Methods for Solving Non-Linear Simultaneous Equations. Mathematics of Computation, 19:577-93, 1965.
- Carnahan, B. et alii., Applied Numerical Methodos, New York, John Wiley & Sons, Inc., 1969.
- Cho, Y. S. and Joseph, B., Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes. Part I. Development of the Model Redution Procedure. AIChE Journal, 29(2):261-269, 1983 (a).

- Cho, Y. S. and Joseph, B., Reduced-Order Steady-State and Dynamic Models for Separation Processes. Part II. Applications to Nonlinear Multicomponent Systems AICHE Journal, 29(2):270-276, 1983 (b).
- Cho, Y. S. and Joseph, B., Reduced-Order Models for Separation Columns - III. Applications to Columns with Multiple Feeds and Sidestreams. Computers & Chemical Engineering, 8(2):81-90, 1984.
- “Compressor Handbook for the Hydrocarbon Processing Industries,” Gulf Publishing Co., Houston, 1979.
- Coker, A. K., Selecting and Sizing Process Compressors. Hydrocarbon Processing, July, 1994.
- Danziger, R. and Baumer, W., Distillation Columns with Vapour Recompression. I. Chem. E. Symposium Series n^o56, 1980.
- Doukas, N. and Luyben W. L., Instrumental Tech. 25(6):43, 1978.
- Distefano, G. P., Stability of Numerical Integratio Techniques. AICHE Journal, 14:427, 1965.
- Eckert, E. and Kubicek, M., Modeling of Dynamics for Multiple Liquid-Vapour Equilibrium Stage. Chemical Engineering Science, 49(11):1783-1788, 1994.
- Eckert, E. and Kubicek, M., Dynamic Simulation of a Distillation Column with Multiple Liquid Phases. Computers Chemical Engineering, 19:393-398, 1995.
- Freshwater, D. C., Thermal Economy in Distillation. Trans. Instn Chem. Engrs, 29, 1951.
- Fuentes, C. and Luyben W. L., Comparison of Energy Models for Destillation Columns. American Chemical Society, Communications 1982.

- Fitzmorris, R. F. and Mah, R. S. H., Improving Distillation Column Design Using Thermodynamic Availability Analysis. AICHE Journal, 26(2):265, 1980.
- Gallun, S. E. and Holland, C. D., Computers and Chemical Engineering, 6(3):231, 1982.
- Heyen, G. et alii., Dynamic Simulation and Control of Gas Turbines and Compressor Systems. Computers Chemical Engineering, 18(11/12):1071-1082, 1994.
- Holland, C. D. and Liapis, A. I., Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems, McGraw-Hill, 1983.
- Howard, G. M., Unsteady State Behavior of Multi-component Distillation Columns. AICHE Journal, November, 1970.
- Jaganathan, R. et alii., Heat Pump Assisted Distillation VI. Energy Research, 11:327-332, 1987.
- Lagar, G. et alii., Numerical Studies in Solving Dynamic Distillation Problems. Computers Chemical Engineering, 11(4):383, 1987.
- Luyben, W. L., Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers, McGraw-Hill, 1990.
- Mah, R. S. et alii., Dynamic Behaviour of Multi-Component Multi-Stage Systems. Numerical Methods for the Solution. Chemical Engineering Science, 17:619, 1962.
- Marshall, W. R. and Pigford, R. L., The Application of Differential Equations to Chemical Engineering Problems. University of Delaware, 1947.

- Meili, A. and Stuecheli, A., Distillation Columns with Direct Vapor Recompression. Chemical Engineering, 133, February, 1987.
- Mix, T. J. et alii., Energy Conservation in Distillation. CEP, April, 1978.
- Mostafa, H. A., Thermodynamic Availability Analysis of Fractional Distillation with Vapor Compression. Canadian Journal, 59, 1981.
- Null, H. R., Heat Pumps in Distillation. CEP, July, 1976.
- O'Neill, P. S. et alii., Vapor Recompression System with High Efficiency Components. CEP, July, 1985.
- Pereira, R. S., Modelagem e Simulação Dinâmica de Colunas de Destilação a partir do Modelo de Ordem Reduzida. Tese de Mestrado, Unicamp, 1994.
- Petterson, W. C. and Wells, T. A., Energy-Saving Schemes in Distillation. Chemical Engineering, September, 1977.
- Poiani, L. M., Controle de Colunas de Destilação. Aplicação a Sistemas de Elevada Pureza. Tese de Doutorado, Unicamp, 1993.
- Prokopakis, G. J. and Seider, W. D., Dynamic Simulation of Azeotropic Distillation Towers. AIChE Journal, 29(6):1017, 1983.
- Ravagnani, S. P., Modelos de Ordem Reduzida para Processos de Separação por Destilação Multicomponentes em Colunas de Pratos. Aplicação a Sistemas Complexos. Tese de Doutorado, USP, 1988.
- Ravagnani, T. M. K., Recuperação de Energia da Destilação do Sistema Etanol-Água. Tese de Mestrado, Unicamp, 1983.

- Reid, R. C. et alii., Properties of Gases and Liquids. New York, McGraw-Hill, Inc. 1987.
- Rose, A. and Williams, T. J., Automatic Control in Continuous Distillation. Industrial and Engineering Chemistry, 47(11), November, 1955.
- Rosenbrock, H. H., An Investigation of the Transient Response of a Distillation Column Part I: Solution of the Equations. Trans. Instn. Chemical Energy, 35, 1957.
- Rosenbrock, H. H., British Chemical Engineering, 3:491, 1958.
- Rosenbrock, H. H., Trans. Instn. Chemical. Engineering., 40:35, 1962.
- Smith, B. D., Design of Equilibrium Stage Process, New York, McGraw-Hill, Inc. 1963.
- Stanley, G. T. and MacAvoy, T. J., Dynamic Energy Conservation Aspects of Distillation Control. American Chemical Society, 1985.
- Supranto, S. et alii., Heat Pump Assisted Distillation I. Energy Research, 10:145-161, 1986.
- Tyreus, B. D. et alii., Stiffness in Distillation Models and the Use of an Implicit Integration Method to Reduce Computation Times. IEC. Proc. Des. Dev., 14:427, 1975.
- Villadsen, J., Selected Approximation Methods for Chemical Engineering Problems, Lyngby, Denmarks tekniske Hojskole, 1970.
- Wozny, G. and Jeromin, L., Dynamic Process Simulation in Industry. International Chemical Engineering, 34(2), April, 1994.