



UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

*Área de Concentração:*

DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**"ANÁLISE DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO  
MULTICOMPONENTE EM BATELADA E ESTRATÉGIA  
DE OTIMIZAÇÃO HEURÍSTICA"**

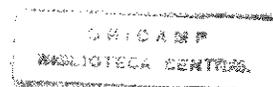
por: IRAÍ SANTOS JÚNIOR

**orientadora:** Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. MARIA REGINA WOLF MACIEL

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO apresentado junto  
à Faculdade de Engenharia Química da  
Universidade Estadual de Campinas como parte  
dos requisitos exigidos para a obtenção do Título  
de Mestre em Engenharia Química.

CAMPINAS / BRASIL

Abril - 1998



UNIDADE	BC
N.º CHAMADA:	UNICAMP
	Sa59a
N.º	34142
PREÇO	395/98
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	05/06/98
N.º CPD	

CM-00112429-1

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

Sa59a Santos Júnior, Iraí  
Análise do processo de destilação multicomponente em batelada e estratégia de otimização heurística. / Iraí Santos Júnior.--Campinas, SP: [s.n.], 1998.

Orientadora: Maria Regina Wolf Maciel  
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação – Modelo matemático. 2. Simulação (Computadores). 3. Engenharia química. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 22 de abril  
de 1998 pela banca examinadora constituída pelos(as) professores(as)  
doutores:



**Profa. Dra. MARIA REGINA WOLF MACIEL**

**(orientadora)**



**Prof. Dr. REGINALDO GUIRARDELLO**

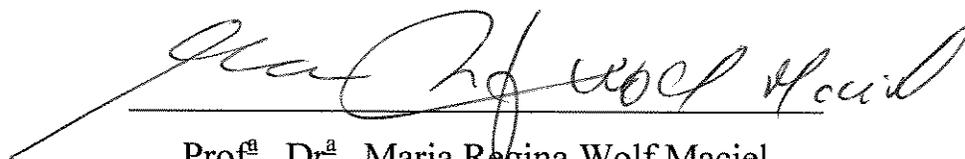
**(titular)**



**Profa. Dra. LILIANE MARIA FERRARESO LONA BATISTA**

**(titular)**

Esta versão corresponde a redação final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Eng<sup>o</sup>. Iraí Santos Júnior e aprovada pela Comissão Julgadora em 22 de abril de 1998.

A handwritten signature in black ink, written in a cursive style, reading "Prof. Dr.ª Maria Regina Wolf Maciel". The signature is positioned above a horizontal line.

Prof.<sup>a</sup>. Dr.<sup>a</sup>. Maria Regina Wolf Maciel

(Orientadora)

**Este trabalho é dedicado à**

meus pais *IRÁÍ* e *DIVA*

meus irmãos *FRANCISCO* e *MARCELO*

minha noiva *KLEIMAR*

pelos incentivos e pela extensa ajuda aos  
meus propósitos profissionais e pessoais.

## **Agradecimentos**

Agradeço primeiramente à DEUS por ter dado a mim bastante saúde e sabedoria na execução deste trabalho.

Agradeço à Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Maria Regina Wolf. Maciel pela amizade e orientação no cumprimento deste projeto.

Aos colegas desta Faculdade que contribuíram para o andamento deste trabalho em especial ao colega Luz Jr. pelo fornecimento do programa computacional utilizado nos estudos desta dissertação.

Finalmente, agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro sem o qual este trabalho não seria realizado.

# SUMÁRIO

	<i>Página</i>
Resumo	i
Abstract	iii
Nomenclatura	v
Lista de figuras	vii
Lista de tabelas	xi
<b>Capítulo I: INTRODUÇÃO E OBJETIVOS</b>	<b>1</b>
<b>Capítulo II: DESTILAÇÃO EM BATELADA - Abordagem sobre otimização</b>	<b>4</b>
II.1 – Descrição do processo	4
II.2 – Modelagem da coluna de destilação em batelada	6
II.3 – Verificação da modelagem utilizada	9
II.4 – Otimização da coluna de destilação em batelada	14
<b>Capítulo III: FLEXIBILIDADE OPERACIONAL DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM BATELADA</b>	<b>18</b>
III.1 – Características dos sistemas avaliados	20
II.1.1 – Sistema 01: benzeno, tolueno e m-xileno	21
II.1.2 – Sistema 02: $\alpha$ -pineno, canfeno e $\beta$ -pineno	23
II.1.3 – Sistema 03: acetaldeído, etanol e água	25
II.1.4 – Sistema 04: benzeno, mono-cloro-benzeno e o-di-cloro-benzeno	27
<b>Capítulo IV: OTIMIZAÇÃO HEURÍSTICA DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM BATELADA</b>	<b>30</b>
IV.1 – Análise das variáveis otimizadoras	30
IV.1.1 – Política de otimização via razão de refluxo	34
IV.1.1.1 – Análise do tempo de operação do processo	34
IV.1.1.2 – Análise da produtividade	43
IV.1.1.3 – Análise da quantidade de produto recuperado	54
IV.1.2 – Política de otimização via número de pratos	58
IV.1.2.1 – Análise do tempo de operação do processo	59
IV.1.2.2 – Análise da produtividade	66
IV.1.2.3 – Análise da quantidade de produto recuperado	69

IV.1.3 – Política de otimização via taxa de calor fornecida ao refeedor	72
IV.1.3.1 – Análise do tempo de operação do processo	73
IV.1.3.2 – Análise da produtividade	78
IV.1.3.3 – Análise da quantidade de produto recuperado	81
IV.1.3.4 – Análise geral da otimização da taxa de calor	84
IV.1.4 – Análise via “holdup” do prato	86
IV.1.4.1 – Análise do tempo de operação do processo	86
IV.1.4.2 – Análise da produtividade	91
IV.1.4.3 – Análise da quantidade de produto recuperado	94
IV.1.4.4 – Análise da quantidade de calor fornecido ao refeedor	95
IV.1.5 – Análise via “holdup” do condensador	96
IV.1.5.1 – Análise do tempo de operação do processo	96
IV.1.5.2 – Análise da produtividade	99
IV.1.5.3 – Análise da quantidade de produto recuperado	102
IV.1.5.4 – Análise da quantidade de calor fornecido ao refeedor	102
IV.1.6 – Análise via combinação dos “holdup’s”	103
IV.2 – Resultados e análises dos sistemas otimizados	106
IV.2.1 – Otimização do Sistema 01: benzeno, tolueno e m-xileno	107
IV.2.2 – Otimização do Sistema 02: $\alpha$ -pineno, canfeno e $\beta$ -pineno	109
IV.2.3 – Otimização do Sistema 03: acetaldeído, etanol e água	111
IV.2.4 – Otimização do Sistema 04: benzeno, mono-cloro-benzeno e orto-di-cloro-benzeno	113
<b>Capítulo V: CONCLUSÕES E SUGESTÕES</b>	116
<b>Capítulo VI: REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	119
<b>Anexo 01: Planilhas de dados termodinâmicos e operacionais para os sistemas     avaliados na otimização heurística</b>	123

## RESUMO

O processo de destilação em batelada é uma operação caracterizada pela sua extensa complexidade em relação ao seu modo de operação e à sua otimização, pois um determinado projeto serve para uma variedade de sistemas, ao contrário do processo de destilação contínua. Existem várias variáveis operacionais a serem avaliadas nos estudos de otimização para cada caso a ser processado, o que, devido ao caráter multi-propósito do processo, torna muito difícil a determinação de uma política operacional ótima global. Assim, o objetivo principal deste trabalho é a determinação de pontos comuns e sistemáticos aplicáveis para todos os sistemas no que tange à otimização deste processo.

Devido às características intrínsecas da destilação em batelada, a sua otimização deverá ser conduzida por uma operação que forneça a máxima quantidade possível de produtos dentro das especificações desejadas. Adicionalmente, a operação da coluna deverá ter um custo energético mínimo, um tempo de operação mínimo e uma alta produtividade. Os estudos apresentados em otimização na literatura são na sua maioria realizados parcialmente sobre estes aspectos e os dados numéricos relativos ao processo são bastante escassos, não permitindo uma visão sistemática sobre o assunto.

Nos estudos de otimização, foram avaliados os efeitos das diversas variáveis operacionais da destilação em batelada, que são: razão de refluxo, número de estágios de equilíbrio, "holdup" molar dos estágios, carga térmica fornecida ao retervedor, concentração inicial da mistura líquida a ser destilada, especificação de pureza desejada aos produtos e as dimensões da coluna (altura e diâmetro). A otimização foi conduzida objetivando obter um tempo operacional mínimo, com um custo energético mínimo, com produtividade elevada e com uma recuperação máxima de produtos nas especificações desejadas. Os resultados obtidos foram mostrados em forma tabular ou gráfica, dependendo da complexidade do entendimento dos dados.

Os resultados obtidos na metodologia de otimização proposta neste trabalho foram bastante satisfatórios e demonstraram que os objetivos propostos foram alcançados e, especialmente para alguns casos, a otimização gerou resultados bastante expressivos, sendo decisivo na operação econômica do processo.

Palavras-chave: Destilação em Batelada, Otimização, Política Operacional Ótima.

## *ABSTRACT*

The batch distillation process is an operation characterized by its extensive complexity relative to its operation way and its optimization, because a certain project can be used for a variety of systems, unlike the process of continuous distillation. Several operational variables exist to be appraised in the optimization studies for each processed case, which, due to the multi-purpose characteristic of the process, turns out to make very difficult the determination of a global optimal operational politics. Therefore, the main objective of this work is the determination of common and systematic points when the optimization of the process is to be considered.

Due to the intrinsic characteristics of the batch distillation, its optimization should be driven by an operation that supplies the maximum possible amount of products within the wanted specifications. Additionally, the operation of the column should have a minimum energy cost, a minimum time of operation and a high productivity. The studies presented in optimization in the literature are in their majority done partially on these aspects and the numerical data relative to the process are quite scarce, not allowing a global and systematic view on the subject.

In the optimization studies, the effects of the several distillation batch operating variables were evaluated, which are: reflux ratio, number of equilibrium stages, molar "holdup" of the plates, thermal load supplied to the reboiler, initial concentration of the liquid mixture to be distilled, specifications of purity wanted for the products and the dimensions of the column (height and diameter). The optimization should be conducted in a minimum operational time, with a minimum energy cost, with high productivity and with a maximum recovery of products in the specifications. The obtained results will be shown in tabular or graphical forms, depending on the complexity of the data.

The results obtained through the methodology of optimization proposed in this work are quite satisfactory and they have demonstrated that the intended objectives were thoroughly reached and, especially, for some cases the optimization generated quite expressive results, being decisive in the economical operation of the process.

Keywords: Batch Distillation, Optimization, Optimal Operational Politics.

# NOMENCLATURA

## SÍMBOLOS:

Simbologia	Definição	Dimensão
D	Vazão de destilado	[ L.h <sup>-1</sup> ]
G	Holdup volumétrico de líquido	[ L ]
H	Holdup molar de líquido	[ Kg-mol ]
ΔH	Variação de entalpia	[ J.kg-mol <sup>-1</sup> ]
HB	Holdup molar de líquido no refeedor	[ Kg-mol ]
HD	Holdup molar de líquido no condensador	[ Kg-mol ]
HN	Holdup molar de líquido no prato	[ Kg-mol ]
K	Constante de equilíbrio químico	
L	Vazão de líquido	[ L.h <sup>-1</sup> ]
m	Comprimento	[ m ]
M	Peso molecular	[ Kg-mol.mol <sup>-1</sup> ]
n	Número de estágios de equilíbrio na coluna	
NP , np	Número de pratos na coluna	
P	Pressão	[ Bar ]
Qc	Taxa de calor retirado do condensador	[ J.h <sup>-1</sup> ]
Qr , Qr1 , Qr2	Taxa de calor fornecida ao refeedor	[ J.h <sup>-1</sup> ]
R, R1 , R2 , RR	Razão de refluxo	
t	Tempo	[ h ]
T	Temperatura	[ °C ]
Tx , T1, T2	Taxa de calor fornecida ao refeedor	[ J.h <sup>-1</sup> ]
V	Vazão de vapor	[ L.h <sup>-1</sup> ]
x	Fração molar de líquido	
y	Fração molar de vapor	

## LETRAS GREGAS:

Simbologia	Definição	Dimensão
ρ	Densidade de líquido	[ kg.L <sup>-1</sup> ]
Σ	Somatório	

**SUB-ESCRITOS:**

<b>Simbologia</b>	<b>Definição</b>
n , j	Estágio de equilíbrio químico ( n=1 p/ refeedor ; n=2 p/ 1º prato ; .. ; n=np+2 p/ condensador)
B	Refeedor
f	Final
i	Componente da mistura líquida
L, l	Fase líquida
t	Total
V , v	Fase vapor

**SÍMBOLOS ESPECIAIS e ABREVIACÕES:**

<b>Simbologia</b>	<b>Definição</b>
atm	Atmosfera
<i>f</i>	Fugacidade
hs , h	Horas
J	Joule
m-	Prefixo -meta-
MCB	Mono-cloro-benzeno
o-	Prefixo -orto-
o-DCB / DCB	Orto-di-cloro-benzeno
UNIQUAC	UNIversal QUAsi Chemical
~	Aproximadamente
<	Menor que
>	Maior que

## LISTA DE FIGURAS

<i>Figuras:</i>	<i>Página</i>
Figura II.1 - Esquema ilustrativo da coluna de destilação em batelada e a ilustração de um estágio qualquer de equilíbrio.	05
Figura II.2 - Sistema ciclo-hexano e tolueno.	11
Figura II.3 - Sistema benzeno, MCB e o-DCB.	13
Figura II.4 - Sistema benzeno, MCB e o-DCB.	13
Figura III.1 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e tolueno.	21
Figura III.2 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e m-xileno.	22
Figura III.3 - Curva de equilíbrio para o sistema tolueno e m-xileno.	22
Figura III.4 - Curva de equilíbrio para o sistema $\alpha$ -pineno e canfeno.	23
Figura III.5 - Curva de equilíbrio para o sistema $\alpha$ -pineno e $\beta$ -pineno.	24
Figura III.6 - Curva de equilíbrio para o sistema canfeno e $\beta$ -pineno.	24
Figura III.7 - Curva de equilíbrio para o sistema acetaldeído e etanol.	25
Figura III.8 - Curva de equilíbrio para o sistema acetaldeído e água.	26
Figura III.9 - Curva de equilíbrio para o sistema etanol e água.	26
Figura III.10 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e mono-cloro-benzeno.	27
Figura III.11 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e orto-di-cloro-benzeno.	28
Figura III.12 - Curva de equilíbrio para o sistema mono-cloro-benzeno e orto-di-cloro-benzeno.	28
Figura IV.1 - Análise do tempo de operação para o Sistema 01.	34
Figura IV.2 - Análise do tempo de operação para o Sistema 01.	36
Figura IV.3 - Análise do tempo de operação para o Sistema 03.	37
Figura IV.4 - Análise do tempo de operação para o Sistema 03.	38
Figura IV.5 - Análise da produtividade para o Sistema 01.	44
Figura IV.6 - Análise da produtividade para o Sistema 01.	45
Figura IV.7 - Análise da produtividade para o Sistema 01.	45
Figura IV.8 - Análise da produtividade para o Sistema 01.	46
Figura IV.9 - Análise da produtividade para o Sistema 02.	47
Figura IV.10 - Análise da produtividade para o Sistema 02.	47

Figura IV.11 - Análise da produtividade para o Sistema 02.	48
Figura IV.12 - Análise da produtividade para o Sistema 02.	48
Figura IV.13 - Análise da produtividade para o Sistema 03.	49
Figura IV.14 - Análise da produtividade para o Sistema 03.	49
Figura IV.15 - Análise da produtividade para o Sistema 03.	50
Figura IV.16 - Análise da produtividade para o Sistema 03.	50
Figura IV.17 - Análise da produtividade para o Sistema 04.	51
Figura IV.18 - Análise da produtividade para o Sistema 04.	51
Figura IV.19 - Análise da produtividade para o Sistema 04.	52
Figura IV.20 - Análise da produtividade para o Sistema 04.	52
Figura IV.21 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 01.	54
Figura IV.22 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 01.	55
Figura IV.23 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 02.	55
Figura IV.24 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 02.	56
Figura IV.25 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 03.	56
Figura IV.26 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 03.	57
Figura IV.27 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 04.	57
Figura IV.28 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 04.	58
Figura IV.29 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.	59
Figura IV.30 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.	60
Figura IV.31 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.	60
Figura IV.32 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.	61
Figura IV.33 - Análise do tempo de operação no Sistema 02.	62
Figura IV.34 - Análise do tempo de operação no Sistema 02.	62
Figura IV.35 - Análise do tempo de operação no Sistema 01.	63
Figura IV.36 - Análise do tempo de operação no Sistema 01.	63
Figura IV.37 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.	64
Figura IV.38 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.	64
Figura IV.39 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.	65
Figura IV.40 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.	65
Figura IV.41 - Análise da produtividade no Sistema 01.	67
Figura IV.42 - Análise da produtividade no Sistema 02.	67
Figura IV.43 - Análise da produtividade no Sistema 03.	68

Figura IV.44 - Análise da produtividade no Sistema 04.	69
Figura IV.45 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 02.	70
Figura IV.46 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 04.	70
Figura IV.47 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 01.	71
Figura IV.48 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 02.	71
Figura IV.49 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 03.	72
Figura IV.50 - Análise do tempo de operação no Sistema 01.	73
Figura IV.51 - Análise do tempo de operação no Sistema 02.	74
Figura IV.52 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.	75
Figura IV.53 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.	76
Figura IV.54 - Análise da variação percentual entre a taxa de calor fornecida ao refervedor e a variação percentual no tempo de operação da coluna.	77
Figura IV.55 - Análise da produtividade no Sistema 01.	78
Figura IV.56 - Análise da produtividade no Sistema 02.	79
Figura IV.57 - Análise da produtividade no Sistema 03.	79
Figura IV.58 - Análise da produtividade no Sistema 04.	80
Figura IV.59 - Análise da variação percentual entre a taxa de calor fornecida ao refervedor e a variação na produtividade da coluna.	80
Figura IV.60 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 01.	81
Figura IV.61 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 02.	82
Figura IV.62 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 03.	82
Figura IV.63 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 04.	83
Figura IV.64 - Análise da variação percentual entre a taxa de calor fornecida ao refervedor e a quantidade de produto recuperado na operação da coluna.	84
Figura IV.65 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 01.	87
Figura IV.66 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 02.	88
Figura IV.67 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 03.	89
Figura IV.68 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 04.	90
Figura IV.69 - Análise da variação na produtividade no Sistema 01.	91
Figura IV.70 - Análise da variação na produtividade no Sistema 02.	92
Figura IV.71 - Análise da variação na produtividade no Sistema 03.	93
Figura IV.72 - Análise da variação na produtividade no Sistema 04.	94

Figura IV.73 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 01.	97
Figura IV.74 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 02.	98
Figura IV.75 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 03.	98
Figura IV.76 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 04.	99
Figura IV.77 - Análise da variação na produtividade no Sistema 01.	100
Figura IV.78 - Análise da variação na produtividade no Sistema 02.	100
Figura IV.79 - Análise da variação na produtividade no Sistema 03.	101
Figura IV.80 - Análise da variação na produtividade no Sistema 04.	101

## LISTA DE TABELAS

<i><b>Tabelas:</b></i>	<i><b>Página</b></i>
Tabela II.1 - Situações simuladas para o sistema ciclo-hexano e tolueno.	10
Tabela II.2 - Variações relativas entre os dados apresentados na literatura e os dados obtidos nas simulações do sistema ciclo-hexano e tolueno.	11
Tabela II.3 - Dados operacionais da simulação para o sistema benzeno, MCB e o-DCB.	12
Tabela II.4 - Variações relativas entre os dados apresentados na literatura e os dados obtidos nas simulações do sistema benzeno, MCB e DCB.	14
Tabela II.5 - Relação de alguns estudos em otimização existentes na literatura.	16
Tabela IV.1 - Limites dos valores para as variáveis otimizadoras.	33
Tabela IV.2 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.	35
Tabela IV.3 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.	36
Tabela IV.4 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.	37
Tabela IV.5 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.	38
Tabela IV.6 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna para o Sistema 01.	39
Tabela IV.7 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna para o Sistema 02.	40
Tabela IV.8 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna para o Sistema 03.	41
Tabela IV.9 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação no número de pratos da coluna para o Sistema 04.	42
Tabela IV.10 – Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.50.	73

Tabela IV.11 – Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.51.	74
Tabela IV.12 – Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.52.	75
Tabela IV.13- Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.53.	76
Tabela IV.14 - Análise das variações percentuais observadas na porcentagem de Recuperação dos produtos nos sistemas avaliados.	83
Tabela IV.15 - Análise da variação média geral observada quando a taxa de calor é reduzida em 20%.	85
Tabela IV.16 - Análise da variação média geral observada quando a taxa de calor é reduzida em 40%.	85
Tabela IV.17 - Dados operacionais para o Sistema 01.	87
Tabela IV.18 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 01.	87
Tabela IV.19 - Dados operacionais para o Sistema 02.	88
Tabela IV.20 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 02.	88
Tabela IV.21 - Dados operacionais para o Sistema 03.	89
Tabela IV.22 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 03.	89
Tabela IV.23 - Dados operacionais para o Sistema 04.	90
Tabela IV.24 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 04.	90
Tabela IV.25 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 01.	91
Tabela IV.26 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 02.	92
Tabela IV.27 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 03.	93
Tabela IV.28 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 04.	94
Tabela IV.29 - Análise da variação percentual da quantidade de produto recuperado no processo quando o “holdup” líquido do prato sofre uma variação.	95
Tabela IV.30 - Análise da variação percentual da quantidade de calor total fornecido ao refervedor quando o “holdup” de líquido do prato da coluna sofre uma variação.	96
Tabela IV.31 - Análise da variação percentual da quantidade de produto recuperado quando o “holdup” de líquido do condensador da coluna sofre uma variação.	102

Tabela IV.32 - Análise da variação percentual da quantidade de calor total fornecido ao refeedor quando o “holdup” de líquido do condensador da coluna sofre uma variação.	103
Tabela IV.33 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.	104
Tabela IV.34 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.	104
Tabela IV.35 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.	105
Tabela IV.36 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.	105
Tabela IV.37 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 01.	107
Tabela IV.38 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 01.	108
Tabela IV.39 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 01.	108
Tabela IV.40 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 01.	108
Tabela IV.41 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 01.	109
Tabela IV.42 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 02.	109
Tabela IV.43 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 02.	110
Tabela IV.44 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 02.	110
Tabela IV.45 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 02.	110
Tabela IV.46 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 02.	110
Tabela IV.47 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 03.	111
Tabela IV.48 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 03.	111
Tabela IV.49 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 03.	112
Tabela IV.50 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 03.	112
Tabela IV.51 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 03.	112
Tabela IV.52 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 04.	113
Tabela IV.53 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 04.	113
Tabela IV.54 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 04.	113

Tabela IV.55 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 04.	114
Tabela IV.56 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 04.	114

## **INTRODUÇÃO E OBJETIVOS**

O objetivo geral deste trabalho de dissertação é a verificação da flexibilidade operacional da coluna de destilação multicomponente em batelada através do estudo de quatro tipos diferentes de sistemas de misturas líquidas ternárias, englobando desde sistemas considerados ideais até sistemas altamente não-ideais. Além disso, pretende-se desenvolver uma metodologia de otimização heurística para a determinação da política operacional ótima do processo.

Os objetivos específicos a serem avaliados incluem a minimização do tempo operacional e da quantidade de calor fornecido ao processo durante a operação e, adicionalmente, a maximização da taxa de produtividade e da quantidade de produtos recuperados dentro das especificações desejadas, ou seja, com o grau de pureza desejado para cada fração do destilado.

A coluna de destilação em batelada é um processo de separação de misturas líquidas bastante antigo, tendo sido bastante utilizado até meados da década de 40, quando, então, foi substituído pelo processo contínuo. Este fato foi justificado pela alta demanda do mercado consumidor, que exigia uma produção em grandes quantidades e em tempo cada vez menor, o que não é característica dos processos em batelada.

Nas últimas décadas têm-se observado que este processo está sendo novamente empregado nas indústrias químicas, principalmente nas indústrias de química fina. Devido à competitividade e à exigência do mundo moderno, aliados a objetivos estratégicos, a reutilização deste processo torna-se indispensável para as indústrias que buscam a posição de liderança no mercado. Somados a estes fatos, as exigências ambientais de não poluição do meio ambiente torna este processo indispensável no tratamento de resíduos industriais.

---

Atualmente, este processo está sendo bastante utilizado em processos biotecnológicos e em processos que envolvem a remoção de resíduos líquidos poluentes. Além disto, possibilita a redução de perdas de reagentes e produtos ocasionados por outros processos. Em geral, sua utilização está associada a processos que envolvem produtos de alto valor agregado, como é o caso da química fina, e que exige um teor elevado de pureza.

Este trabalho foi elaborado sobre seis capítulos visando fundamentalmente fornecer uma melhor compreensão de todos os aspectos envolvidos no entendimento do processo e na sua otimização heurística. Além disso, foi apresentado também uma grande variedade de informações quantitativas. Este procedimento é necessário uma vez que o processo de otimização é bastante complexo e envolverá quatro variáveis a serem otimizadas.

Neste primeiro capítulo foi descrito uma breve introdução das necessidades atuais de utilização da coluna de destilação em batelada e apresentado os objetivos a serem alcançados com a otimização deste processo.

No segundo capítulo é feita uma breve descrição do processo onde são mostradas as equações que constituem a modelagem do processo e a sua verificação bem como os caminhos a serem seguidos na otimização.

No terceiro capítulo é avaliada a flexibilidade operacional da coluna através de misturas líquidas ternárias com propriedades termodinâmicas distintas, pois este processo tem como principal característica a separação de mistura líquidas com propriedades físico-químicas distintas, ou seja, é um processo de caráter multi-propósito.

No quarto capítulo é avaliada a influência das variáveis na otimização da coluna de destilação em batelada e serão apresentados os resultados obtidos na otimização heurística de vários casos-estudos.

No quinto capítulo são mostradas as conclusões e sugestões deste trabalho.

No sexto capítulo, as referências bibliográficas utilizadas neste trabalho estão descritas.

O programa computacional utilizado neste trabalho para o estudo da flexibilidade operacional e otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada foi desenvolvido no Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS) da Faculdade de Engenharia Química (FEQ) da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) na dissertação de mestrado de Luz Jr. (1993), sendo o mesmo um dos melhores “softwares” disponíveis na literatura publicada.

## **DESTILAÇÃO EM BATELADA**

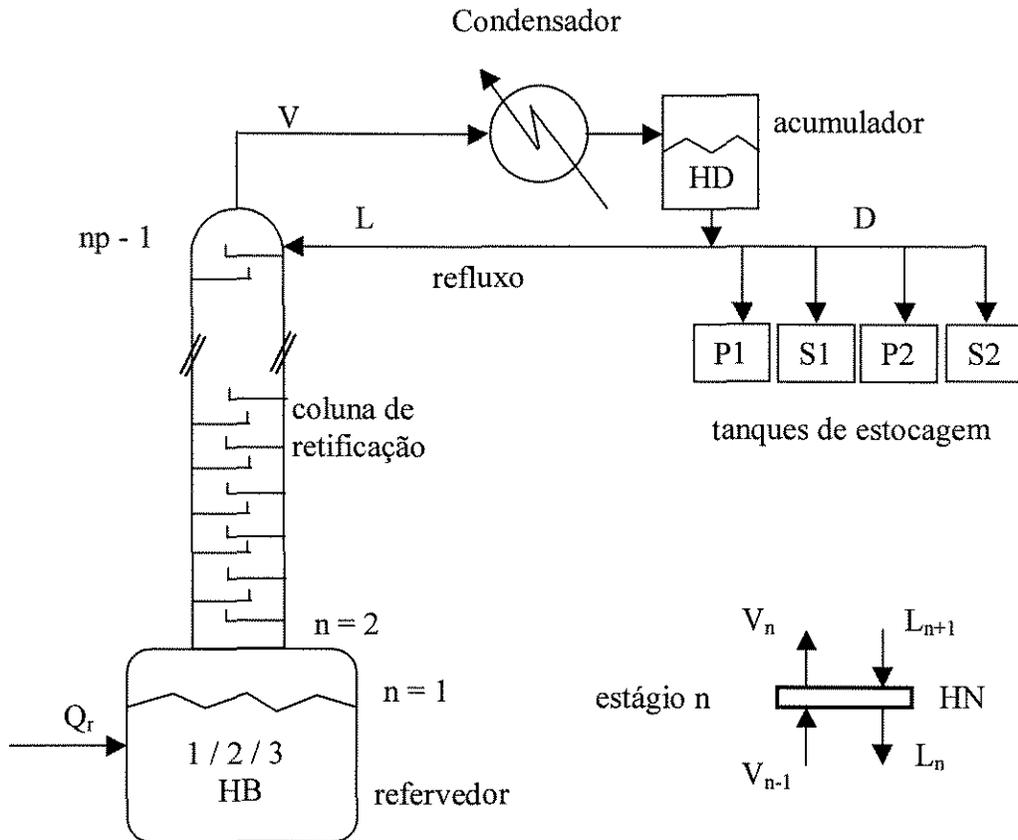
### ***ABORDAGEM SOBRE OTIMIZAÇÃO***

A coluna de destilação em batelada é um processo utilizado para a separação de misturas líquidas. Seu princípio de funcionamento está baseado na diferença de volatilidade entre os diversos componentes contidos na mistura líquida e tem como agente de separação somente a energia, no caso da destilação convencional ou, energia e massa combinados, no caso das destilações extrativa e azeotrópica.

#### **II.1 - DESCRIÇÃO DO PROCESSO**

Este processo em batelada é inerentemente de natureza transiente, ou seja, estado não-estacionário (Luybem, 1989). O comportamento dinâmico é causado pelo esgotamento de material do refeedor, uma vez que, ao contrário da destilação contínua, a quantidade inicial da mistura líquida não é continuamente alimentada no refeedor.

Para o melhor entendimento do processo um esquema do equipamento é mostrado a seguir na Figura II.1.



**Figura II.1 - Esquema ilustrativo da coluna de destilação em batelada e a ilustração de um estágio qualquer de equilíbrio.**

O equipamento é fundamentalmente constituído por três partes distintas:

- ↳ O recipiente de armazenagem, localizado na base do equipamento, por onde a mistura líquida é alimentada. Também conhecido por “reboiler” ou reboiler;
- ↳ A coluna de pratos, que possibilitará a transferência de massa e energia entre as fases líquida e vapor e, conseqüentemente, o enriquecimento de ambas as fases em determinados componentes;
- ↳ Um condensador-acumulador que possibilitará a retirada das frações de líquido destilado.

A operação da coluna de destilação em batelada consiste inicialmente em colocar uma mistura líquida a ser destilada no refeedor. O restante do equipamento, ou seja, os pratos e o condensador-acumulador, estão vazios. No início da operação, há o fornecimento de calor ao processo através do refeedor. Assim, a mistura é aquecida até a temperatura do ponto de bolha, quando, então, o líquido da mistura inicia a evaporação. No decorrer do tempo, observa-se a formação de acúmulos de líquidos nos pratos (HN) e no condensador-acumulador (HD). Estes acúmulos de líquidos são conhecidos por “holdup”. Nesta fase de partida da operação nenhum produto destilado é retirado no topo. Isto implica que o processo opera com um refluxo total do líquido no topo. O início da operação propriamente dito é dado quando o processo atinge o estado estacionário, ou seja, quando a composição nos estágios de equilíbrio não se altera numa breve variação de tempo.

Quando é verificado o estado estacionário, a retirada de produtos (“main-cut”), representado na Figura II.1 por P1 e P2, somente inicia-se quando a composição instantânea de destilado no condensador-acumulador é a especificada. O processo evolui até que a composição média seja inferior à especificada. Neste ponto, inicia-se a retirada do corte fora de especificação (“off-cut”), representado na Figura II.1 por S1 e S2, até que a composição instantânea do próximo líquido da mistura seja verificado, quando então, é retirado o segundo produto na especificação desejada. Assim, sucessivamente, a operação da coluna é conduzida até que todos os líquidos da mistura inicial estejam separados nas especificações desejadas.

A razão de refluxo (RR) é definida como sendo a razão entre as correntes de refluxo (L) e de destilado (D), ou seja,  $RR = L / D$ .

## **II.2 - MODELAGEM DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA**

A modelagem da coluna de destilação em batelada foi efetuada com base nas equações fenomenológicas de balanços macroscópicos transientes de massa e energia (Diwekar e Madhavan, 1991), considerando-se os acúmulos de líquido nos estágios da coluna e as relações termodinâmicas do equilíbrio líquido-vapor (Luz Jr., 1991).

O modelo matemático empregado considera as seguintes hipóteses (são as mais comuns verificadas na literatura):

- Pratos adiabáticos;
- Hidráulica desprezível;
- Mistura perfeita nos estágios;
- “Holdup” do vapor desprezível;
- “Holdup” molar do líquido constante nos estágios, e;
- Condensador total (sem sub-resfriamento).

Para a identificação dos estágios de equilíbrio modelados (ver Figura II.1) considera-se a numeração de cada um deles a contar de baixo para cima; portanto, o refeedor será o primeiro estágio e o condensador-acumulador será o último estágio. O número total de estágios na coluna será dado pelo número total de pratos mais os estágios do refeedor e do condensador-acumulador.

Foi desenvolvida uma modelagem para o processo da coluna de destilação multicomponente em batelada no Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS) por Luz Jr. (1993), como descrita abaixo.

### Modelagem para o refeedor

Balanco de massa global

$$\frac{d(HB)}{dt} = L_2 - V_1$$

Balanco de massa por componente

$$\frac{d(x_{1,i})}{dt} = [L_2 \cdot (x_{2,i} - x_{1,i}) - V_1 \cdot (K_{1,i} \cdot x_{1,i} - x_{1,i})] / HB$$

Balanco de energia

$$\frac{d(H_{LB})}{dt} = (Q_R - V_1 \cdot (H_{V1} - H_{L1}) + L_2 \cdot (H_{L2} - H_{L1})) / HB$$

## Modelagem para os pratos

Balanço de massa global

$$0 = V_{n-1} + L_{n+1} - V_n - L_n$$

Balanço de massa por componente

$$\frac{d(x_{n,i})}{dt} = [V_{n-1} \cdot (K_{n-1,i} \cdot x_{n-1,i} - x_{n,i}) + L_{n+1} (x_{n+1,i} - x_{n,i}) - V_n \cdot x_{n,i} \cdot (K_{n,i} - 1)] / HN$$

Balanço de energia

$$\frac{d(H_{L_n})}{dt} = [V_{n-1} (H_{V_{n-1}} - H_{L_n}) + L_{n+1} (H_{L_{n+1}} - H_{L_n}) - V_n (H_{V_n} - H_{L_n})] / HN$$

## Modelagem para o condensador total

Balanço de massa global

$$0 = V_{np-1} - L_{np} - D$$

Balanço de massa por componente

$$\frac{d(x_{np,i})}{dt} = \frac{V_{np-1}}{HD} \times [K_{np-1,i} \cdot x_{np-1,i} - x_{np,i}]$$

Balanço de energia

$$\frac{d(H_{L_{np}})}{dt} = (V_{np-1} \cdot (H_{V_{np-1}} - H_{L_{np}}) - Q_C) / HB$$

## Modelagem para o “Holdup” molar

$$H_j = G_j \cdot \rho_j / (M_{L,j} \cdot x_{j,i})$$

## Modelagem das propriedades termodinâmica

Constante de equilíbrio

$$K_{j,i} = K_{j,i} (y_{j,i}, x_{j,i}, T_j, P_j)$$

Entalpia da fase líquida

$$H_{L,j} = H_{L,j} (x_{j,i}, T_j, P_j)$$

Entalpia da fase vapor

$$H_{V,j} = H_{V,j} (y_{j,i}, T_j, P_j)$$

Densidade da mistura

$$\rho_j = \rho_j (T_j, P_j, x_{j,i})$$

## Modelagem para as restrições de equilíbrio de fases

Relação entre as frações de líquido e vapor

$$y_{j,i} = K_{j,i} \cdot x_{j,i}$$

## Modelagem para as equações constitutivas

Somatório das frações

$$\sum_i x_{j,i} = \sum_i y_{j,i} = \sum_i K_{j,i} \cdot x_{j,i} = 1$$

A modelagem relativa à hidráulica do processo foi desprezada. Entretanto, considerou-se uma queda de pressão linear ao longo da coluna, pois são especificados os valores para a pressão no fundo da coluna (refervedor) e de topo da coluna (condensador-acumulador).

## II.3 - VERIFICAÇÃO DA MODELAGEM UTILIZADA

Pretende-se aqui verificar a convergência, a confiabilidade e a precisão dos dados obtidos nas simulações através da modelagem utilizada. A partir desta verificação, os estudos de otimização serão efetuados.

Os estudos de simulação e verificação da modelagem matemática abordada foram realizados sobre duas misturas líquidas com propriedades físico-químicas distintas, apresentadas a seguir.

- **CASO 01:** Ciclo-hexano e tolueno (Domenech e Enjalbert, 1974).
- **CASO 02:** Benzeno, mono-cloro-benzeno (MCB) e o-di-cloro-benzeno (o-DCB ou DCB) (Perry e Green, 1984);

Os dados apresentados na literatura para os Casos 01 e 02, os quais foram gerados por simulação computacional, estão apresentados nas Figuras II.2 a II.4.

Além das diferenças nas propriedades termodinâmicas dos componentes das misturas, a composição da alimentação é variável. Esta característica é interessante, pois, deseja-se avaliar a flexibilidade de operação do processo, ou seja, o seu caráter multi-propósito.

Os parâmetros termodinâmicos utilizados nas simulações dos Casos 01 e 02 neste trabalho foram extraídos do livro Reid et. al. (1987) e do simulador comercial de processos “Hysim”.

### **CASO 01: MISTURA CICLO-HEXANO E TOLUENO**

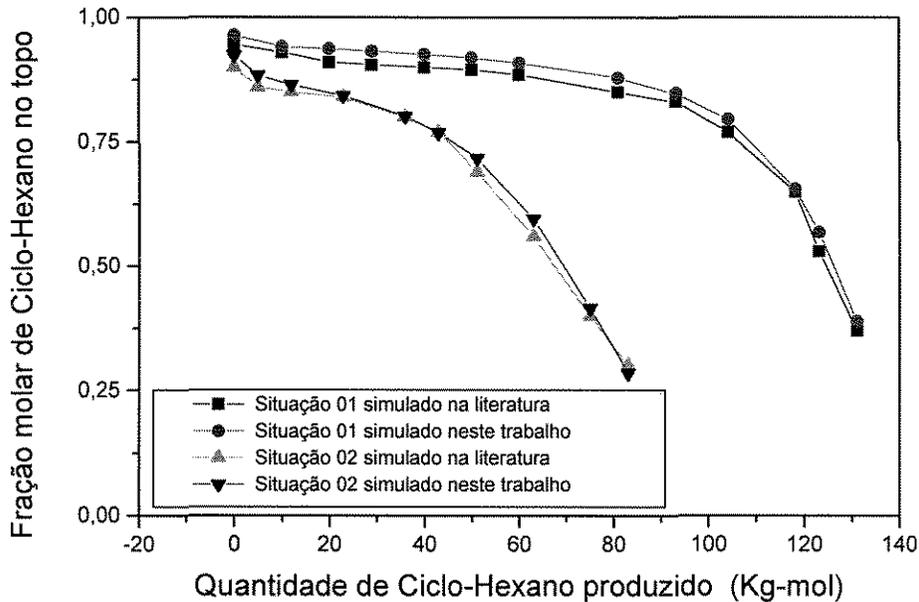
Nas simulações foram consideradas a fase vapor como sendo ideal, devido à baixa pressão de operação (~1 atm), e a fase líquida foi modelada através do modelo de coeficiente de atividade UNIQUAC.

Os resultados são verificados comparando-se a quantidade de destilado no condensador e a fração molar de ciclo-hexano. Foram simuladas duas situações, como ilustrado na Tabela II.1.

**Tabela II.1 - Situações simuladas para o sistema ciclo-hexano e tolueno.**

Variáveis de processo	Situação 01	Situação 02
Concentração inicial do ciclo-hexano (%)	55,0	30,0
Razão de refluxo	04	05
Número de estágios de equilíbrio	04	
“Holdup” líquido molar do condensador (kg-mol)	2,5	
“Holdup” líquido molar do prato (kg-mol)	2,5	
Carga térmica (J/h)	10800000,0	

Os dados obtidos com as simulações das situações 01 e 02 neste trabalho e os dados apresentados na literatura são mostrados na Figura II.2.



**Figura II.2 - Sistema ciclo-hexano e tolueno.**

Na Tabela II.2, são apresentados os valores para as variações relativas entre os dados simulados na literatura e os dados simulados neste trabalho que foram mostrados na Figura II.2.

**Tabela II.2 - Variações relativas entre os dados apresentados na literatura e os dados obtidos nas simulações do sistema ciclo-hexano e tolueno.**

Quantidade em avaliação	Situação 01			Situação 02		
	Mínimo	Máximo	Médio	Mínimo	Máximo	Médio
Variação relativa (%)	0,92	7,36	3,05	0,13	6,43	1,72

Portanto, na Figura II.2, verifica-se que a modelagem utilizada apresentou resultados que estão bastante próximos aos resultados apresentados na literatura, fato este quantificado na Tabela II.2. Nas duas situações estudadas, a variação relativa máxima foi de 7,36%, enquanto que, a máxima variação relativa média foi de 3,05%. Estas variações relativas permitem concluir que a modelagem e a metodologia utilizadas são boas e que poderão ser empregadas nos estudos de otimização.

## CASO 02: MISTURA BENZENO, MONO-CLORO-BENZENO E O-DI-CLORO-BENZENO

Para a simulação deste processo, as fases líquida e vapor foram consideradas ideais.

Os resultados são avaliados comparando-se os perfis das frações molares instantâneas dos vários componentes da mistura líquida em cada estágio de equilíbrio ao longo da coluna quando o processo atinge o início da primeira retirada de destilado (início do primeiro “main-cut”), e quando a retirada do primeiro destilado termina (término do primeiro “main-cut”). As frações de destilado que estão conforme as especificações são denominadas de “main-cut”, caso contrário, “off-cut”. A especificação de pureza desejada para as frações de destilado é de 95%. Assim, quando a fração molar instantânea de benzeno no condensador-acumulador atingir 95%, teremos para cada estágio de equilíbrio as composições instantâneas dos componentes da mistura líquida mostradas na Figura II.3, e quando a fração molar acumulada de benzeno no condensador-acumulador for inferior a 95%, teremos as composições instantâneas de cada estágio mostradas na Figura II.4.

Os dados operacionais utilizados para a simulação desta mistura são mostrados na Tabela II.3.

**Tabela II.3 - Dados operacionais da simulação para o sistema benzeno, MCB e o-DCB.**

Variáveis de processo	Valores atribuídos
Concentração molar inicial (%)	25 / 50 / 25
Número estágios equilíbrio	12
Pressão de topo (atm)	1,0
Pressão de fundo (atm)	1,2
“Holdup” líquido do prato (l)	5,6
“Holdup” líquido do condensador (l)	0,56
Carga inicial alimentada (kg-mol)	45,4

Os dados obtidos com a simulação deste caso neste trabalho e os apresentados na simulação computacional na literatura são mostrados nas Figuras II.3 e II.4.

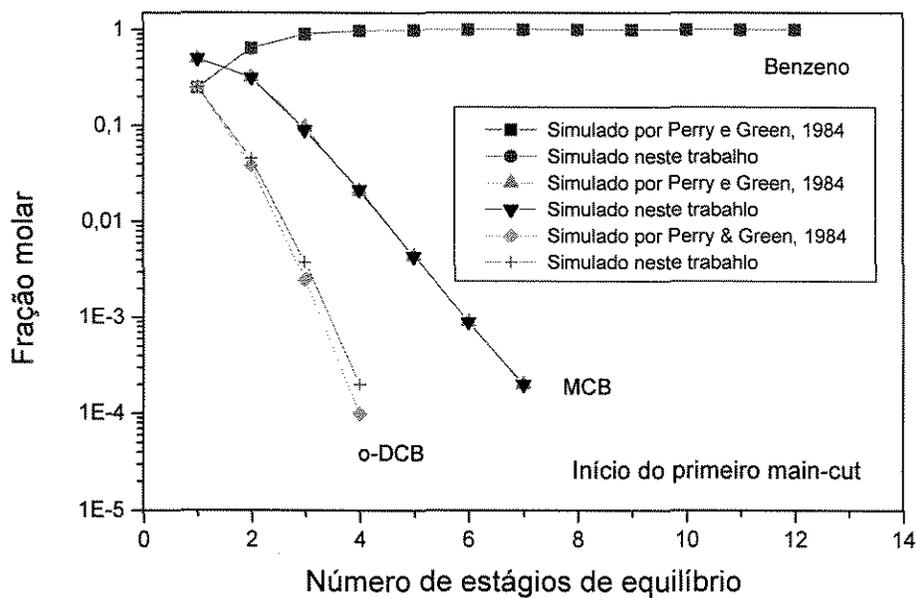


Figura II.3 - Sistema benzeno, MCB e o-DCB.

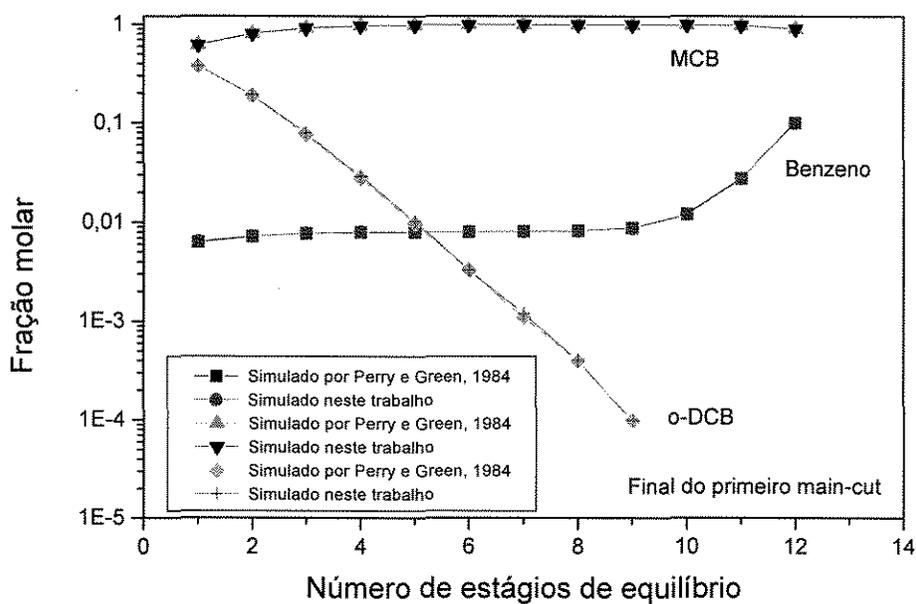


Figura II.4 - Sistema benzeno, MCB e o-DCB.

Na Tabela II.4, são mostrados os valores para as variações relativas entre os dados da literatura e os simulados mostrados nas Figuras II.3 e II.4.

**Tabela II.4 - Variações relativas entre os dados apresentados na literatura e os dados obtidos nas simulações do sistema benzeno, MCB e DCB.**

Quantidade em avaliação	Componente Analisado	Início do 1º “main-cut”			Término do 1º “main-cut”		
		Máximo	Mínimo	Médio	Máximo	Mínimo	Médio
Variação Relativa (%)	benzeno	0,72	0,0	0,09	1,59	0,0	0,11
	MCB	6,01	0,0	0,23	0,30	0,0	0,06
	DCB	17,7	0,16	1,47	9,09	0,0	1,92

Obs.: No início do 1º “main-cut” a variação máxima calculada para o DCB foi de 100%, entretanto, o valor da fração molar é menor que 1.0E-4. Portanto, a variação máxima é devido à arredondamento.

Portanto, nas Figuras II.3 e II.4, verifica-se que a modelagem utilizada novamente apresentou resultados que estão bastante próximos aos resultados apresentados na literatura, fato este quantificado na Tabela II.4. Na simulação estudada, a variação relativa máxima foi de 17,7%, enquanto que a máxima variação relativa média foi de 1,92%. Assim, outra vez, as variações relativas permitem concluir que a modelagem utilizada é satisfatória e que poderá ser empregada nos estudos de otimização.

Na análise geral dos casos 01 e 02 estudados para a verificação da modelagem utilizada, pode-se concluir que os resultados deste trabalho e os apresentados na literatura apresentam uma concordância satisfatória, sendo que a máxima variação relativa média obtida foi de 3,05% para a Situação 01 do caso 01 (Tabela II.2). Portanto, a modelagem utilizada poderá ser empregada nos estudos de otimização e, ainda, pode-se verificar que as hipóteses adotadas na modelagem são razoáveis.

## II.4 - OTIMIZAÇÃO DA COLUNA DE DESTILAÇÃO EM BATELADA

Para os estudos de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada uma boa explicação foi dada por Farhat et. al. (1991), que mencionou que existem quatro casos possíveis de otimização para o processo em estudo:

### CASO (A) - MÁXIMO DESTILADO

O problema de máximo destilado é a maximização da quantidade de produtos recuperados dentro das especificações requeridas e num determinado tempo final de operação da coluna.

---

### **CASO (B) - MÍNIMO TEMPO**

O problema de tempo mínimo é a minimização do tempo final de operação da coluna para produzir uma certa quantidade de produtos dentro das especificações requeridas.

### **CASO (C) - MÁXIMO LUCRO ou MÍNIMO CUSTO**

O problema de máximo lucro ou mínimo custo está baseado na maximização ou minimização de alguns critérios econômicos.

### **CASO (D) - MÁXIMO DESTILADO e MÍNIMO TEMPO**

Existe o caso da combinação de máximo destilado e mínimo tempo. Este problema consiste na maximização da quantidade de produtos recuperados com as especificações requeridas num tempo mínimo de operação.

O propósito de otimização que será estudado neste trabalho é mais complexo ainda, pois abordará simultaneamente todos os casos anteriormente mencionados acoplados ao fator produtividade. A produtividade é definida como sendo o somatório das quantidades de cada fração de destilado (“main-cut”) produzido dentro das especificações desejadas numa determinada operação dividido pelo tempo total de operação. Portanto, o objetivo em otimização será o de conduzir a operação da coluna de destilação em batelada por um caminho que forneça a máxima quantidade de produtos recuperados dentro das especificações desejadas, num tempo mínimo de operação, com uma alta produtividade e um custo operacional mínimo.

As variáveis manipuladas, denominadas de variáveis otimizadoras, que serão estudadas na otimização são:

- ♦ Razão de refluxo;
- ♦ Número de estágios de equilíbrio;
- ♦ “Holdup’s” dos pratos e do condensador-acumulador;
- ♦ Taxa de carga térmica que é fornecida ao refeedor;
- ♦ Dimensões da coluna (altura e diâmetro).

As variáveis resultantes, denominadas de variáveis otimizadas, que serão observadas para efeito de otimização são:

- ♦ Tempo de operação;
- ♦ Quantidade total de calor fornecido ao refulvedor durante a operação;
- ♦ Quantidade de destilado obtido;
- ♦ Produtividade da operação.

Na Tabela II.5, observa-se que os estudos de otimização apresentados na literatura geralmente concentram-se sobre apenas uma variável a ser otimizada. Este fato é justificado pelo caráter multi-propósito e flexibilidade operacional do processo que, naturalmente, torna difícil o estabelecimento de características comuns a várias políticas ótimas de operação para todos os tipos de misturas líquidas a serem destiladas.

**Tabela II.5 - Relação de alguns estudos em otimização existentes na literatura.**

Nome(s) do(s) Autor(es)	VARIÁVEL AVALIADA NA OTIMIZAÇÃO		
	Mínimo tempo	Máximo destilado	Mínimo custo
Logsdon e Biegler, 1993		XXXXXXXXXXXX	
Farhat et. al., 1991		XXXXXXXXXXXX	
Diwekar e Madhavan, parte b, 1991	XXXXXXXXXXXX	XXXXXXXXXXXX	XXXXXXXXXXXX
Logsdon et. al., 1990			XXXXXXXXXXXX
Diwekar et. al., 1987		XXXXXXXXXXXX	
Christensen e Jorgensen, 1987	XXXXXXXXXXXX		
Hansen e Jorgensen, 1986	XXXXXXXXXXXX		
Murty et. al., 1980		XXXXXXXXXXXX	
Egly et. al., 1979	XXXXXXXXXXXX		
Kerkhof e Vissers, 1978			XXXXXXXXXXXX
Mayur e Jackson, 1971	XXXXXXXXXXXX		
Luyben, 1971	XXXXXXXXXXXX		

Nesta tabela pode-se observar que somente um trabalho, Diwekar e Madhavan (parte b, 1991), preocupou-se com uma análise mais complexa, envolvendo todas as variáveis que podem ser otimizadas. Outro trabalho que merece destaque é Kerkhof e Vissers (1978) que utilizou como parâmetros para minimização do custo as variáveis de custo dos produtos, as quantidades de destilados produzidos e o tempo de operação, mas não necessariamente os casos de máximo destilado e mínimo tempo de operação. O trabalho de Logsdon et. al. (1990) é similar ao de Kerkhof e Vissers (1978), porém acrescido da otimização da estrutura física

(altura e diâmetro do equipamento) da coluna de destilação e da quantidade de calor fornecido ao refeedor. O ponto comum nestes três trabalhos é que todos utilizaram a minimização dos custos operacionais do processo.

Este trabalho de dissertação pode ser comparado a uma combinação destes três trabalhos destacados anteriormente, excetuando-se a otimização da estrutura física do equipamento, pois através da quantidade de estágios de equilíbrio pode-se ter uma idéia das dimensões da coluna. Portanto, o objetivo deste trabalho foi a minimização dos custos operacionais (maximização do lucro) através da otimização simultânea do tempo do processo (ponto de mínimo), da quantidade total de produtos recuperados nas especificações desejadas (ponto de máximo), da quantidade total de calor fornecido ao refeedor (ponto de mínimo) e da produtividade do processo (ponto de máximo). Desta forma, combinando-se os estudos de flexibilidade operacional e de otimização, ter-se-á uma importante contribuição à literatura.

## **FLEXIBILIDADE OPERACIONAL DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM BATELADA**

A coluna de destilação em batelada é um processo que deverá apresentar um caráter multi-propósito, sendo flexível para a operação de destilação de qualquer mistura líquida que se deseja separar em seus componentes puros, ou seja, dentro das especificações de pureza desejada (Maciel e Luz Jr., 1995). Mas, dependendo da caracterização termodinâmica do sistema, mesmo a coluna sendo altamente flexível, ela poderá não servir. Isto porque, além do agente de separação energético, que faz parte da configuração deste processo, há necessidade de um outro agente de separação: o mássico. Este último nada mais significa do que a presença de um componente extra ao sistema original, um solvente, para promover a separação.

Um dos fatores que dificultam a separação de componentes é a presença de azeótropos e/ou volatilidade relativa baixa entre os componentes a serem separados. Estes fatores são, eminentemente, termodinâmicos. Poderá haver outros como a diluição da mistura de alimentação, tamanho de coluna e das condições operacionais. De qualquer maneira, antes de proceder com a simulação de uma dada coluna, ou mesmo de projetá-la, o primeiro procedimento a ser adotado é a caracterização do sistema a ser trabalhado. Esta caracterização deve seguir os seguintes pontos, considerando-se aplicação à destilação em batelada:

- ♦ Estado de agregação da alimentação;
- ♦ Composição da alimentação;
- ♦ Condição térmica da alimentação;
- ♦ Volatilidade relativa;
- ♦ Existência de azeótropos;

- ♦ Existência de miscibilidade parcial;
- ♦ Presença de agentes tóxicos.

Somente após analisados todos estes pontos, é que se pode proceder com as atividades de simulação e otimização do processo em batelada.

O princípio de separação dos componentes da mistura através da destilação em batelada é a diferença de volatilidade. Por definição, a volatilidade relativa de sistemas binários depende das composições dos componentes nas fases líquida e vapor, além da temperatura e da pressão. A representação deste princípio é dada através das curvas de equilíbrio líquido-vapor (ELV), denominada de linha de equilíbrio, dos vários pares de componentes na mistura líquida. Assim, na construção destas curvas são considerados apenas dois a dois componentes por vez, sendo os demais assumidos como ausentes na mistura. Através da curva de ELV é que se verifica a presença ou não de azeótropos e de miscibilidade parcial. Assim, antes de prosseguir nos estudos, serão calculadas e analisadas as curvas de ELV para todos os pares presentes na mistura. Também, através destas curvas é possível verificar o grau de separabilidade ou não dos componentes da mistura líquida e, ainda, o grau de dificuldade na sua separação, através da distância entre a linha de equilíbrio e a linha da diagonal. A avaliação de sistemas binários refletirá o comportamento do sistema multicomponente.

Para se avaliar o processo nestes termos, foram estudados quatro misturas líquidas ternárias com propriedades físico-químicas distintas:

- ♦ Sistema 01: benzeno, tolueno e m-xileno;
- ♦ Sistema 02:  $\alpha$ -pineno, canfeno e  $\beta$ -pineno;
- ♦ Sistema 03: acetaldeído, etanol e água;
- ♦ Sistema 04: benzeno, mono-cloro-benzeno e o-di-cloro-benzeno.

### III.1 - CARACTERÍSTICAS DOS SISTEMAS AVALIADOS

As curvas de ELV mostram a relação entre as composições das fases líquida e vapor, numa dada pressão, para um dado componente do sistema binário em estudo. Em geral, é graficada a linha de equilíbrio do componente mais volátil. No cálculo termodinâmico destas linhas de equilíbrio, por definição, a condição utilizada para obtenção dos dados é a igualdade entre as fugacidades de cada componente nas fases líquida e vapor, ou seja:

$$f_{v,i} = f_{l,i}$$

Onde:  $f_{v,i} = f_{v,i}(T, P, y_i)$  e  $f_{l,i} = f_{l,i}(T, P, x_i)$  com  $i = 1, \dots, NC$

Assim, para uma pressão fixa e para cada composição de mistura líquida existirá uma temperatura, denominada de temperatura do ponto de bolha, que conduzirá à formação da primeira quantidade de vapor que, conseqüentemente, possibilita a determinação da fração de vapor.

Nas Figuras III.1 a III.12, que se seguem, as informações que poderão ser extraídas pela análise da curva de ELV são:

- ♦ O grau de dificuldade na separação é dado pelo afastamento entre a linha de equilíbrio (linha com pontos) e a linha de diagonal (tracejada);
- ♦ A miscibilidade parcial é dada pela presença de patamar na curva de equilíbrio;
- ♦ A presença de azeótropo pela intersecção entre as mesmas.

Os sistemas avaliados apresentam componentes de diferentes funções químicas, ou seja, funções orgânicas dos mais variados tipos, como por exemplo, aromáticos, alcanos e álcoois. Este fato é interessante para a avaliação do caráter multi-propósito do processo.

Os parâmetros termodinâmicos utilizados nos estudos dos Sistemas 01 a 04 foram extraídos do livro Reid et. al. (1987) e do simulador comercial de processos “Hysim”. No anexo 01, os arquivos de leitura contém todos os dados termodinâmicos utilizados nos estudos deste trabalho.

A seguir são calculadas e analisadas as curvas de ELV para os quatro sistemas envolvidos. Através do comportamento da linha de equilíbrio em cada caso, os sistemas serão caracterizados.

### III.1.1 - SISTEMA 01: BENZENO, TOLUENO E M-XILENO

O comportamento do equilíbrio de fases deste sistema em pressões baixas (~1 atm) pode ser considerado ideal, portanto, os coeficientes de atividade e de fugacidade poderiam ser iguais a 1 (um). Entretanto, a fase líquida foi modelada rigorosamente pelo modelo de coeficiente de atividade UNIQUAC. Estas considerações foram utilizadas na construção das curvas de equilíbrio mostradas nas Figuras III.1 a III.3.

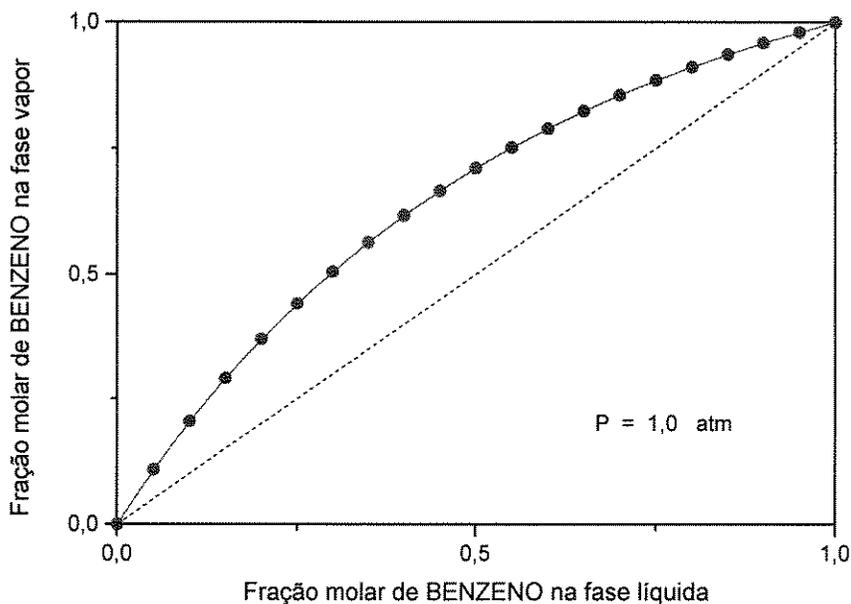


Figura III.1 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e tolueno.

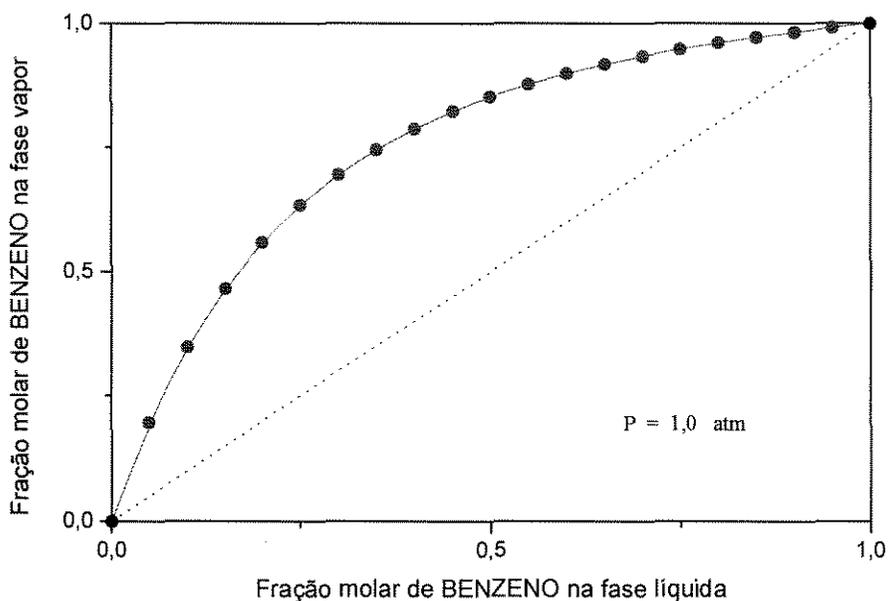


Figura III.2 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e m-xileno.

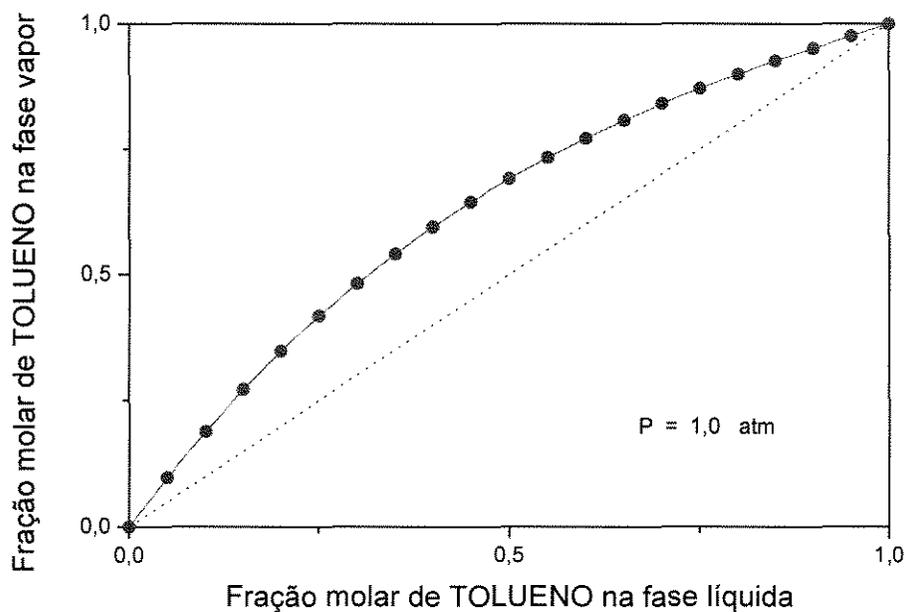


Figura III.3 - Curva de equilíbrio para o sistema tolueno e m-xileno.

Na avaliação das Figuras III.1 a III.3 conclui-se que os três sistemas binários analisados não apresentam azeótropos e nem problemas de miscibilidade parcial. Nota-se que o sistema binário benzeno e m-xileno é o que apresenta maior volatilidade relativa, enquanto que o sistema tolueno e m-xileno menor volatilidade. Este fato confere ao sistemas ternário uma característica de fraca não-idealidade. Assim sendo, dependendo do comportamento e do grau de pureza desejado pode-se conseguir uma boa separação.

### III.1.2 - SISTEMA 02: $\alpha$ -PINENO, CANFENO, $\beta$ -PINENO

O comportamento deste sistema em pressões baixas ( $\sim 1$  atm) não pode ser considerado ideal. A fase líquida foi modelada rigorosamente pelo modelo de coeficiente de atividade UNIQUAC, enquanto que a fase vapor foi modelada idealmente. Estas considerações foram utilizadas na construção das curvas de ELV mostradas nas Figuras III.4 a III.6.

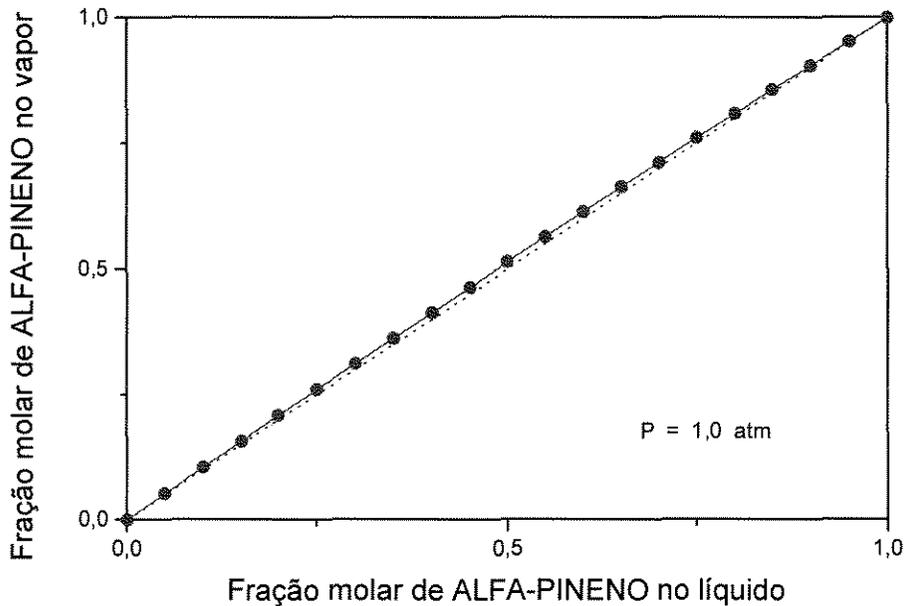


Figura III.4 - Curva de equilíbrio para o sistema  $\alpha$ -pineno e canfeno.

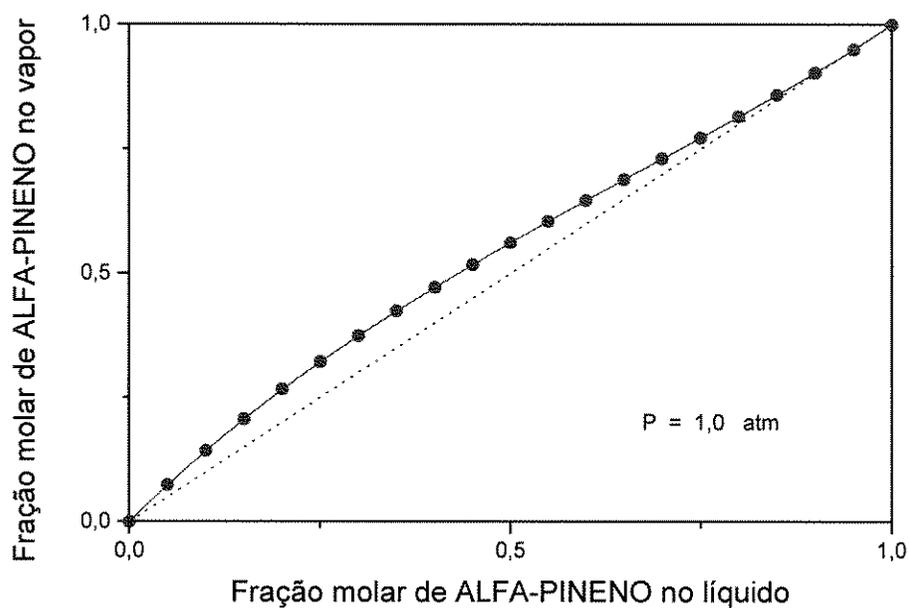


Figura III.5 - Curva de equilíbrio para o sistema  $\alpha$ -pineno e  $\beta$ -pineno.

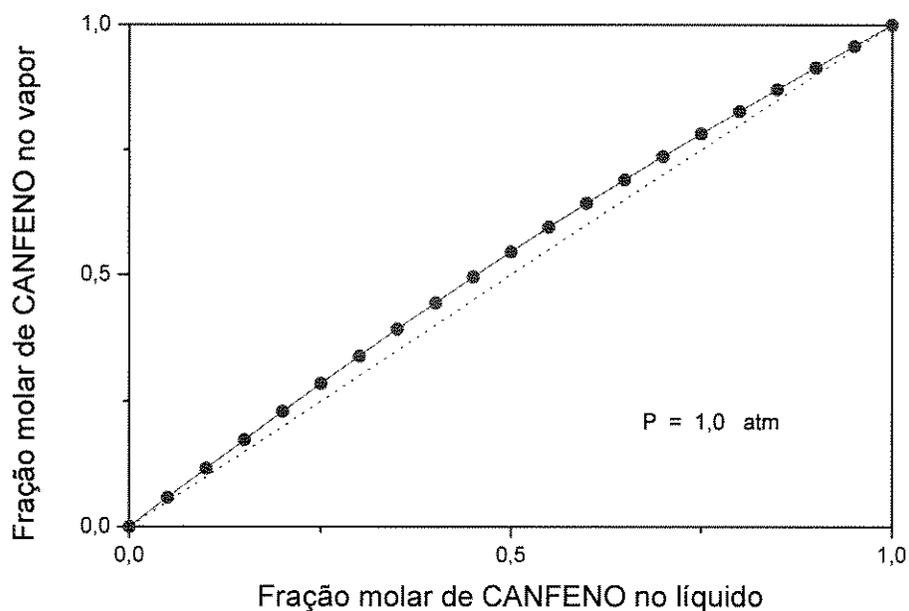


Figura III.6 - Curva de equilíbrio para o sistema canfeno e  $\beta$ -pineno.

Na avaliação das Figuras III.4 a III.6 conclui-se que através do processo de destilação convencional a separação dos componentes desta mistura líquida apresenta sérios problemas devido à baixa volatilidade relativa e à existência de um ponto de azeotropia

mostrado na Figura III.5. A existência do ponto azeotrópico impossibilita a destilação convencional de obter frações de destilado, “main-cut”, com pureza superior à indicada neste ponto. Estes fatores deverão ser considerados nos estudos de flexibilidade e de otimização. Na avaliação desta mistura, conclui-se que a operação através de destilação convencional não é recomendada. As dificuldades apresentadas por este sistema afetará os estudos de simulação e otimização, portanto, é interesse deste trabalho mostrar as dimensões destas dificuldades. Assim, faz-se necessário identificar os casos onde a destilação convencional poderá ser utilizada e, então, efetuar os estudos de simulação e de otimização.

### III.1.3 - SISTEMA 03: ACETALDEÍDO, ETANOL E ÁGUA

O comportamento deste sistema, dois a dois, é como o ilustrado nas Figuras III.7 a III.9. Enquanto que os sistemas que apresentam acetaldeído são altamente ideais, o sistema etanol-água apresenta ponto azeotrópico à pressão de 1 atm.

Na construção das curvas de ELV, a fase líquida foi modelada através do coeficiente de atividade UNIQUAC e a fase vapor foi assumida ideal.

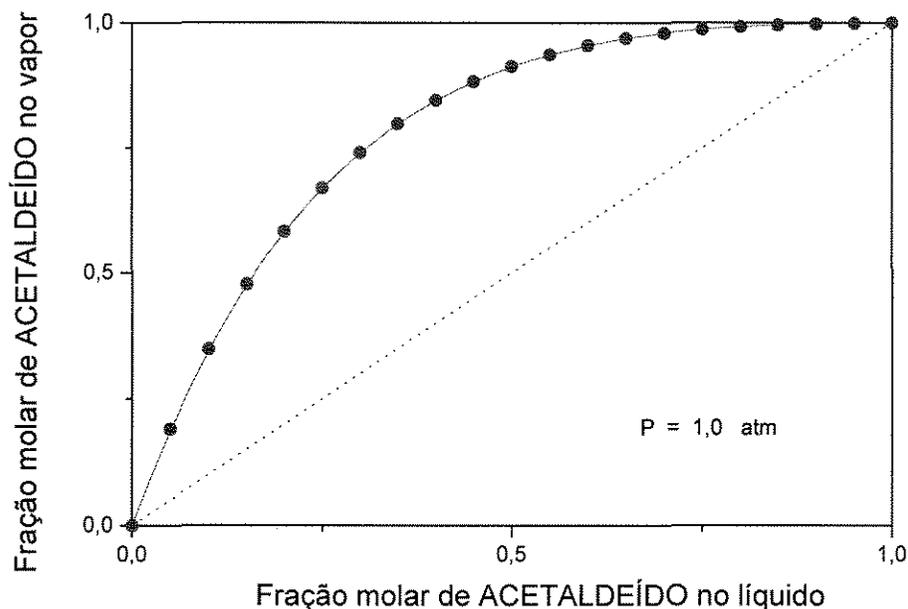


Figura III.7 - Curva de equilíbrio para o sistema acetaldeído e etanol.

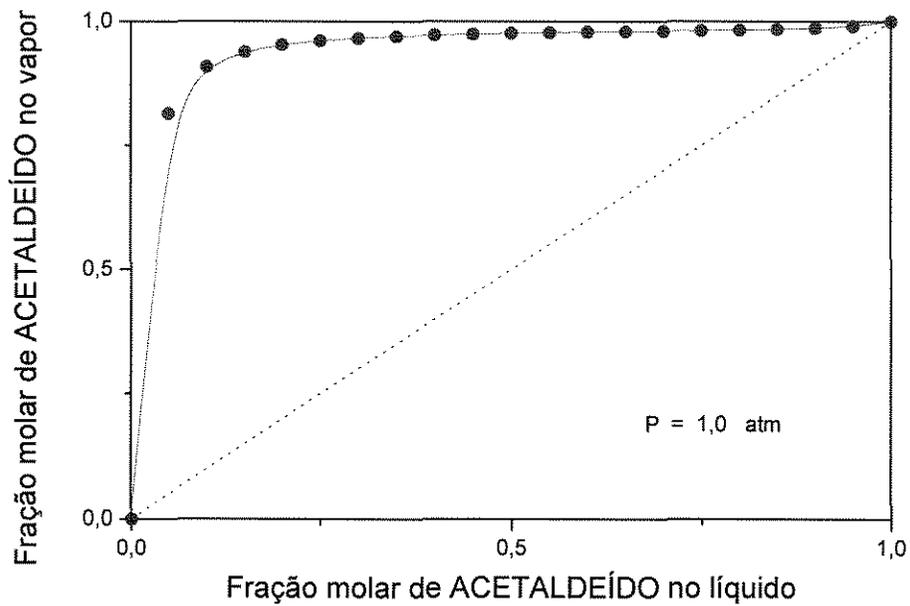


Figura III.8 - Curva de equilíbrio para o sistema acetaldeído e água.

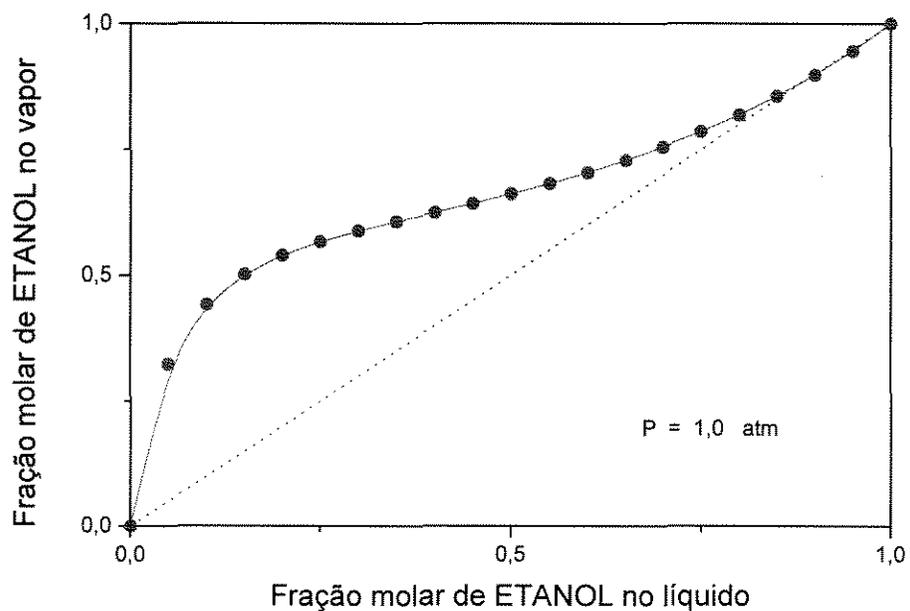


Figura III.9 - Curva de equilíbrio para o sistema etanol e água.

Na avaliação das Figuras III.7 a III.9 conclui-se que há uma dificuldade de separação neste sistema devido à existência do ponto de azeotropia mostrado na Figura III.9. Esta afirmação, no entanto, não é definitiva, pois depende do objetivo da separação. Assim

sendo, por se tratar de uma destilação convencional, poderemos não obter todos os produtos com elevada pureza.

### III.1.4 - SISTEMA 04: BENZENO, MONO-CLORO-BENZENO E O-DI-CLORO-BENZENO

O comportamento deste sistema em pressões baixas ( $\sim 1$  atm) pode ser considerado ideal. A fase vapor foi considerada ideal e a fase líquida foi modelada através do coeficiente de atividade UNIQUAC. Estas considerações foram utilizadas nas Figuras III.10 a III.12.

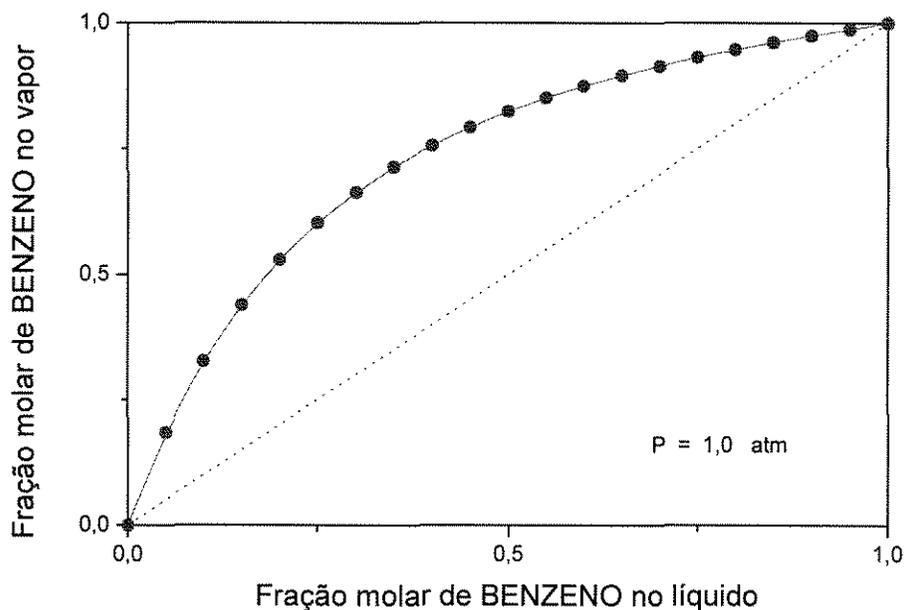


Figura III.10 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e MCB.

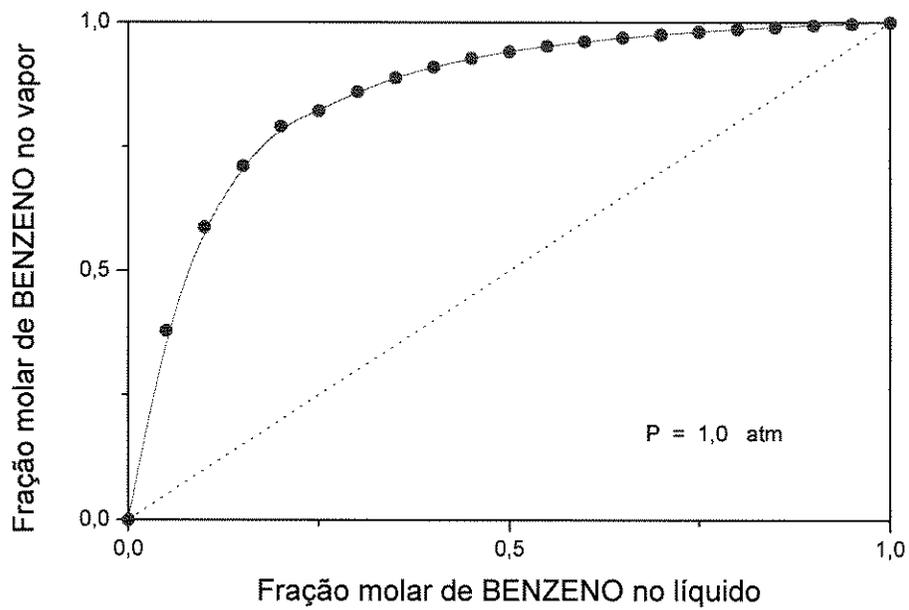


Figura III.11 - Curva de equilíbrio para o sistema benzeno e o-DCB.

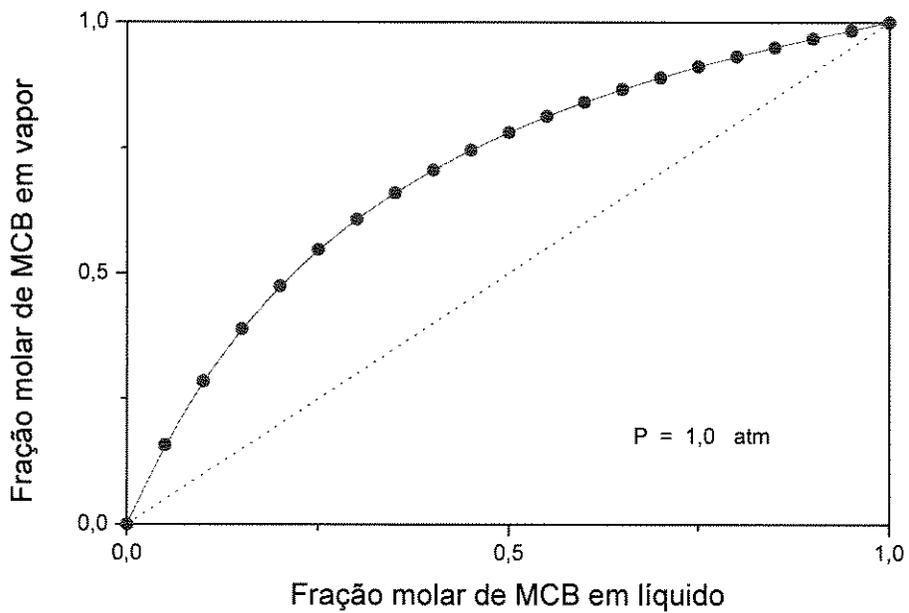


Figura III.12 - Curva de equilíbrio para o sistema MCB e o-DCB.

Na avaliação das Figuras III.10 a III.12 conclui-se que, à princípio, através do processo de destilação convencional é possível separar os componentes desta mistura líquida

devido à alta volatilidade relativa entre os componentes. Esta afirmação, no entanto, não é definitiva, pois a composição de alimentação exerce forte influência na separabilidade.

Uma vez conhecidas as volatilidades relativas entre os componentes, trabalhando com diferentes misturas líquidas de alimentação e, tendo sido avaliados os pontos de azeotropia, pode-se proceder com a simulação e otimização do processo de destilação em batelada. Convém salientar que os interesses deste projeto são relativos aos estudos de simulação e otimização do processo de destilação convencional, ou seja, não serão estudados os casos de destilação extrativa e de destilação azeotrópica.

# **OTIMIZAÇÃO HEURÍSTICA DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM BATELADA**

Este capítulo constitui-se em duas partes distintas. Na primeira parte, tópico IV.1, serão avaliadas as influências das variáveis otimizadoras sobre as variáveis otimizadas. Entende-se por variável otimizadora aquela variável operacional diretamente manipulável que conduzirá ao resultado esperado, e por variável otimizada aquela variável que está sendo monitorada e cujo valor numérico é desejado num ponto de mínimo ou de máximo. Na segunda parte, tópico IV.2, serão mostrados os resultados obtidos com a otimização dos casos estudados.

As planilhas de valores dos dados físico-químicos e dos dados operacionais da coluna de destilação em batelada para os quatro sistemas avaliados encontram-se no anexo 01. O significado de cada dado exposto no anexo 01 encontra-se discriminado neste mesmo anexo. No decorrer dos estudos, caso especificado algum dado operacional no texto, na figura ou em tabela, este será usado ao invés do valor especificado no anexo 01, ou seja, os dados utilizados nas simulações e nas otimizações estão todos expostos no anexo 01, e o valor explicitamente indicado no texto substituirá o valor mostrado no anexo 01.

## **IV.1 - ANÁLISE DAS VARIÁVEIS OTIMIZADORAS**

Nos tópicos IV.1.1 a IV.1.6, para cada variável otimizadora, são representados os perfis de comportamento das variáveis otimizadas. Conforme já mencionado no tópico II.4, as variáveis otimizadoras são: a razão de refluxo, o número de estágios de equilíbrio, o “holdup” de líquido no prato, o “holdup” de líquido no condensador e a quantidade de calor

---

fornecido ao refeedor. As variáveis otimizadas são: o tempo operacional, a produtividade, a quantidade total de destilado recuperado e a quantidade total de calor fornecido ao refeedor.

Para o melhor entendimento do texto será enfatizado o significado de cada variável otimizada e de cada variável otimizadora. As variáveis otimizadoras são:

RAZÃO DE REFLUXO é a variável otimizadora que relaciona a razão entre a corrente de líquido que retorna para a coluna e a corrente de líquido que deixa a coluna.

NÚMERO DE PRATOS NA COLUNA é a variável otimizadora que, adicionado ao refeedor e ao condensador, indicam a quantidade de estágios de equilíbrio presentes na coluna de destilação.

“HOLDUP” DO PRATO é a variável otimizadora que indica a quantidade de líquido presente em cada prato da coluna. Esta variável depende da geometria do prato e de condições operacionais, e será estudada no sentido de proporcionar uma quantificação de sua influência.

“HOLDUP” DO CONDENSADOR é a variável otimizadora que indica a quantidade de líquido presente no condensador da coluna.

QUANTIDADE DE CALOR FORNECIDO AO REFEEDOR é a variável otimizadora que indica a taxa com que a energia é fornecida em cada intervalo de tempo ao refeedor da coluna.

As variáveis otimizadas são:

TEMPO OPERACIONAL é a variável otimizada que indicará o tempo necessário para concluir uma operação da coluna, ou seja, para uma dada mistura líquida, é o tempo que o processo gasta para separar todos os constituintes da mistura inicial nas especificações desejadas.

PRODUTIVIDADE é a variável otimizada que indicará a quantidade de destilado que foi produzido por unidade de tempo durante a operação da coluna, ou seja, é a razão entre a quantidade total de destilado produzido dentro das especificações dividido pelo tempo total gasto na operação da coluna.

QUANTIDADE TOTAL DE CALOR FORNECIDO AO REFERVEDOR é a variável otimizada que indica a quantidade de calor total que foi fornecido ao refervedor para processar a separação dos diversos componentes da mistura dentro das especificações desejadas. Esta variável é diretamente proporcional ao tempo de operação do processo.

QUANTIDADE DE DESTILADO RECUPERADO é a variável otimizada que quantifica a fração total da mistura líquida inicial que foi recuperada, ou seja, é a razão entre a quantidade total de destilado recuperado dentro das especificações pela quantidade da mistura líquida inicial.

Antes de prosseguir, é interessante explicitar as equações para os cálculos da quantidade total de calor fornecido ao refervedor e da produtividade do processo. Portanto:

♦ A quantidade total de calor ( $Q_{rT}$ ) fornecido ao refervedor durante uma determinada operação de destilação é diretamente proporcional à variável de tempo ( $t$ ), ou seja, é igual ao valor do tempo final ( $t$ ) de operação multiplicado pela taxa com que o calor ( $Q_r$ ) é fornecido ao refervedor, ou seja:

$$Q_{rT} = t * Q_r$$

♦ A produtividade da operação ( $Prod$ ) é dado pela seguinte relação:

$$Prod = QS / t$$

onde  $QS$  é a quantidade total de produtos recuperados dentro das especificações desejadas (“main-cut”) por unidade de tempo da operação, ou seja, é o

somatório das quantidades de cada “main-cut” dividido pelo tempo total da operação do processo.

Devido à necessidade de flexibilidade operacional desta coluna, as variáveis otimizadoras mencionadas no tópico II.4 são avaliadas sistematicamente num amplo intervalo de valores. Na Tabela IV.1 estão apresentados os limites inferiores e superiores e, ainda, os valores intermediários utilizados para cada variável otimizadora nos estudos de otimização da coluna de destilação.

**Tabela IV.1 - Limites dos valores para as variáveis otimizadoras.**

Variável em análise	Valores assumidos para as variável otimizadoras
Razão de refluxo	01 / 02 / 04 / 06 / 08 / 10 / 12 / 15 / 20 / 30 / 40 / 50 / 60 / 80 / 100 / 150
Número de pratos na coluna	15 / 20 / 25 / 30
Taxa de calor fornecida ao reboiler (J/h)	-80% / -50% / -25% / 1350494000,0 / +25% / +100%
Especificações de pureza (%)	70 / 75 / 80 / 85 / 90 / 95 / 99 / 99,9 / 99,99
Concentrações molares iniciais (%)	05 / 35 / 60
	60 / 05 / 35
	35 / 60 / 05
	10 / 75 / 15
	15 / 10 / 75
	75 / 15 / 10
	20 / 50 / 30
33 / 33 / 34	

O “valor-base” (1350494000,0 [J/h]) explicitado na Tabela IV.1 para a taxa de calor fornecida ao reboiler é, aproximadamente, a taxa necessária para fazer com que 1,0E+5 kg-mol da mistura líquida a ser destilada possa atingir o ponto de bolha. Este valor foi estimado para a mistura líquida formada pelo sistema ternário benzeno, tolueno e m-xileno, e a quantidade de 1,0E+5 kg-mol de mistura a ser destilada foi utilizada em todas as simulações deste trabalho (Luz Jr., 1993). As porcentagens indicam as variações do “valor-base”.

A avaliação de parâmetros físicos da coluna, tais como o diâmetro e a altura, não serão avaliados nos estudos aqui apresentados, pois indiretamente o número de estágios e as vazões de líquido e vapor representam estas características.

## IV.1.1 - POLÍTICA DE OTIMIZAÇÃO VIA RAZÃO DE REFLUXO

A variável otimizadora em análise é a razão de refluxo (RR) de topo da coluna, ou seja, a razão entre a quantidade da corrente de líquido (L) de retorna para a coluna e a quantidade da corrente de líquido (D) que sai da coluna.

### IV.1.1.1 - ANÁLISE DO TEMPO DE OPERAÇÃO DO PROCESSO

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via razão de refluxo, o tempo de operação é diretamente proporcional à razão de refluxo, e obedece uma relação praticamente linear conforme constatado neste trabalho através das Figuras IV.1 a IV.4. Por esta razão, nos trabalhos apresentados na literatura de otimização de colunas de destilação em batelada via razão de refluxo, muitos autores, entre estes Converse e Gross (1963), Diwekar et. al. (1987) e Logsdon e Biegler (1993), assumem uma relação linear na variação da razão de refluxo para a obtenção da política operacional ótima.

As especificações de pureza de todas as frações de destilado (“main-cut”) recuperadas estão discriminadas nas figuras, e as taxas  $Qr1$  e  $Qr2$  são variações relativas arbitrárias do valor base apresentado na Tabela IV.1.

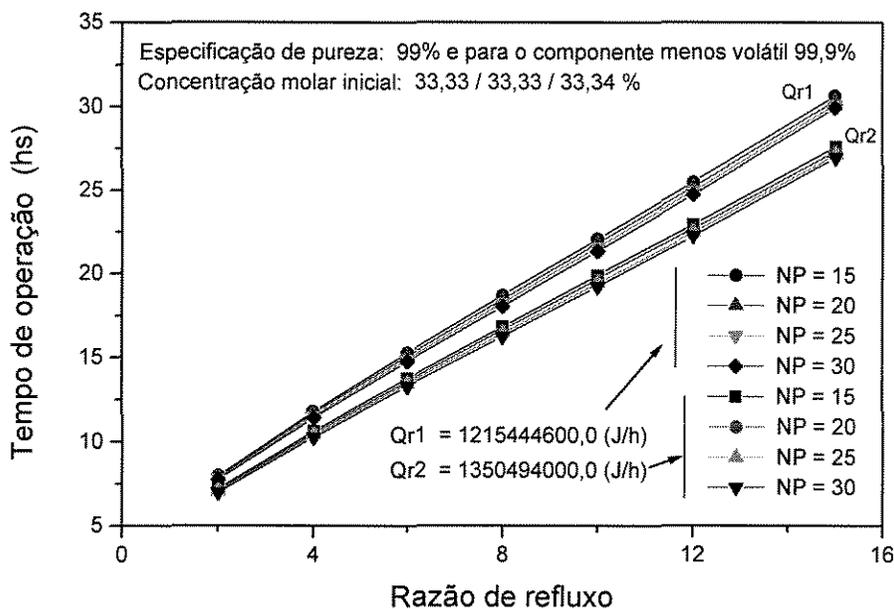


Figura IV.1 - Análise do tempo de operação para o Sistema 01.

Os dados graficados na Figura IV.1 mostraram uma pequena variação relativa no tempo de operação do processo quando adotado números diferentes de pratos (NP) na coluna, conforme a Tabela IV.2. De qualquer maneira é mínima a variação, mesmo considerando-se uma diferença grande no número de estágios. Já podemos concluir aqui que para este sistema e para sistemas similares, o número de estágios não interfere significativamente no desempenho do processo com relação ao tempo final de operação. Conforme observa-se a seguir nas Figuras IV.2 a IV.4 e nas Tabelas IV.2 a IV.9, tal conclusão também é válida para os demais sistemas em avaliação.

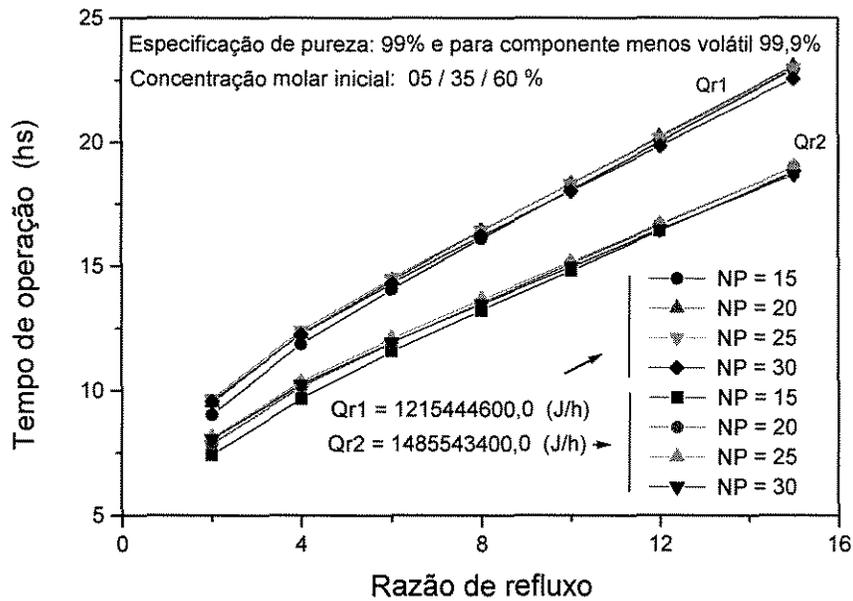
Para o cálculo dos valores percentuais explicitados nas Tabelas IV.2 a IV.9 seguem-se os passos: i) determinar para cada simulação o tempo final ( $t_f$ ) da operação com NP igual à 15, 20, 25 e 30 e, ii) com o maior e o menor tempo final observados em cada simulação calcula-se o desvio relativo entre estes valores. Portanto, os valores percentuais indicados nas Tabelas IV.2 a IV.9 são variações relativas entre o menor e o maior tempo final de operação obtido para uma dada simulação, ou seja:

$$\text{Variação Relativa} = (t_f^{\text{maior}} - t_f^{\text{menor}}) / t_f^{\text{menor}} * 100\%$$

**Tabela IV.2 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.**

Taxa de calor fornecida ao refeedor (J/h)	Variação mínima	Variação máxima	Variação média
1215444600,0	2,41 %	3,60 %	3,17 %
1350494000,0	2,41 %	3,57 %	3,22 %

Na política de otimização estudada nos tópicos IV.1.1 a IV.1.3, a quantidade total de calor fornecido ao reboiler é uma variável diretamente proporcional ao tempo de operação do processo. Assim, não foi apresentada nenhuma figura para esta quantidade total de calor, pois pode-se obtê-la através do produto entre a taxa de calor fornecida ao refeedor e o tempo de operação do processo. Portanto, nas figuras que apresentam o tempo de operação do processo deve-se multiplicar os valores do tempo pelo valor da taxa de calor para obter a figura representativa da quantidade total de calor empregado durante o processo da destilação em batelada.



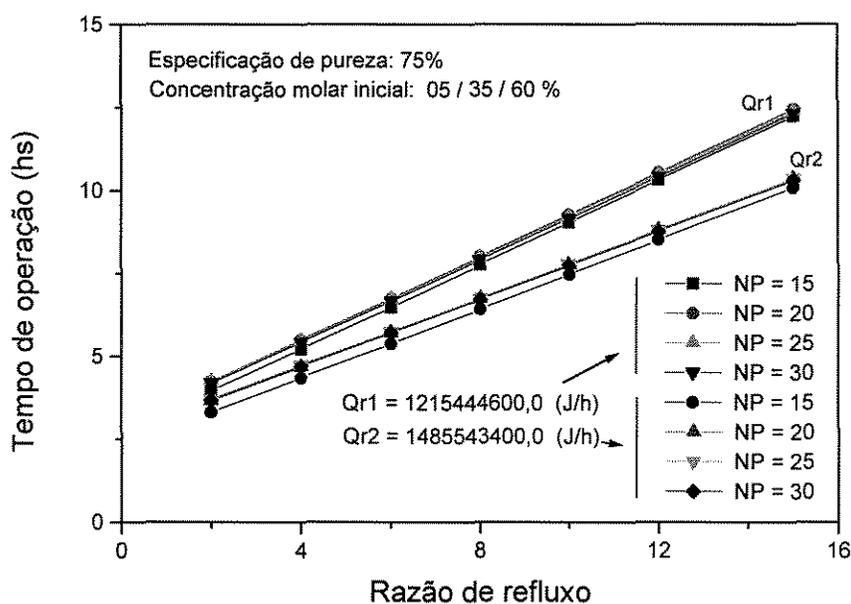
**Figura IV.2 - Análise do tempo de operação para o Sistema 01.**

Os dados graficados na Figura IV.2 mostraram também uma pequena variação percentual no tempo de operação do processo quando adotado número diferente de pratos na coluna, conforme a Tabela IV.3. Este caso ainda considerou o Sistema 01 mas com composição de alimentação diferente do anterior. Em particular, neste caso, foi considerada a situação em que tem-se um dos componentes em alta diluição.

**Tabela IV.3 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.**

Taxa de calor fornecida ao refeedor (J/h)	Varição mínima	Varição máxima	Varição média
1215444600,0	1,66 %	6,96 %	3,20 %
1485543400,0	1,60 %	9,29 %	4,27 %

Na análise das Figuras IV.1 e IV.2, para um mesmo Qr podemos verificar a influência da concentração inicial da mistura no tempo de operação do processo. A variação percentual média varia muito pouco, 0,07 pontos percentuais, entretanto, a faixa entre as variações mínimas e máximas observadas são mais acentuadas, respectivamente, 1,19 e 7,69 pontos percentuais.

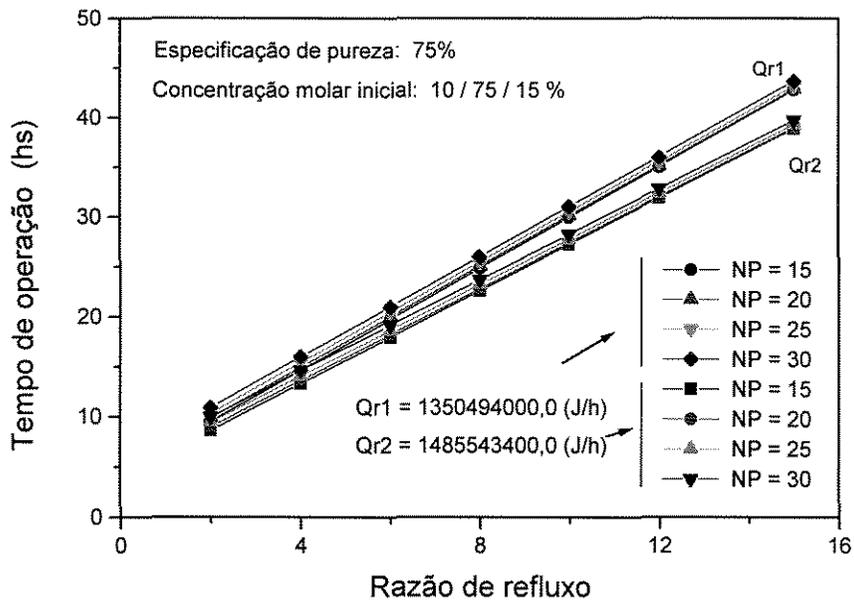


**Figura IV.3 - Análise do tempo de operação para o Sistema 03.**

Os dados graficados na Figura IV.3 mostraram também uma pequena variação percentual no tempo de operação do processo quando adotado números diferentes de pratos na coluna, conforme a Tabela IV.4.

**Tabela-IV.4 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.**

Taxa de calor fornecida ao refeedor (J/h)	Varição mínima	Varição máxima	Varição média
1215444600,0	1,63 %	7,05 %	3,73 %
1485543400,0	2,67 %	12,0 %	6,20 %



**Figura IV.4 - Análise do tempo de operação para o Sistema 03.**

Os dados graficados na Figura IV.4 mostraram também uma pequena variação percentual no tempo de operação do processo quando adotado números diferentes de pratos na coluna, conforme relatado na Tabela IV.5. Nas Figuras IV.3 e IV.4 as concentrações molares são diferentes e há variação na taxa de calor que é fornecida ao refeedor.

**Tabela IV.5 - Máxima variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna.**

Taxa de calor fornecida ao refeedor (J/h)	Varição mínima	Varição máxima	Varição média
1350494000,0	2,10 %	14,8 %	6,32 %
1485543400,0	2,13 %	15,1 %	6,46 %

Resumidamente, através nas Figuras IV.1 a IV.4 e nas Tabelas IV.2 a IV.5 constatou-se que a variação média observada na consideração de linearidade da relação entre razão de refluxo e tempo de operação é válida. Para todas as demais simulações para os Sistemas 01 e 03 e para as simulações dos Sistemas 02 e 04, sem exceção, a relação de linearidade entre a razão de refluxo e o tempo final de operação é válida.

Na análise das Tabelas IV.4 e IV.5, para um mesmo Qr pode-se também verificar a influência da concentração inicial da mistura no tempo de operação do processo. A variação percentual média é pequena, 2,47 pontos percentuais, entretanto, a faixa entre as variações mínimas e máximas observadas são mais acentuadas, respectivamente, 5,42 e 13,87 pontos percentuais.

As Tabelas IV.6 a IV.9 mostram a variação percentual da linearidade entre o tempo operacional e a razão de refluxo quando um mesmo sistema é simulado com diferentes números de estágios de equilíbrio, ou seja, estão mostrados as variações mínimas, máximas e médias do tempo final de operação do processo quando o sistema é submetido a uma variação no número de estágios de equilíbrio.

**Tabela IV.6 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna para o Sistema 01.**

Sistema	Notas	Concentração molar inicial	Variação mínima	R1 <sup>(01)</sup>	Tx1 <sup>(02)</sup>	Variação máxima	R2 <sup>(03)</sup>	Tx2 <sup>(04)</sup>	Variação média
01	a/b	33/33/34	2,41 %	15	T1	3,60 %	08	T1	3,17 %
	a/b	33/33/34	2,41 %	15	T2	3,57 %	08	T2	3,22 %
	a/b	05/35/60	1,66 %	10	T1	6,96 %	02	T1	3,16 %
	a/b	05/35/60	1,60 %	15	T3	9,29 %	02	T3	4,27 %
	a/c/d	10/75/15	2,00 %	15	T2	7,28 %	02	T2	3,48 %
	a/c	10/75/15	2,07 %	15	T3	7,57 %	02	T3	3,55 %

Para melhor entendimento da Tabela IV.6, considere as seguintes explicações:

- ♦ (01) e (03) → Razão de refluxo (R1 e R2) onde foram observadas, respectivamente, a menor e a maior variação percentual no tempo do processo. Observação válida também para as Tabelas IV.7 a IV.9;

- ♦ (02) e (04) → Taxa de calor (Tx1 e Tx2) fornecida ao refeedor onde foram observadas, respectivamente, a menor e a maior variação percentual no tempo do processo. Dados: T1=1215444600,0 ; T2=1350494000,0 ; T3=1485543400,0 em [J/h]. Observação válida também para as Tabelas IV.7 a IV.9;

♦ Pureza dos produtos da destilação é de 99%; para o componente menos volátil foi de 99,9%;

♦ Nota (a), para RR=01 não há separação do componente de volatilidade intermediária, ou seja, do tolueno. A recuperação máxima de produtos obtida em RR=01 foi de 26,4 % (ver nota -d-);

♦ Nota (b), para RR=02 também não há separação do componente de volatilidade intermediária;

♦ Nota (c), para RR=01 não há separação do componente menos volátil, ou seja, do m-xileno;

♦ Nota (d), caso onde foi observada a máxima recuperação de produtos em RR=01. NP foi de 30.

**Tabela IV.7 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna para o Sistema 02.**

Sistema	Notas	Concentração molar inicial	Variação mínima	R1 <sub>(01)</sub>	Tx1 <sub>(02)</sub>	Variação máxima	R2 <sub>(03)</sub>	Tx2 <sub>(04)</sub>	Variação média
02	<i>a/c/d</i>	<i>50/01/49</i>	<i>0,74 %</i>	<i>02</i>	<i>T1</i>	<i>11,7 %</i>	<i>15</i>	<i>T1</i>	<i>5,46 %</i>
	<i>a/d</i>	<i>50/01/49</i>	<i>0,72 %</i>	<i>02</i>	<i>T2</i>	<i>11,7 %</i>	<i>15</i>	<i>T2</i>	<i>5,44 %</i>
	<i>d</i>	<i>30/00/70</i>	<i>1,19 %</i>	<i>02</i>	<i>T1</i>	<i>15,1 %</i>	<i>15</i>	<i>T1</i>	<i>7,12 %</i>
	<i>d</i>	<i>30/00/70</i>	<i>1,33 %</i>	<i>02</i>	<i>T3</i>	<i>15,1 %</i>	<i>15</i>	<i>T3</i>	<i>7,13 %</i>
	<i>b/d</i>	<i>70/00/30</i>	<i>1,44 %</i>	<i>04</i>	<i>T2</i>	<i>7,87 %</i>	<i>15</i>	<i>T2</i>	<i>5,10 %</i>
	<i>b/d</i>	<i>70/00/30</i>	<i>1,43 %</i>	<i>04</i>	<i>T3</i>	<i>7,84 %</i>	<i>15</i>	<i>T3</i>	<i>5,11 %</i>

Para melhor entendimento da Tabela IV.7, considere as seguintes explicações:

♦ Pureza dos produtos da destilação é de 95%;

♦ Nota (a), não há separação do componente de volatilidade intermediária, ou seja, do canfeno;

- ♦ Nota (b), para RR=01 e 02 o refeedor da coluna esgotou, ou seja, toda a carga de mistura evaporou sem ter completado a operação de destilação. Foi verificada a separação do mais volátil, ou seja, do alfa-pineno;
- ♦ Nota (c), para RR=02 e com NP=30 o refeedor também esgotou;
- ♦ Nota (d), a recuperação máxima de produtos obtida em RR=01 foi inferior à 20%.

**Tabela IV.8 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação do número de pratos da coluna para o Sistema 03.**

Sistema	Notas	Concentração molar inicial	Variação mínima	R1 <sup>(01)</sup>	Tx1 <sup>(02)</sup>	Variação máxima	R2 <sup>(03)</sup>	Tx2 <sup>(04)</sup>	Variação média
03	a/e	33/33/34	1,42 %	15	T1	1,77 %	04	T1	1,63 %
	a	33/33/34	1,44 %	15	T2	1,69 %	04	T2	1,58 %
	a	05/35/60	1,63 %	15	T1	7,05 %	02	T1	3,73 %
	a/d	05/35/60	2,67 %	15	T3	12,0 %	02	T3	6,10 %
	a/b	10/75/15	2,10 %	15	T2	14,8 %	02	T2	6,32 %
	a/c	10/75/15	2,13 %	15	T3	15,1 %	02	T3	6,46 %

Para melhor entendimento da Tabela IV.8, considere as seguintes explicações:

- ♦ Pureza dos produtos da destilação é de 75%, devido à existência do ponto de azeotropia;
- ♦ Nota (a), para RR=01 a recuperação dos produtos foram expressivas. A máxima recuperação dos produtos obtida foi de 95,8 % (ver nota -d-). A recuperação mínima verificada foi de 75,5 % em NP=15 (ver nota -e-);
- ♦ Nota (b), para RR=02 não há separação do componente menos volátil, ou seja, da água. Na operação da coluna com RR=01 o refeedor esgotou;
- ♦ Nota (c), para RR=01 em qualquer NP e, RR=02 em NP=20, 25 ou 30, também não há separação do componente menos volátil;

♦ Nota (d), caso onde foi observada a máxima recuperação de produtos em RR=01. NP foi de 30;

♦ Nota (e), caso onde foi observada a mínima recuperação de produtos em RR=01. NP foi de 15.

**Tabela IV.9 - Variação percentual no tempo de operação do processo obtido com a variação no número de pratos da coluna para o Sistema 04.**

Sistema	Notas	Concentração molar inicial	Variação mínima	R1 <sub>(01)</sub>	Tx1 <sub>(02)</sub>	Variação máxima	R2 <sub>(03)</sub>	Tx2 <sub>(04)</sub>	Variação média
04	a/b	33/33/34	1,18 %	15	T1	4,09 %	04	T1	2,92 %
	a/b	33/33/34	1,15 %	15	T2	3,92 %	02	T2	2,92 %
	a/b	05/35/60	1,82 %	15	T1	6,88 %	02	T1	3,11 %
	a/b	05/35/60	1,32 %	15	T3	8,53 %	02	T3	3,55 %
	a/c	10/75/15	1,26 %	15	T2	3,46 %	02	T2	2,10 %
	a/c	10/75/15	1,29 %	15	T3	3,66 %	02	T3	2,14 %

Para melhor entendimento da Tabela IV.9 considere as seguintes explicações:

♦ Pureza dos produtos da destilação é de 99%, para o componente menos volátil foi de 99,9%;

♦ A pressão de operação de topo e de fundo são, respectivamente, 2,026 e 2,226 [bar];

♦ Nota (a), para RR=01 a máxima recuperação de produtos obtido foi de 49% (ver nota -c-);

♦ Nota (b), para RR=01 não há separação do componente de volatilidade intermediária, ou seja, do MCD;

♦ Nota (c), caso onde foi observada a máxima recuperação de produtos em RR=01. NP foi de 30.

Na política de operação para fins de otimização onde a variável manipulada é a razão de refluxo, o tempo de operação do processo sofreu uma variação máxima de 15,1 pontos percentuais, observado nos Sistemas 02 e 03 e relatadas nas Tabelas IV.7 e IV.8, quando submetido à mudança no número de estágios de equilíbrio da coluna. Isto implica que na determinação da política ótima global da coluna, pode-se avaliar a variação do número de estágios de equilíbrio.

Informações adicionais poderão ser extraídas das Tabelas IV.6 a IV.9, como por exemplo, o tempo de operação do processo é mais influenciado pela variação do número de pratos quanto menor for a razão de refluxo, exceto para o Sistema 02, que é o inverso. Esta exceção pode ser explicada pela baixa diferença de volatilidade entre os constituintes da mistura. Outra informação extraída nestas tabelas é que na média geral, a variação do tempo é inferior à 8,0% quando varia-se o número de pratos numa determinada razão de refluxo e em qualquer sistema avaliado.

Finalizando, na política de otimização da coluna de destilação em batelada, via razão de refluxo, pode-se assumir aproximadamente linear a variação entre a razão de refluxo e o tempo de operação do processo, e quanto maior for a taxa de calor fornecida ao refeedor menor serão os coeficientes lineares e angulares das retas.

#### **IV.1.1.2 - ANÁLISE DA PRODUTIVIDADE**

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via razão de refluxo, a produtividade do processo apresenta um comportamento interessante e ao mesmo tempo complexo, conforme mostrado nas Figuras IV.5 a IV.20. A produtividade tem uma variação não-linear com a razão de refluxo e, dependendo do número de estágios de equilíbrio e do sistema avaliado, apresenta ponto de inflexão, conforme será mostrado nos gráficos a seguir. Devido à complexidade de análise da produtividade, as políticas de otimização orientadas a esta variável não são mencionadas em nenhuma referência na literatura.

Na otimização via razão de refluxo, a produtividade apresentou variações entre 0.40% a 210%, respectivamente observados nos Sistemas 04 e 02, quando os mesmos são submetidos a uma variação do número de estágios de equilíbrio. Isto implica que a otimização quanto ao número de estágios poderá viabilizar a operação do processo.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

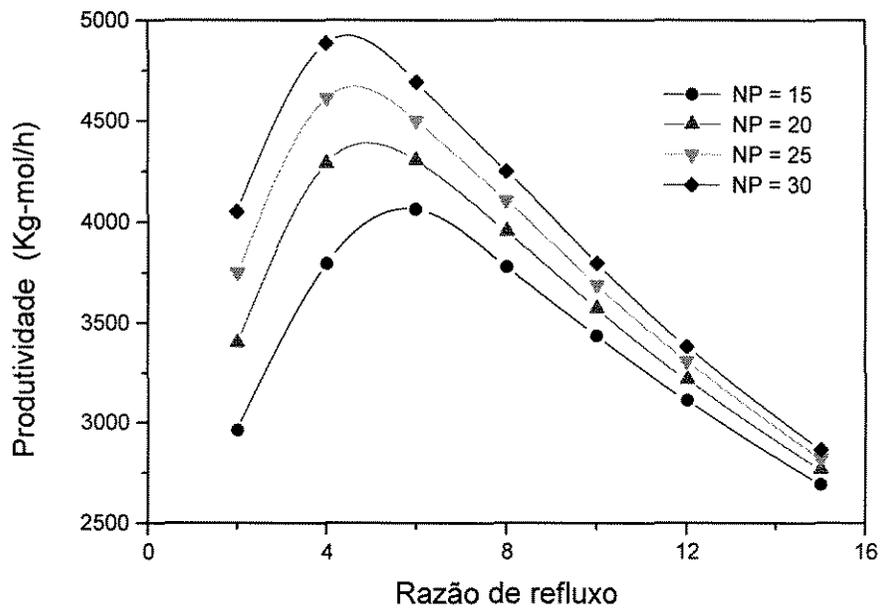


Figura IV.5 - Análise da produtividade para o Sistema 01.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

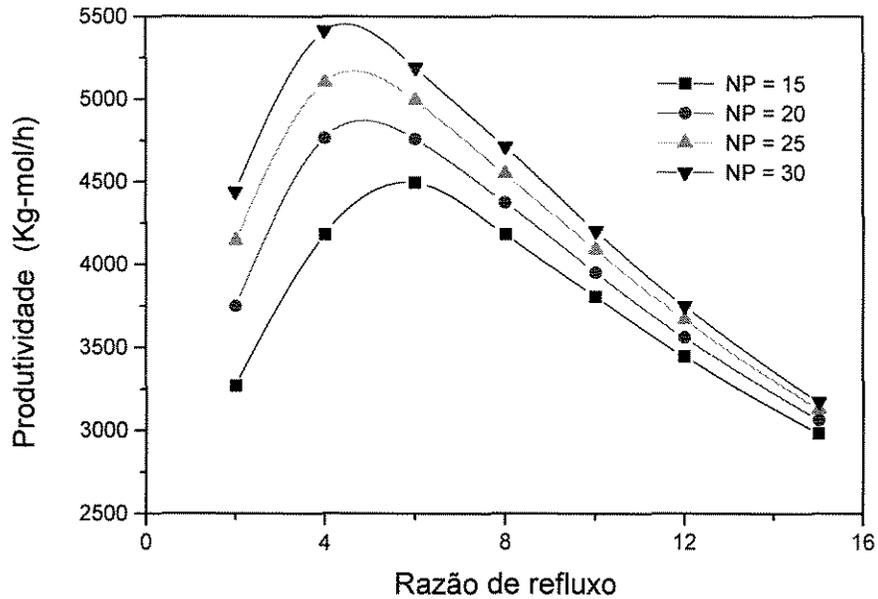


Figura IV.6 - Análise da produtividade para o Sistema 01.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 05 / 35 / 60 (%)

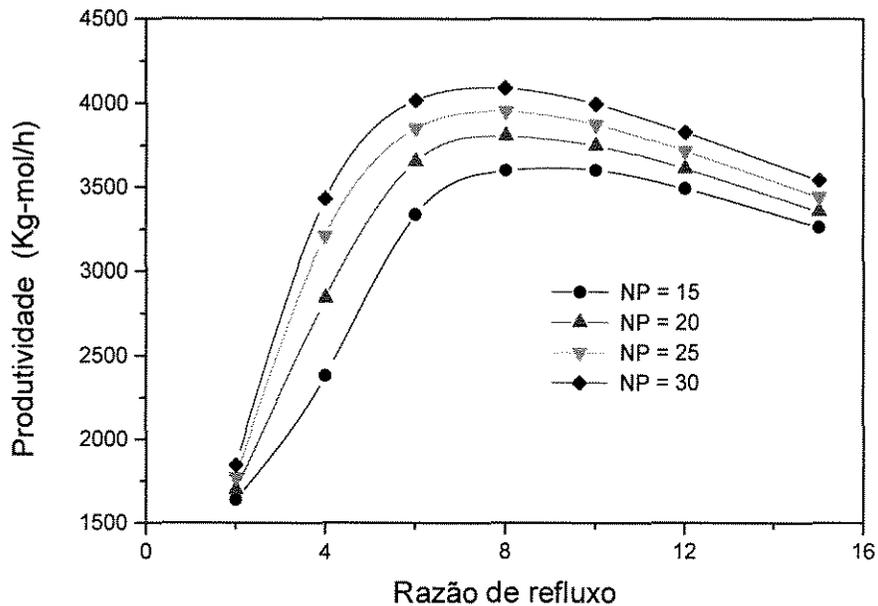
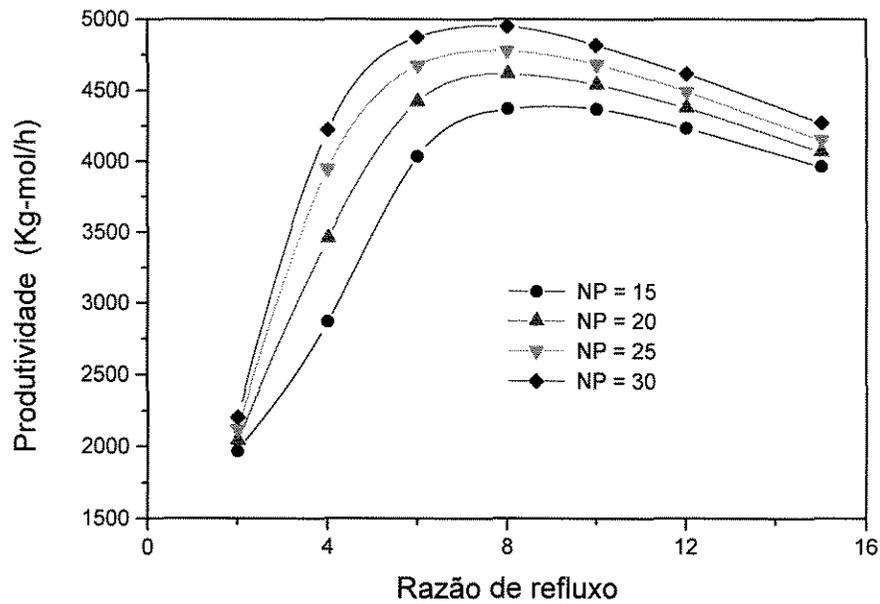


Figura IV.7 - Análise da produtividade para o Sistema 01.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 05 / 35 / 60 (%)



**Figura IV.8 - Análise da produtividade para o Sistema 01.**

Nas Figuras IV.5 a IV.8, pode-se notar que as curvas que representam a produtividade do Sistema 01 são funções que apresentam um ponto de inflexão bastante definido e único. Portanto, é interessante na otimização do Sistema 01 operar a coluna numa razão de refluxo próxima ao ponto de produtividade máxima.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 30 / 00 / 70 (%)

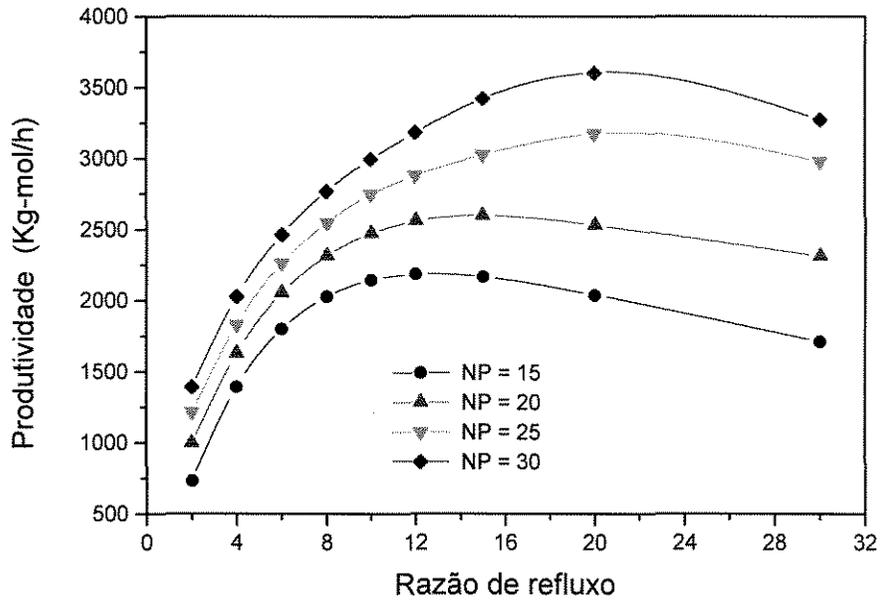


Figura IV.9 - Análise da produtividade para o Sistema 02.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 30 / 00 / 70 (%)

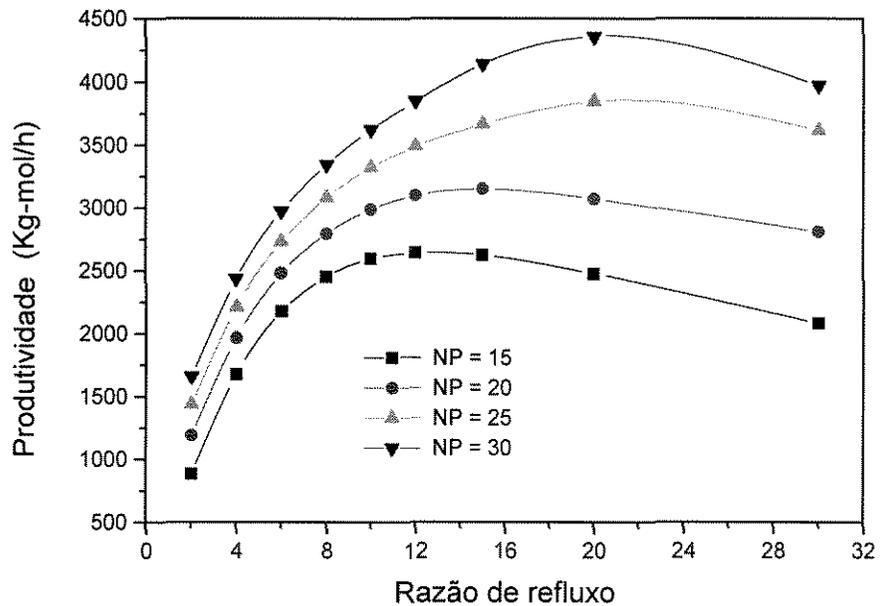


Figura IV.10 - Análise da produtividade para o Sistema 02.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 70 / 00 / 30 %

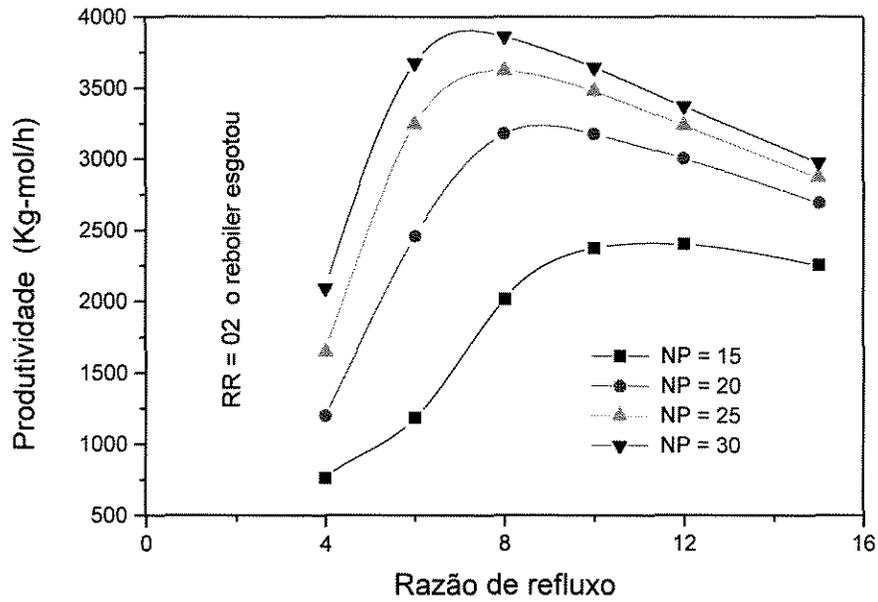


Figura IV.11 – Análise da produtividade para o Sistema 02.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 70 / 00 / 30 (%)

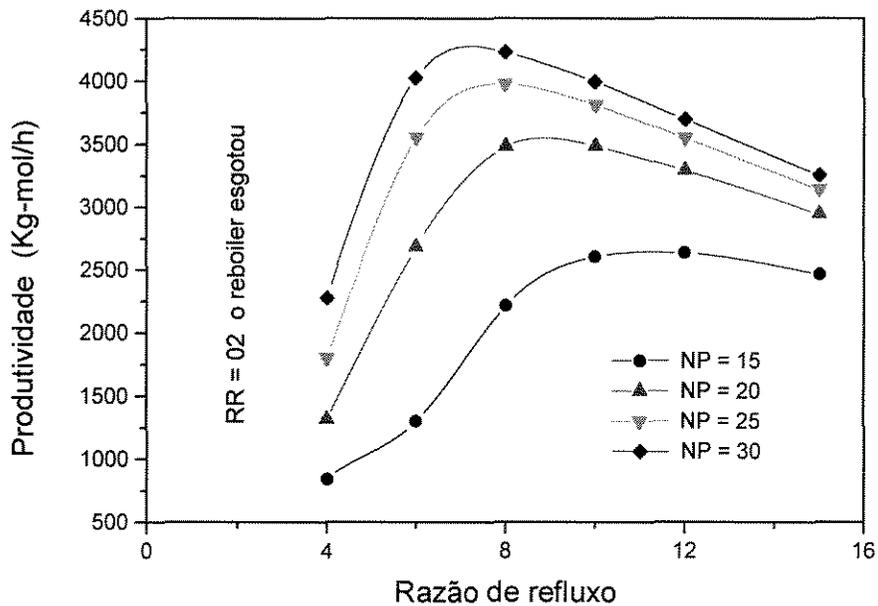


Figura IV.12 - Análise da produtividade para o Sistema 02.

Nas Figuras IV.9 a IV.12, as curvas que representam a produtividade do Sistema 02 apresentam um ponto de inflexão num intervalo maior de valores de razão de refluxo.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

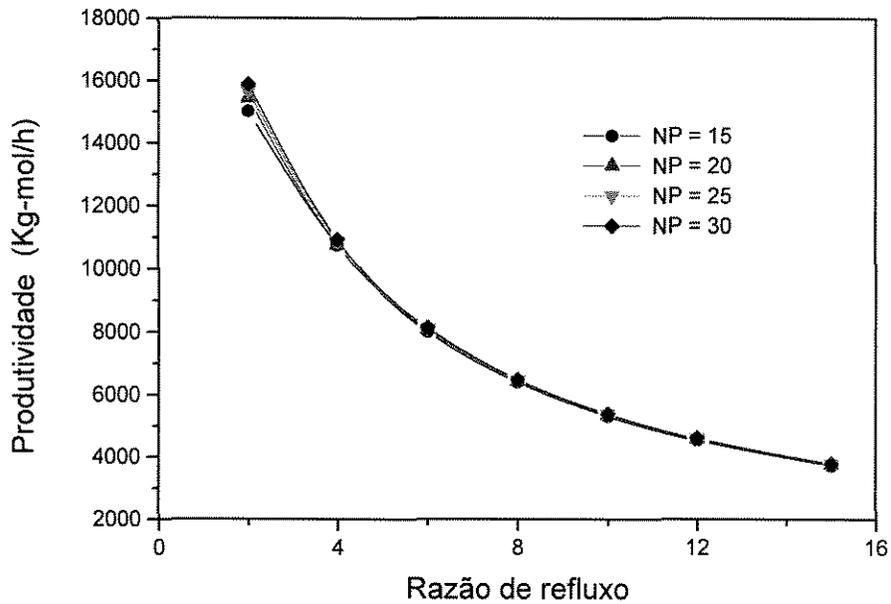


Figura IV.13 - Análise da produtividade para o Sistema 03.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

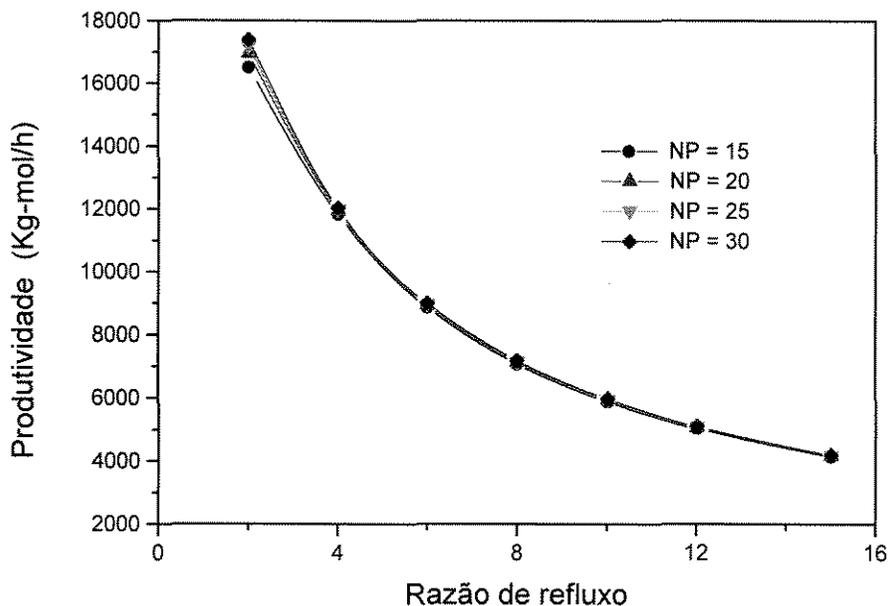


Figura IV.14 - Análise da produtividade para o Sistema 03.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 10 / 75 / 15 (%)

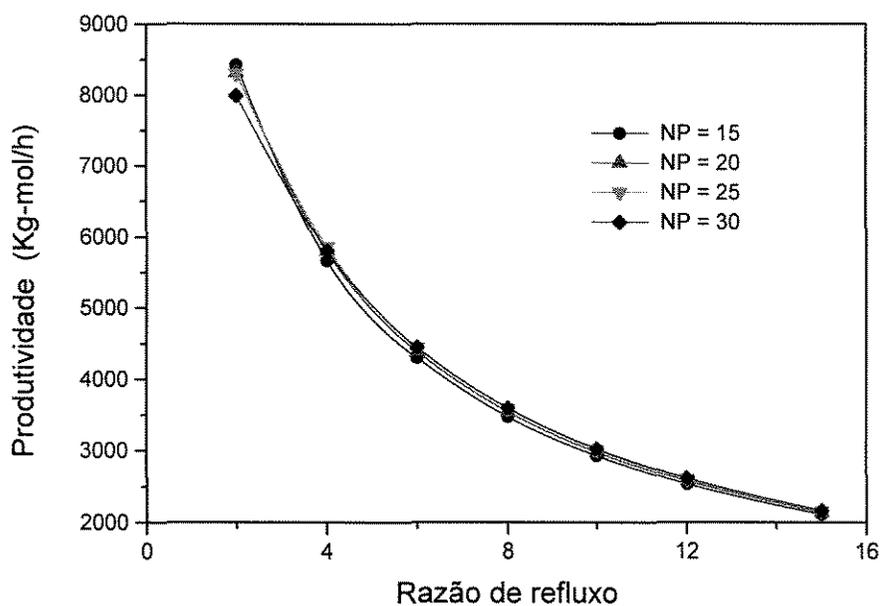


Figura IV.15 - Análise da produtividade para o Sistema 03.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 10 / 75 / 15 (%)

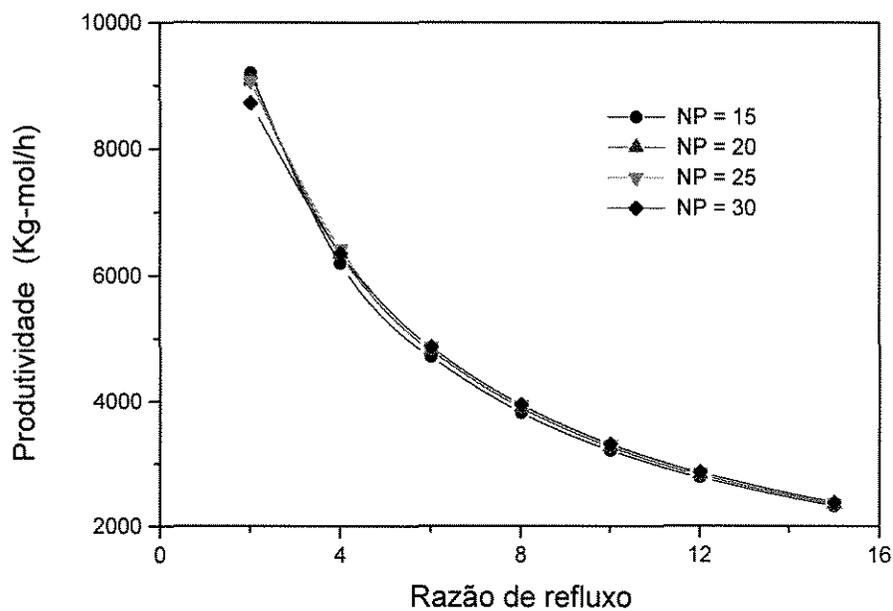


Figura IV.16 - Análise da produtividade para o Sistema 03.

Nas Figuras IV.13 a IV.16, pode-se notar que as curvas que representam a produtividade do Sistema 03 são funções inversamente proporcionais à razão de refluxo, portanto, quanto menor a razão de refluxo maior será a produtividade.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

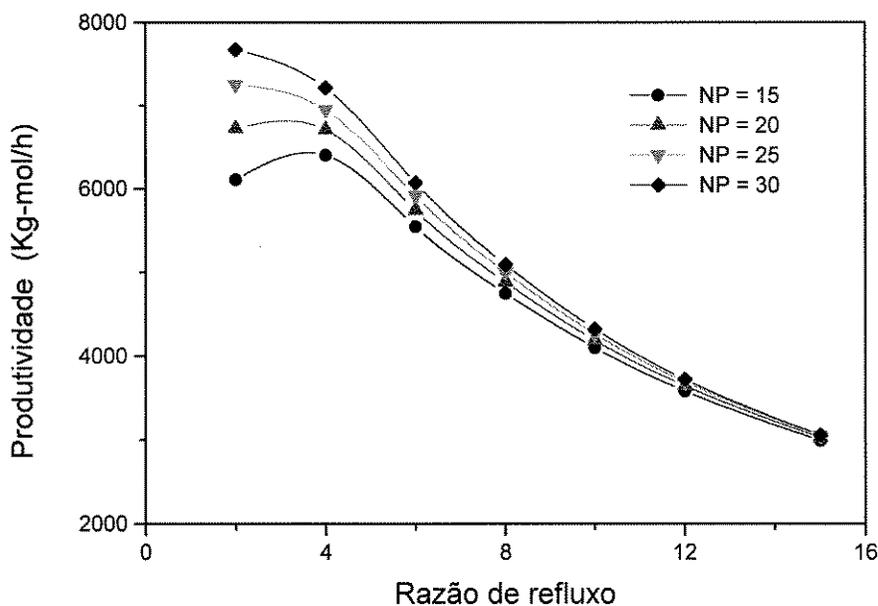


Figura IV.17 - Análise da produtividade para o Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

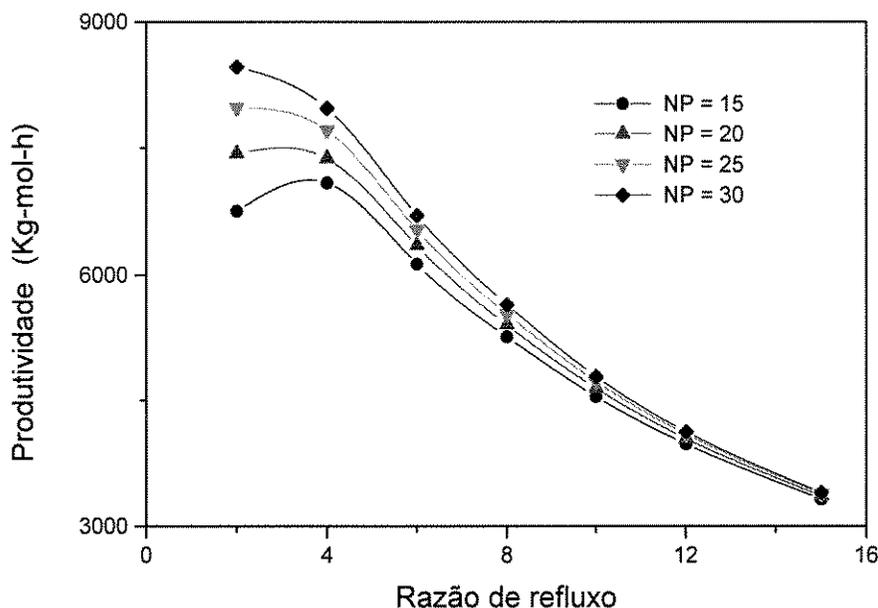


Figura IV.18 - Análise da produtividade para o Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração inicial = 05 / 35 / 60 (%)

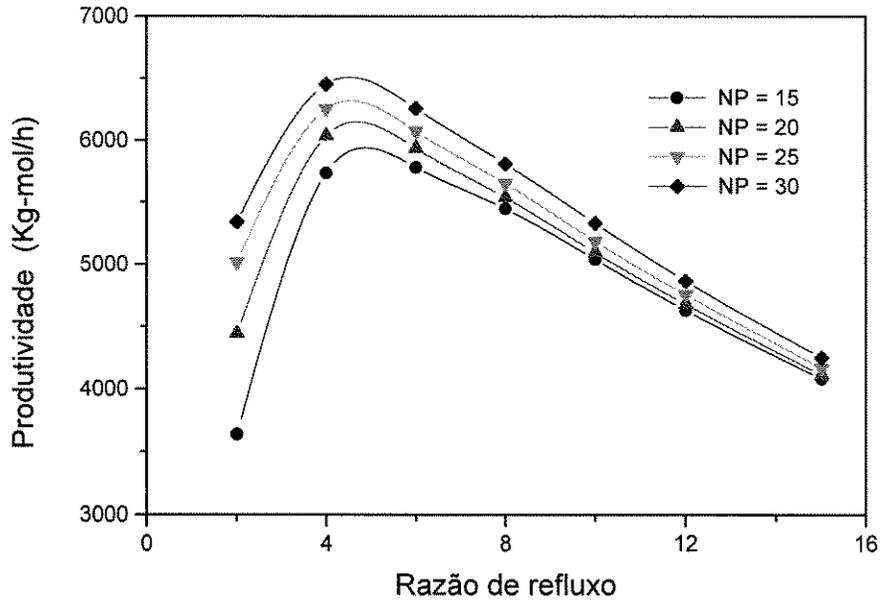


Figura IV.19 - Análise da produtividade para o Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração inicial = 05 / 35 / 60 (%)

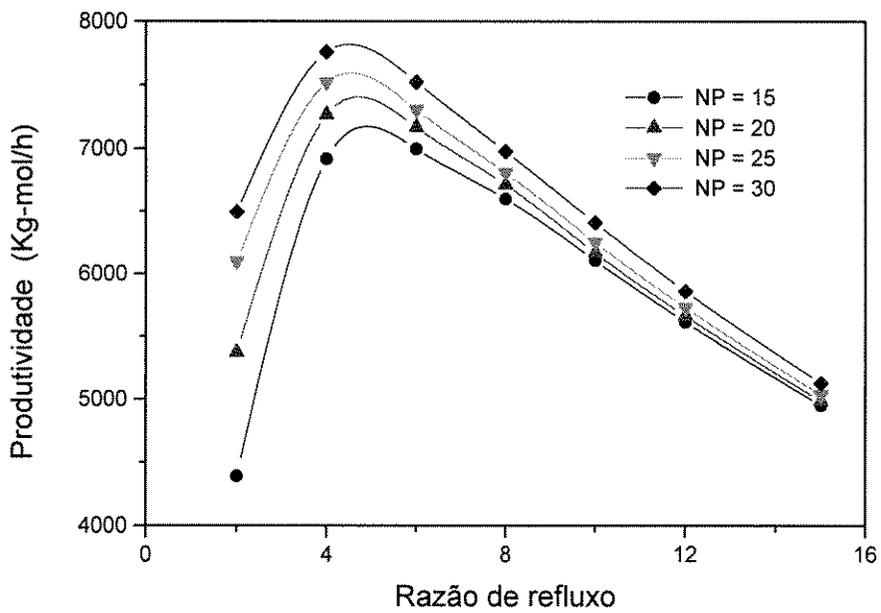


Figura IV.20 - Análise da produtividade para o Sistema 04.

---

Nas Figuras IV.17 a IV.20, pode-se notar que as curvas que representam a produtividade do Sistema 04 são funções que apresentam um ponto de inflexão bastante definido e único. Portanto, é interessante na otimização do Sistema 01 operar a coluna numa razão de refluxo próxima ao ponto de produtividade máxima.

Resumindo, comparando-se os Sistemas 01 a 04, observa-se pelas Figuras IV.5 a IV.20, que o valor para a razão de refluxo onde a produtividade é máxima está bastante próximo em para cada um dos quatro sistemas. Portanto, na otimização destes sistemas e de outros sistemas análogos, a maximização da produtividade com relação à razão de refluxo está compreendido numa faixa bem definida. No Sistema 03, a maximização é inversamente proporcional à razão de refluxo, porém, isto não invalida a generalização anterior, uma vez que, para os outros sistemas a razão de refluxo ótima é relativamente pequena.

Nas políticas de otimização da operação do Sistema 02, através de algumas simulações avaliadas, verificou-se que existem casos em que para razões de refluxo elevadas, a destilação não apresentou convergência. Este fato se deve à ocorrência de decisões ambíguas, ou seja, enquanto é produzido um determinado produto “main-cut” de destilação nas especificações requeridas outro produto “main-cut” já atingiu também as especificações requeridas. Isto faz com que o programa seja interrompido.

Observa-se nas Figuras IV.5 a IV.20 de produtividade que o número de pratos pode ser fundamental na obtenção da produtividade máxima, excetuando-se o caso do Sistema 03, onde o número de pratos praticamente inaltera os valores de produtividade obtidos na faixa de análise das variáveis.

Finalizando, a produtividade do sistema é bastante sensível a política ótima de razão de refluxo utilizada para as operações de destilação em batelada. A análise da variável de produtividade poderá tornar uma operação viável ou não.

### IV.1.1.3 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE PRODUTO RECUPERADO

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via razão de refluxo, a quantidade de produtos recuperados, dentro das especificações desejadas, apresentam comportamento análogo em todos os sistemas avaliados, conforme visto nas Figuras IV.21 a IV.28. Consta-se que quanto maior for a razão de refluxo e o número de pratos na coluna, maior será a quantidade de produtos recuperados. Algumas irregularidades são observadas no Sistema 03, onde esta regra poderá sofrer variações negativas de no máximo 1,0%.

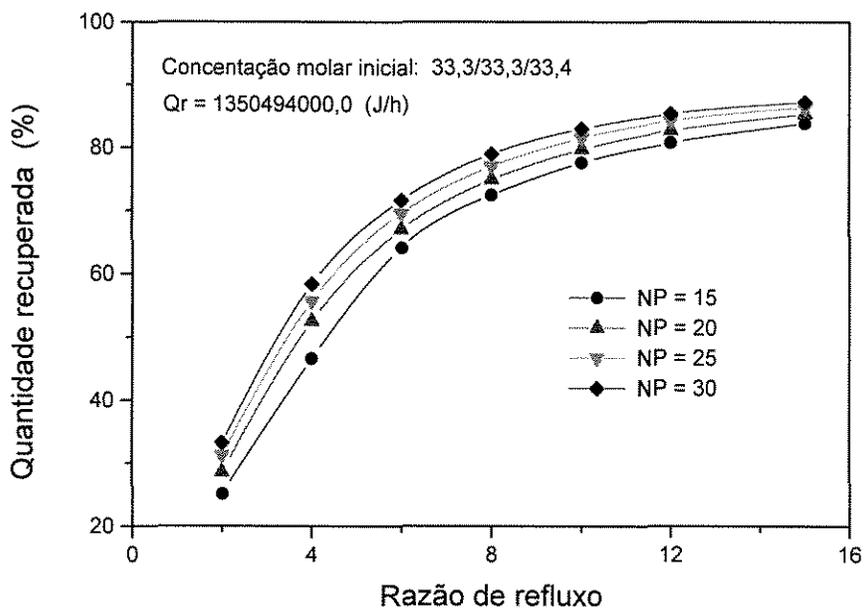
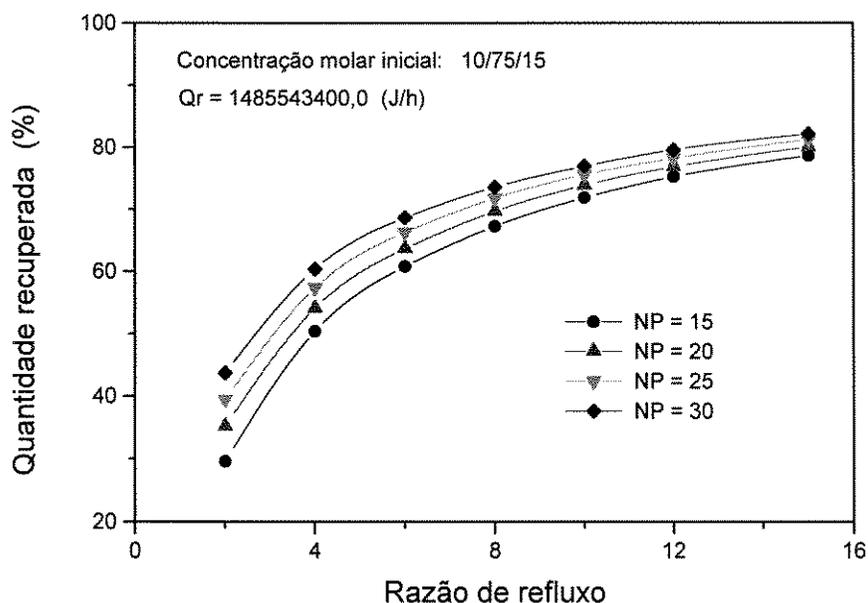
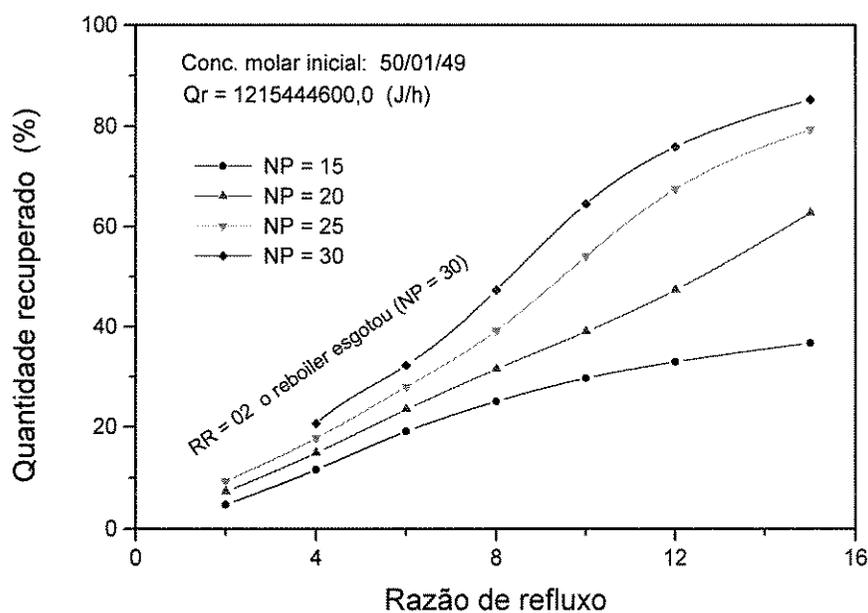


Figura IV.21 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 01.

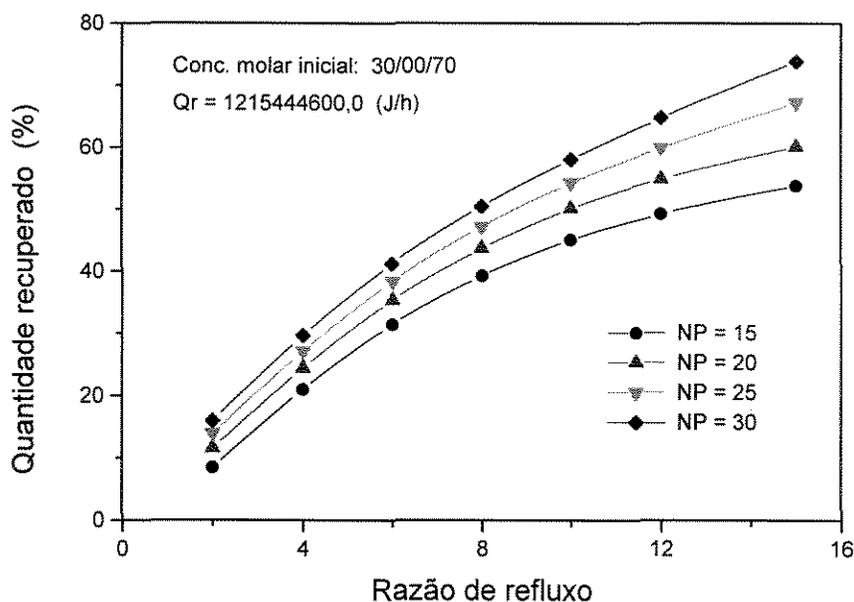


**Figura IV.22 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 01.**

Nas Figuras IV.21 e IV.22, observa-se que a variação da composição de alimentação e da taxa de calor fornecida ao refeedor não altera os perfis da quantidade de produtos recuperados.

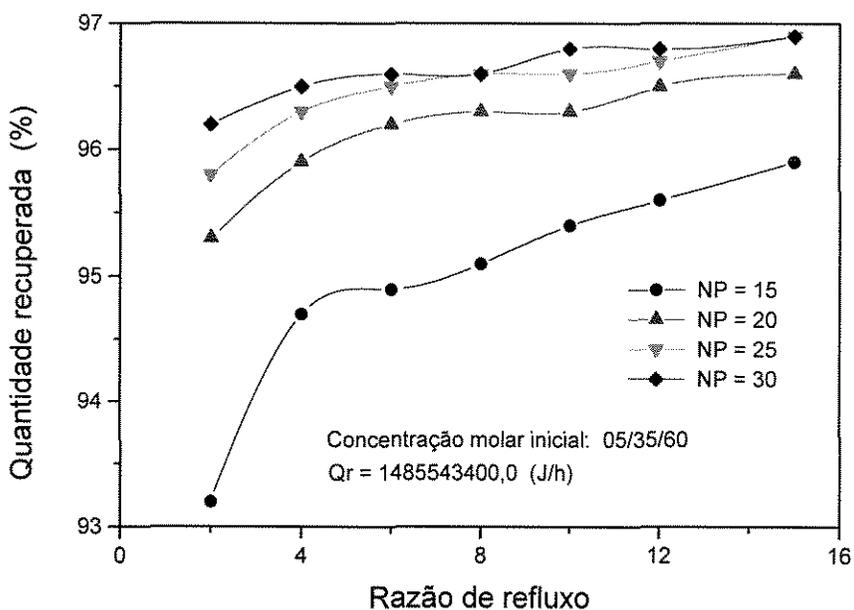


**Figura IV.23 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 02.**



**Figura IV.24 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 02.**

Nas Figuras IV.23 e IV.24, observa-se que a presença do componente de volatilidade intermediária, o canfeno, gerou curvas irregulares de difícil análise. A presença do canfeno dificulta a separação dos outros componentes da mistura. Este fato foi verificado nas simulações realizadas para este sistema.



**Figura IV.25 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 03.**

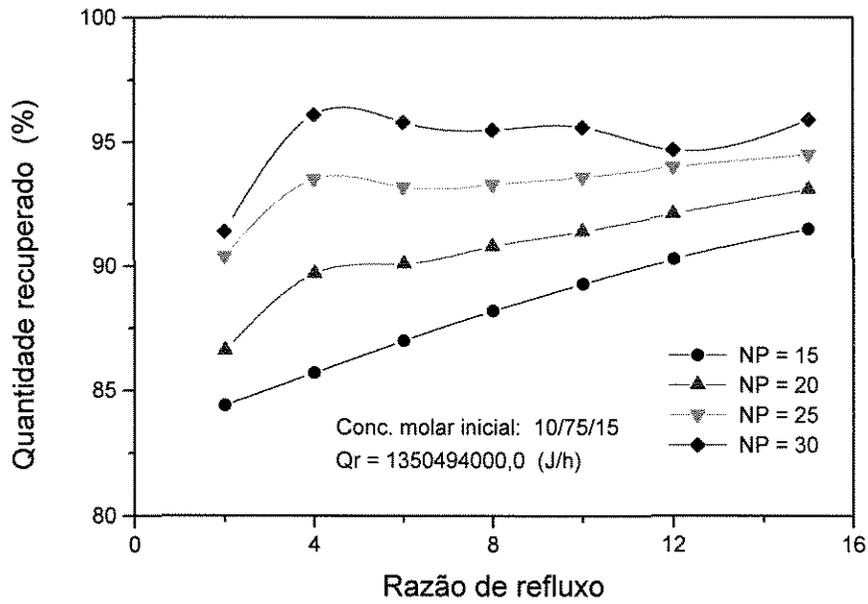


Figura IV.26 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 03.

Nas Figuras IV.25 e IV.26, existem algumas irregularidades no comportamento das curvas. Entretanto, a tendência da quantidade de produtos recuperados em aumentar com a razão de refluxo é mantida.

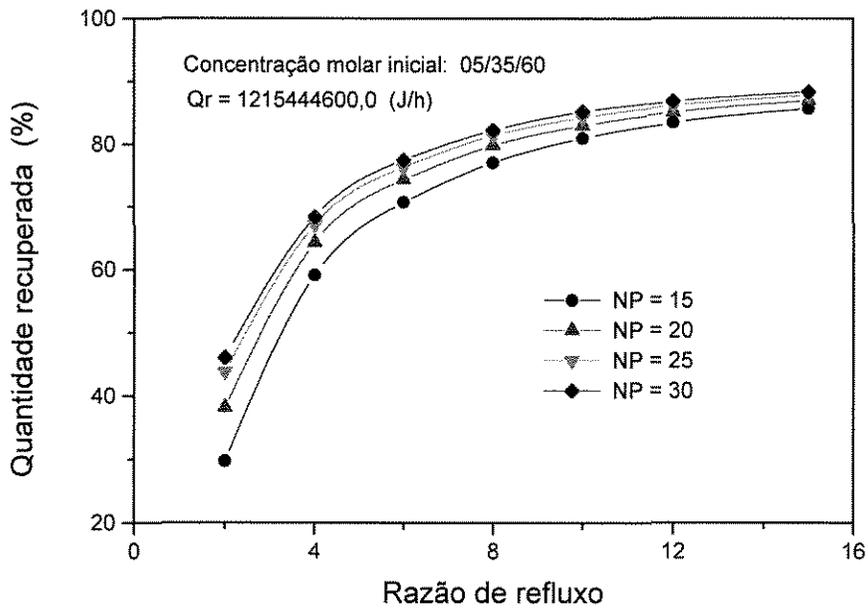
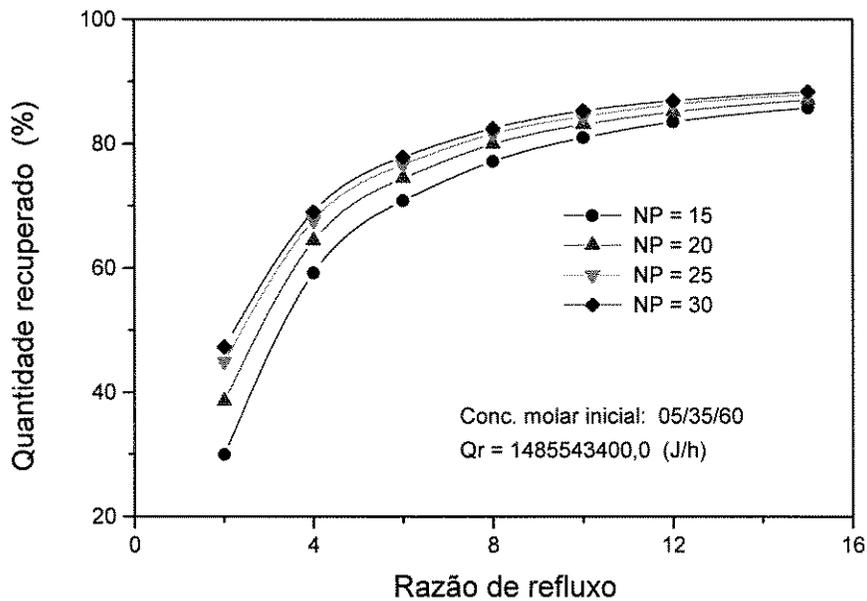


Figura IV.27 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 04.



**Figura IV.28 - Análise da quantidade de produtos recuperados no Sistema 04.**

Nas Figuras IV.27 e IV.28, observa-se que a variação da composição de alimentação e da taxa de calor fornecida ao refeedor não altera os perfis da quantidade de produtos recuperados.

Conclui-se dos resultados que a quantidade de produtos recuperados sofre uma forte influência da razão de refluxo. Portanto, otimizar a razão de refluxo é um ponto fundamental na operacionalidade do processo.

## IV.1.2 - POLÍTICA DE OTIMIZAÇÃO VIA NÚMERO DE PRATOS

A variável em análise é a quantidade de estágios de equilíbrio da coluna de destilação que diretamente é dado pelo número de pratos somados ao refeedor e ao condensador. Portanto, a avaliação é feita através do número de pratos na coluna.

#### IV.1.2.1 - ANÁLISE DO TEMPO DE OPERAÇÃO DO PROCESSO

Na política de otimização da coluna de destilação em batelada, via número de pratos, o tempo de operação do processo é uma função do número de estágios de equilíbrio. Indiretamente, o número de estágios e a quantidade inicial de mistura a ser destilada fornecem uma idéia das dimensões física do equipamento. Constatou-se que para uma variação do número de pratos da coluna, o tempo de operação apresenta três comportamentos diferentes. No primeiro, a relação é diretamente proporcional, no segundo é inversamente proporcional e no terceiro, a relação apresenta um ponto de inflexão.

Nas Figuras IV.29 a IV.32, observa-se o comportamento diretamente proporcional e aproximadamente linear na relação entre o tempo de operação e o número de esta'gios em cada política de RR constante. Os valores percentuais indicados nos gráficos indicam o aumento percentual do tempo de operação entre as operações com 15 e 30 pratos. Observa-se que quanto maior for a RR menor é a influência do número de pratos da coluna no tempo final da operação nos sistemas cuja relação é diretamente proporcional. Observa-se, também que, os valores percentuais explicitados nas figuras são as variações relativas entre os valores obtidos para os tempos operacionais com NP de 15 e 30 para uma mesma simulação.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 10 / 75 / 15 (%)

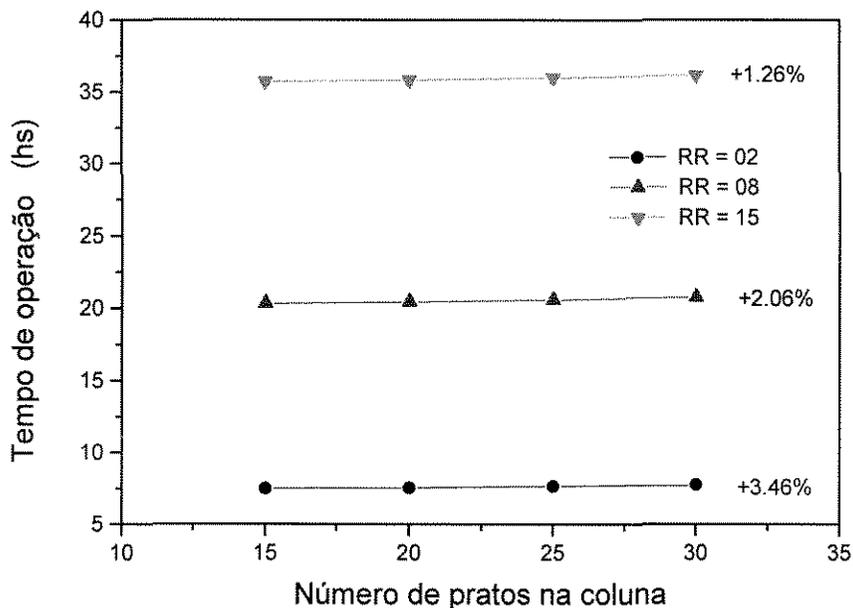


Figura IV.29 – Análise do tempo de operação no Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 10 / 75 / 15 (%)

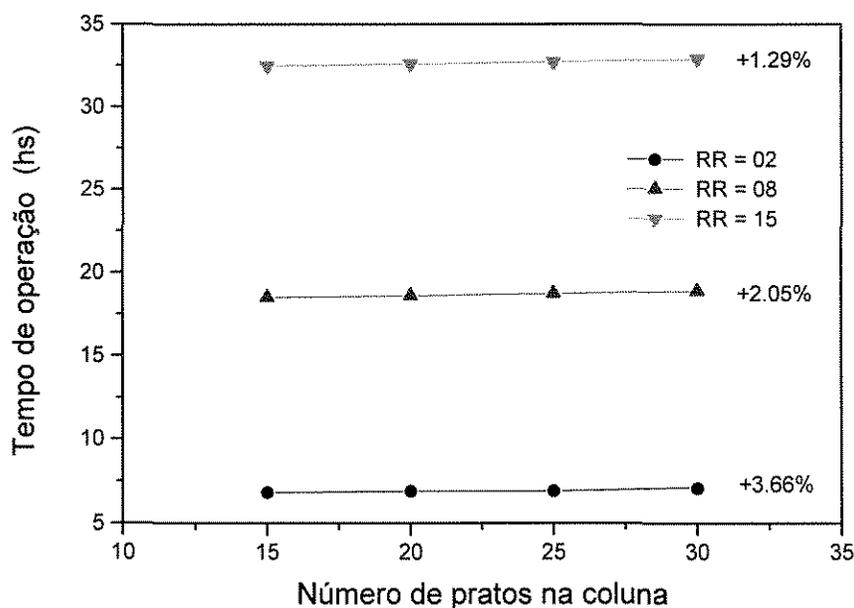


Figura IV.30 – Análise do tempo de operação no Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 10 / 75 / 15 (%)

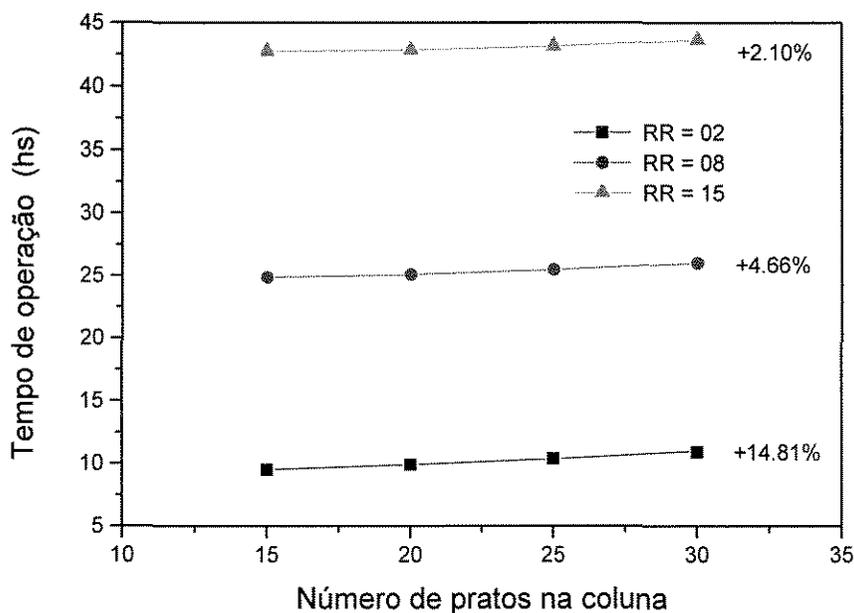
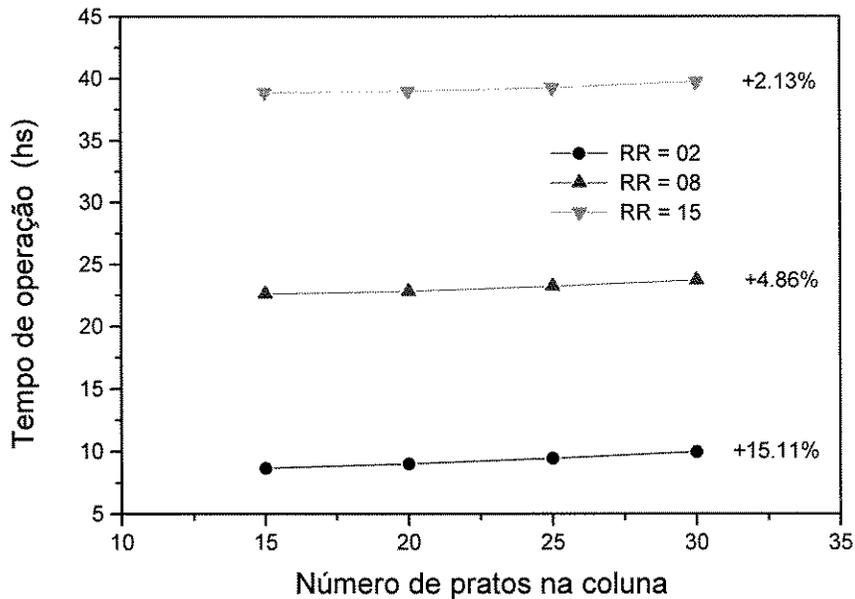


Figura IV.31 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 10 / 75 / 15 (%)



**Figura IV.32 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.**

Nas Figuras IV.33 a IV.36, observa-se o comportamento levemente inversamente proporcional na relação entre o tempo de operação do processo e o número de pratos na coluna em cada política de razão de refluxo constante. Entretanto, observa-se que na mudança do número de pratos da coluna, a influência da razão de refluxo não é sempre a mesma, ou seja, para razões de refluxo maiores, há maior influência do número de pratos.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 30 / 00 / 70 (%)

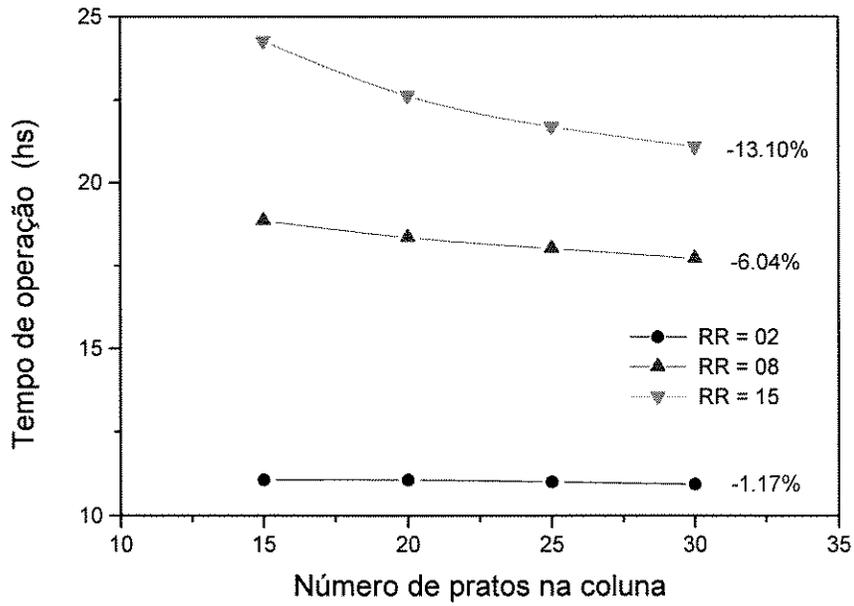


Figura IV.33 - Análise do tempo de operação no Sistema 02.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 30 / 00 / 70 (%)

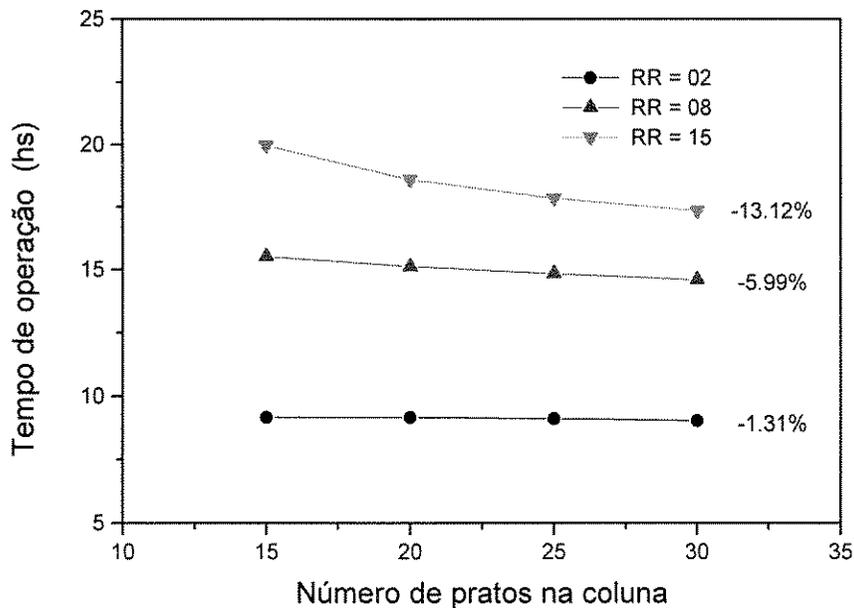


Figura IV.34 - Análise do tempo de operação no Sistema 02.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

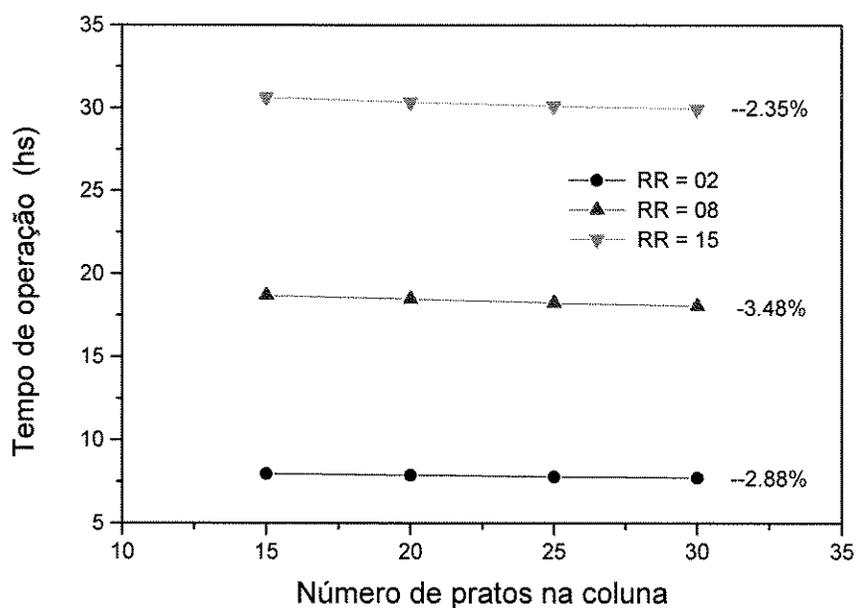


Figura IV.35 - Análise do tempo de operação no Sistema 01.

São dados:  $Q_r = 1350494000,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 33,3 / 33,3 / 33,4 (%)

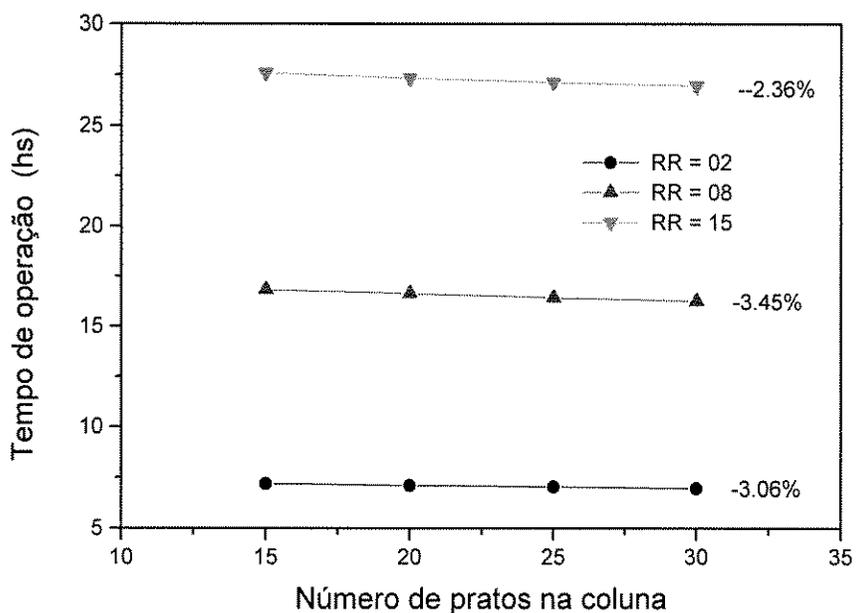


Figura IV.36 - Análise do tempo de operação no Sistema 01.

Nas Figuras IV.37 a IV.40, observa-se a formação de um leve ponto de inflexão.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 05 / 35 / 60 (%)

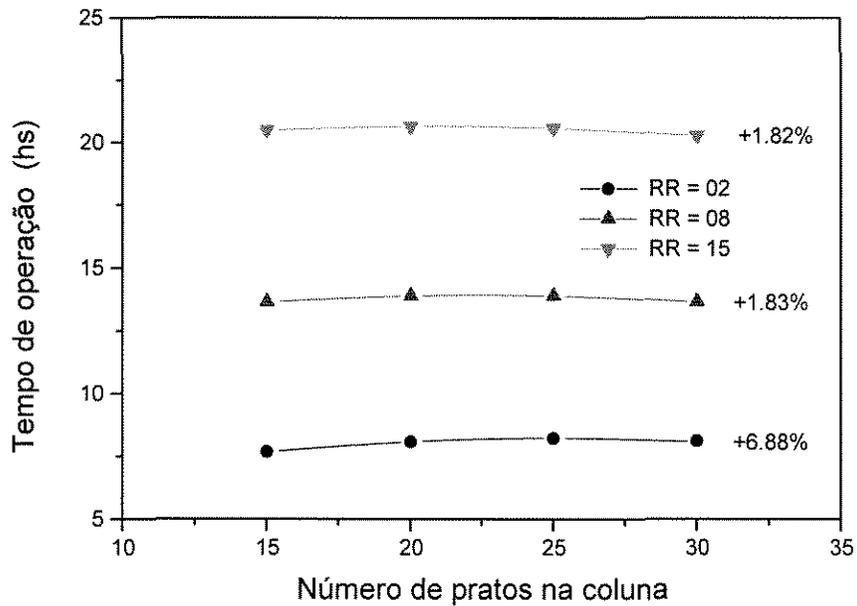


Figura IV.37 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 05 / 35 / 60 (%)

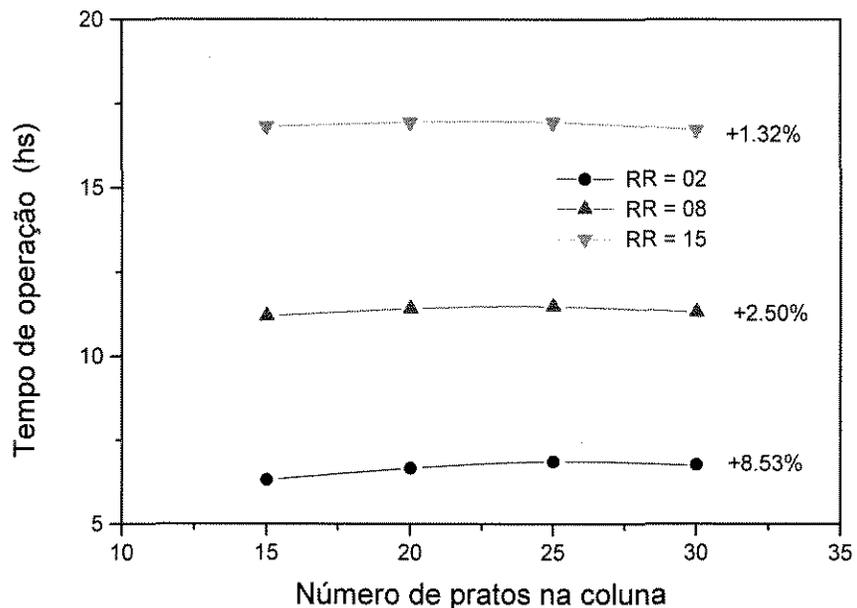


Figura IV.38- Análise do tempo de operação no Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1215444600,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 05 / 35 / 60 (%)

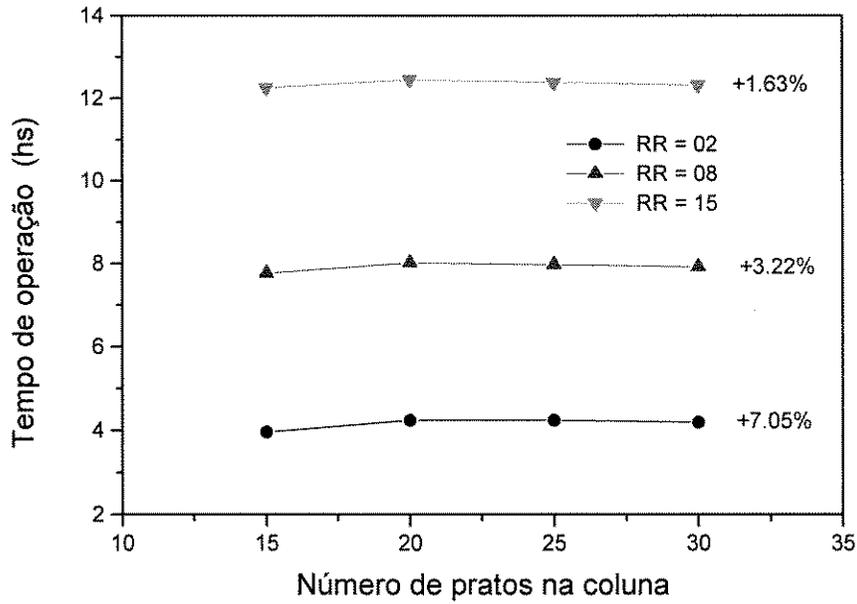


Figura IV.39 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.

São dados:  $Q_r = 1485543400,0$  (J/h) e concentração molar inicial = 05 / 35 / 60 (%)

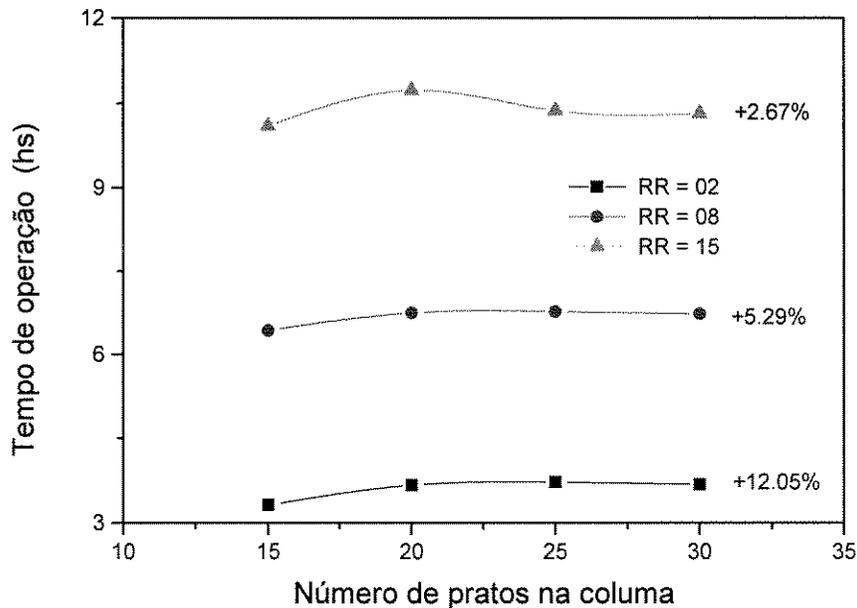


Figura IV.40 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.

---

A razão da existência de três comportamentos para as curvas, Figuras IV.29 a IV.40, entre o número de pratos e o tempo de operação do processo é devido à concentração molar inicial da mistura a ser destilada. Outro ponto importante observado foi que para uma mesma concentração molar inicial o comportamento é similar em qualquer sistema estudado, ou seja, se num determinado sistema a relação entre número de pratos e o tempo de operação for diretamente proporcional, no outro também o será, se for inversamente proporcional no outro também o será e, finalmente, se apresentar ponto de máximo no outro também apresentará.

A otimização do número de estágios da coluna somente é interessante na época da construção do equipamento, pois pelas dificuldades ou mesmo pelas impossibilidades, a alteração da estrutura física não é uma boa variável para se analisar nos estudos em otimização de equipamentos já existentes. Conforme constatado, o tempo ótimo de operação quanto se avalia o número de pratos é influenciado pela concentração molar inicial. Seria inviável alterar a estrutura física de um equipamento em cada operação da coluna. Além disto, os processos em batelada são marcados pela característica intrínseca de multi-propósito.

#### **IV.1.2.2 - ANÁLISE DA PRODUTIVIDADE**

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via número de pratos, a produtividade do processo apresenta um comportamento bastante complexo. A relação entre o número de pratos da coluna e a produtividade poderá ser uma função proporcional ou apresentar ponto de inflexão, conforme pode ser observado nas Figuras IV.41 a IV.44.

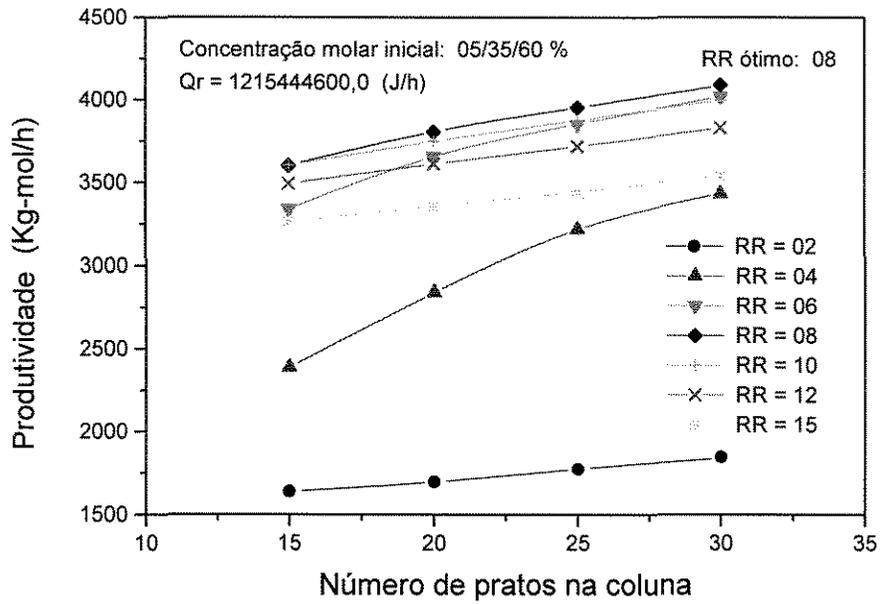


Figura IV.41 - Análise da produtividade no Sistema 01.

Para outras simulações do Sistema 01, o comportamento das curvas foram sempre crescente, similares a Figura IV.41. Contudo, a razão de refluxo ótima variou numa faixa entre 04 e 10.

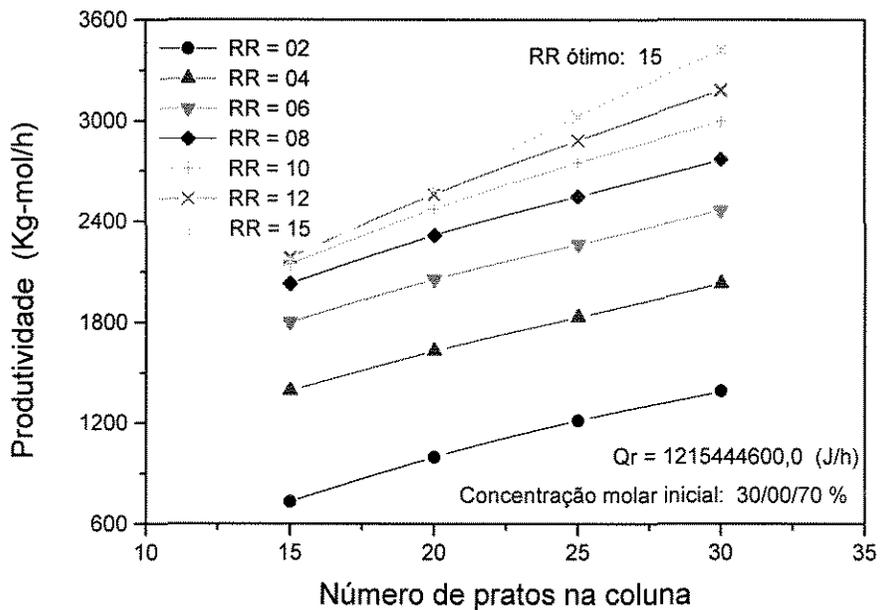
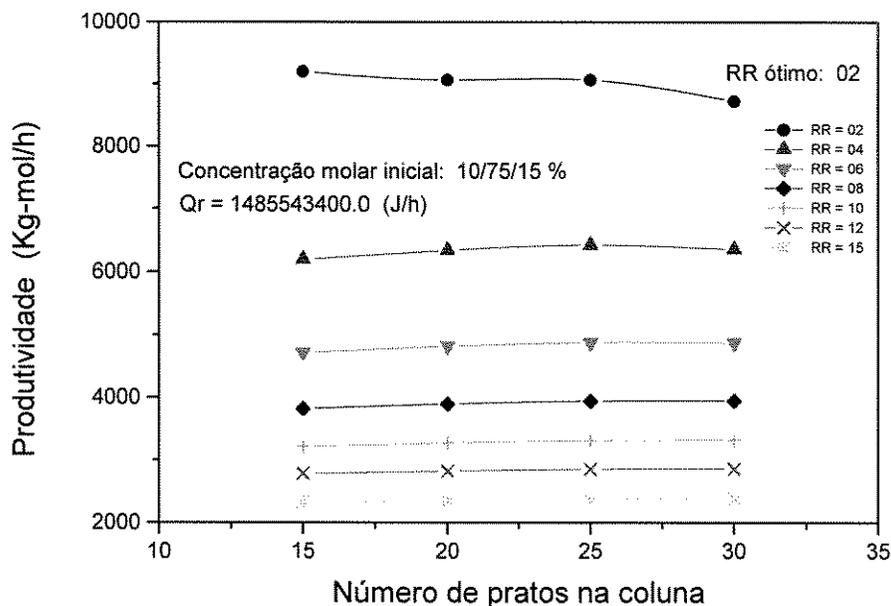


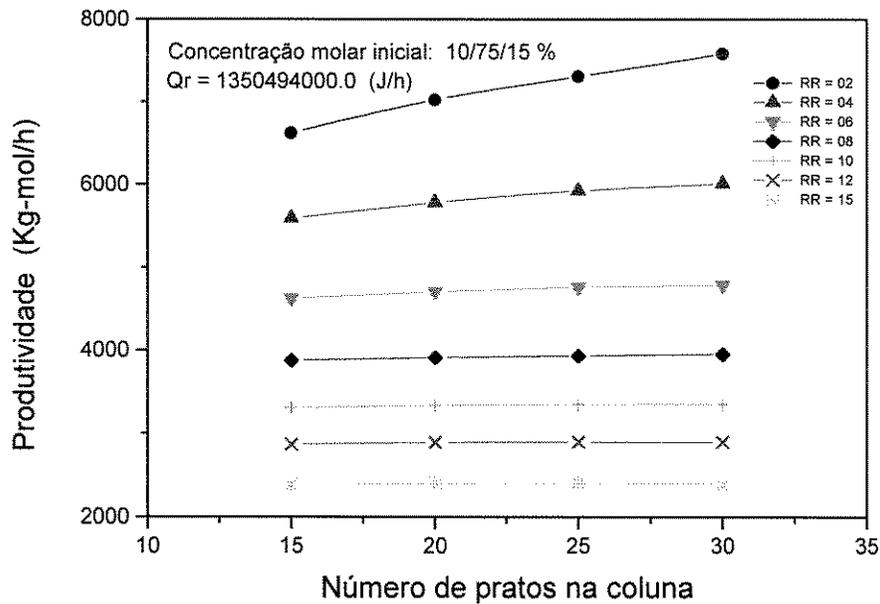
Figura IV.42 - Análise da produtividade no Sistema 02.

Nas simulações do Sistema 02, o comportamento das curvas também foi sempre crescente, conforme a Figura IV.42. Contudo, a razão de refluxo ótima variou numa faixa entre 08 e 15.



**Figura IV.43 - Análise da produtividade no Sistema 03.**

Nas simulações do Sistema 03, o comportamento das curvas também foi sempre decrescente e, dependendo da razão de refluxo, apresentou ponto de inflexão, conforme a Figura IV.43. As variações nos pontos de inflexão foram pequenas (<5,0%). Contudo, a razão de refluxo ótima variou numa faixa entre 02 e 06.



**Figura IV.44 - Análise da produtividade no Sistema 04.**

Nas simulações do Sistema 04, o comportamento das curvas também foi sempre crescente e, dependendo da razão de refluxo, apresentou ponto de inflexão, conforme a Figura IV.44. As variações nos pontos de inflexão foram muito pequenas (<1,0%). Contudo, a razão de refluxo ótima variou numa faixa entre 02 e 06.

Conforme constatado, esta complexidade está diretamente associada à política de razão refluxo e à concentração molar inicial da mistura a ser destilada. Isto implica que a determinação da política de razão de refluxo ótima é um ponto importante nos estudos de otimização deste processo.

### IV.1.2.3 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE PRODUTO RECUPERADO

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via número de pratos, a quantidade de produtos recuperados dentro das especificações desejadas apresentam uma relação simples; quanto maior o número de pratos maior será a quantidade recuperada e, quanto maior a razão de refluxo maior também será a quantidade recuperada, conforme Figuras IV.45 a IV.49.

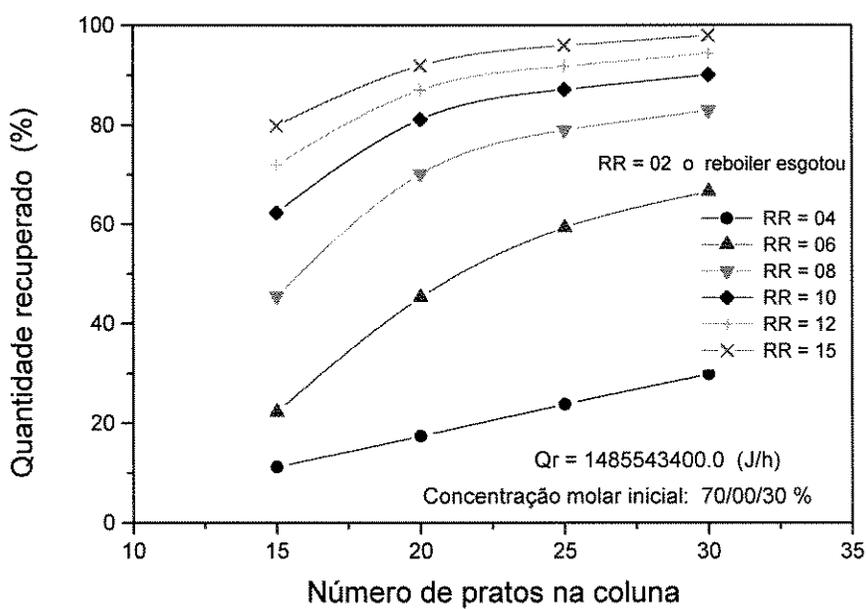


Figura IV.45 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 02.

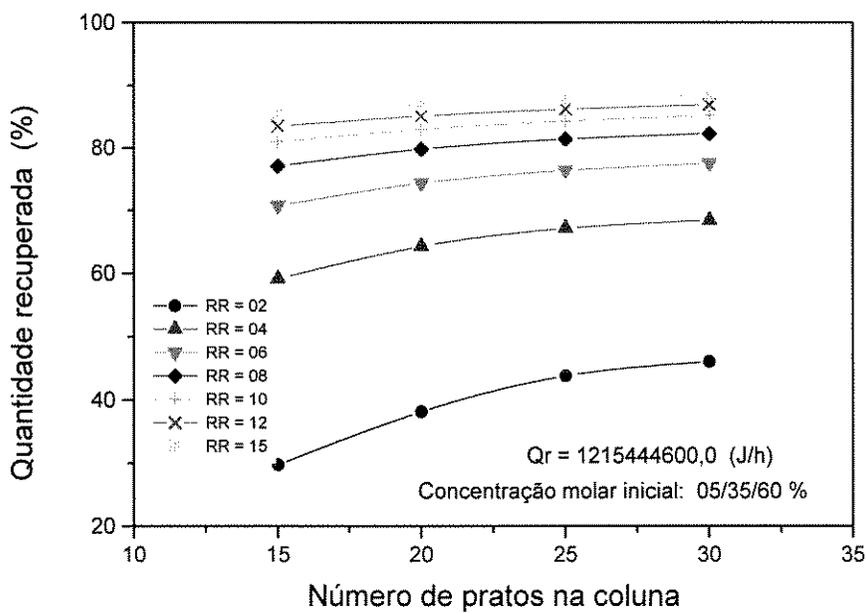


Figura IV.46 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 04.

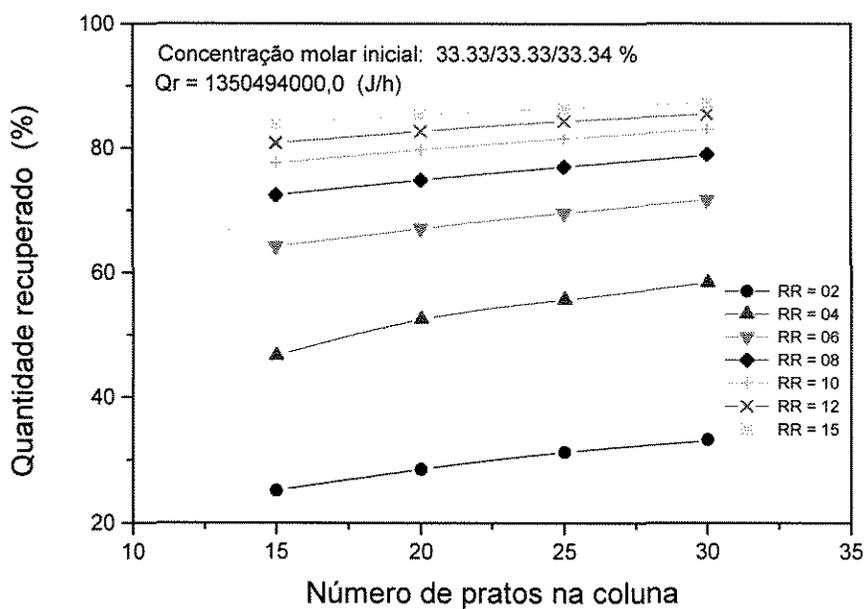


Figura IV.47 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 01.

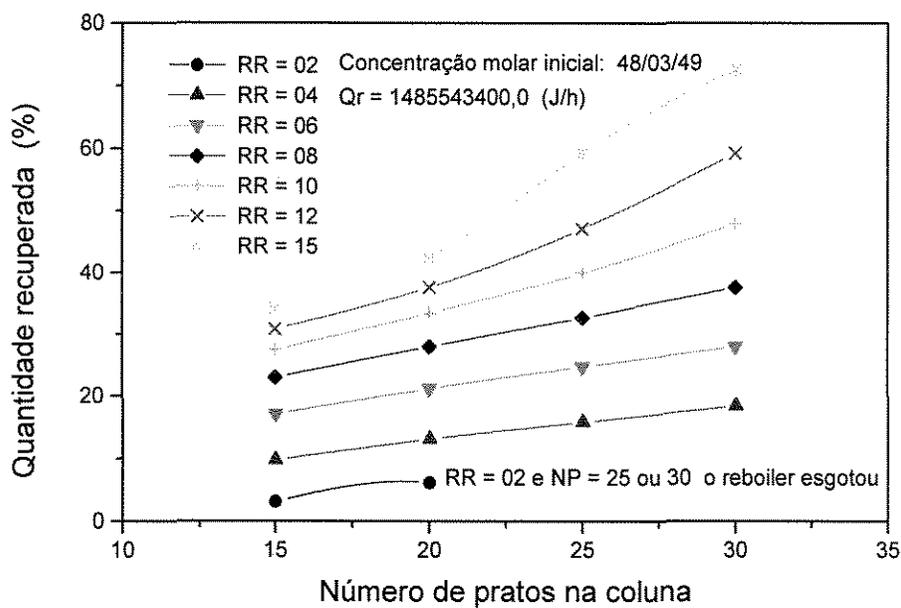
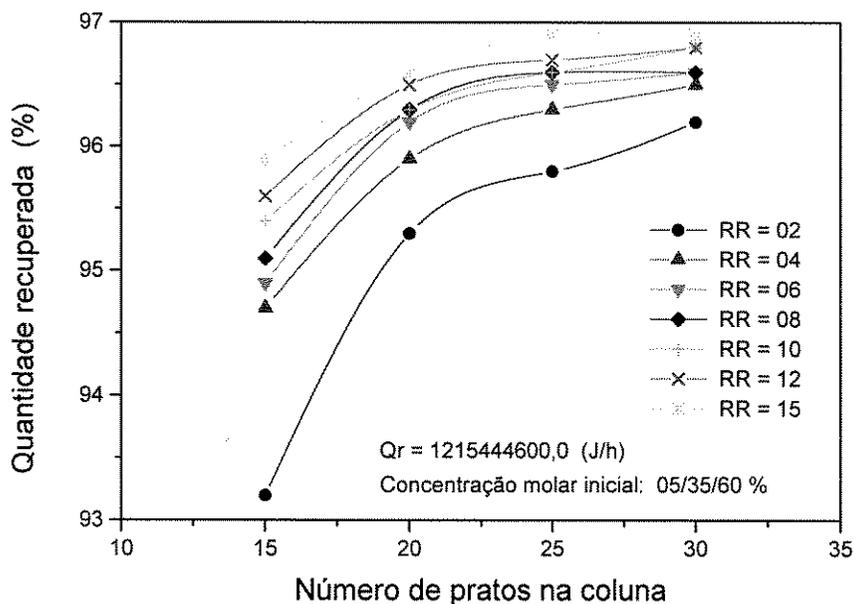


Figura IV.48 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 02.



**Figura IV.49 - Análise da quantidade recuperada no Sistema 03.**

Assim, pelas Figuras IV.45 a IV.49 observa-se que a quantidade de produtos recuperados é influenciada fortemente pela razão de refluxo e pelo número de pratos. Portanto, otimizar a razão de refluxo mais uma vez constitui num ponto fundamental na operacionalidade do processo.

### IV.1.3 - POLÍTICA DE OTIMIZAÇÃO VIA TAXA DE CALOR FORNECIDA AO REFERVEDOR

A variável em análise é a taxa de calor fornecida ao refervedor durante a operação da coluna, ou seja, é a taxa de calor fornecida ao sistema para a destilação completa da mistura líquida nas especificações desejadas. Edgar e Himmelblau (1989) propuseram otimizar a operação da coluna de destilação em batelada utilizando como função objetivo a minimização direta da quantidade de calor fornecido ao refervedor. A análise desta variável é importante para as viabilidades operacional e econômica da coluna de destilação em batelada.

### IV.1.3.1 - ANÁLISE DO TEMPO DE OPERAÇÃO DO PROCESSO

Na política de otimização da coluna de destilação em batelada, via taxa de calor fornecida ao refeedor, o tempo de operação é inversamente proporcional à taxa de calor e segue uma relação não-linear, conforme será visto nas Figuras IV.50 a IV.53.

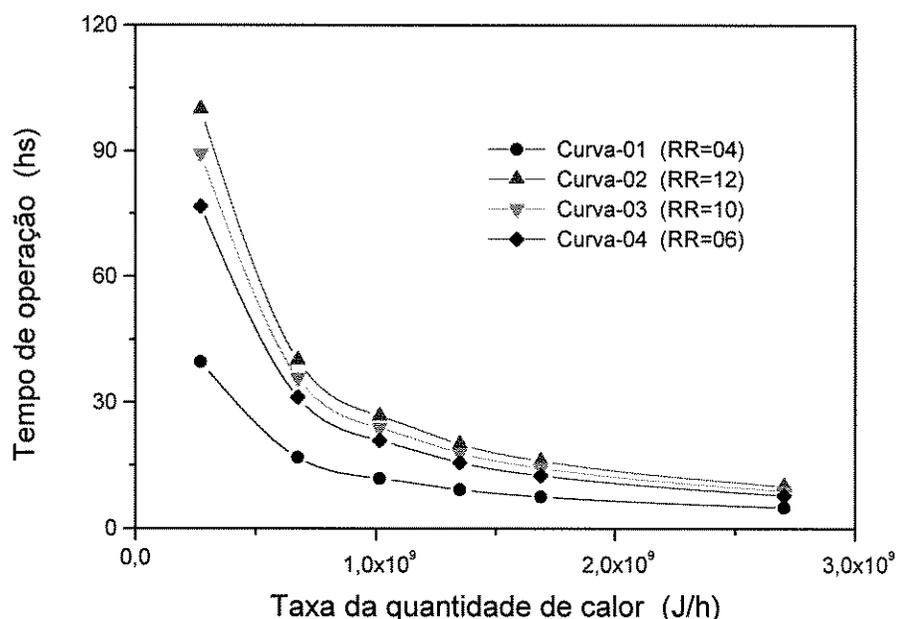


Figura IV.50 - Análise do tempo de operação no Sistema 01.

Tabela IV.10 - Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.50.

Caso	RR	NP	Concentração molar inicial	Pureza
01	04	30	05 / 35 / 60	99 % (99,9)
02	12	20	33,33 / 33,33 / 33,34	95 %
03	10	15	20 / 50 / 30	90 %
04	06	25	10 / 75 / 15	95 %

Obs.: O número entre parênteses é a pureza do produto menos volátil.

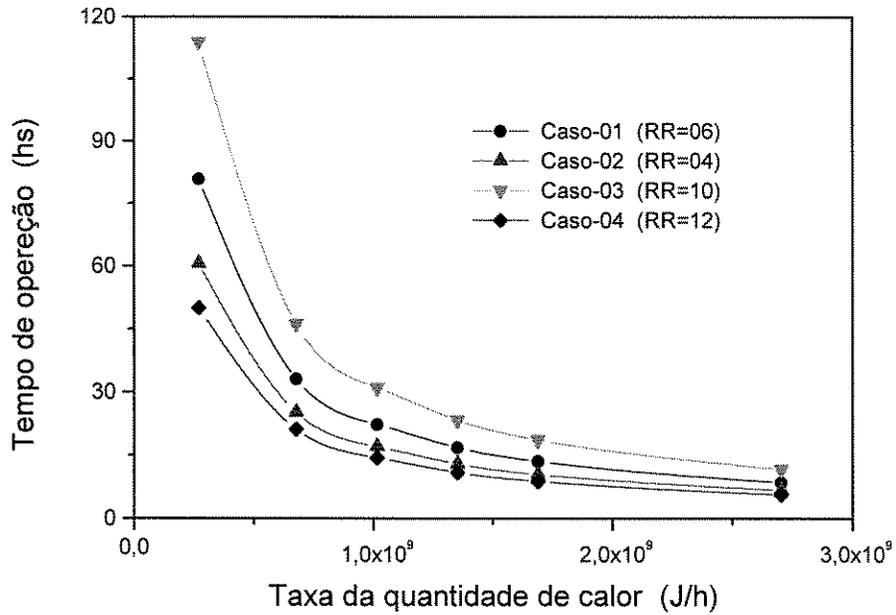


Figura IV.51 - Análise do tempo de operação no Sistema 02.

Tabela IV.11 - Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.51.

Caso	RR	NP	Concentração molar inicial	Pureza
01	06	25	50 / 01 / 49	95 %
02	04	30	49 / 02 / 49	90 %
03	10	20	60 / 00 / 40	95 %
04	12	15	20 / 00 / 80	90 %

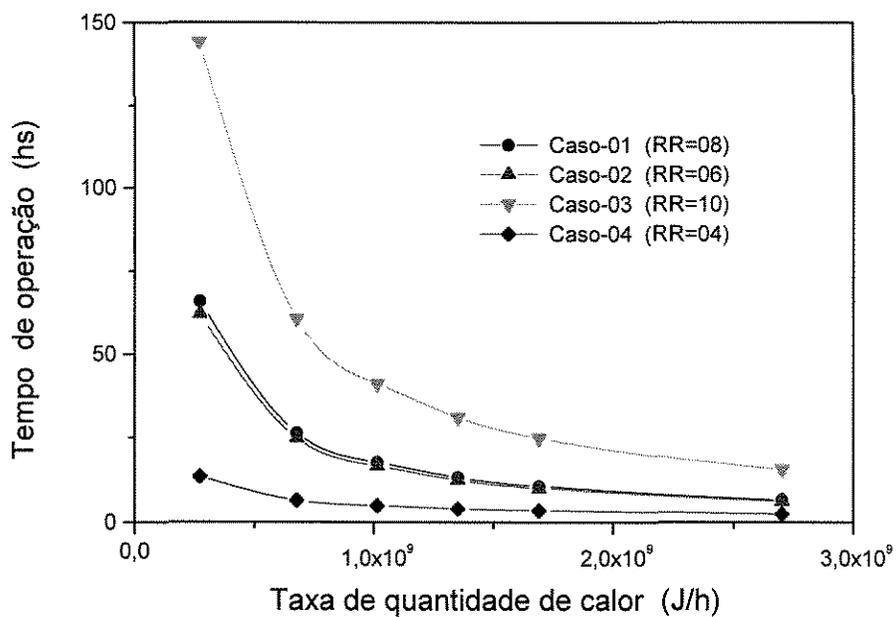
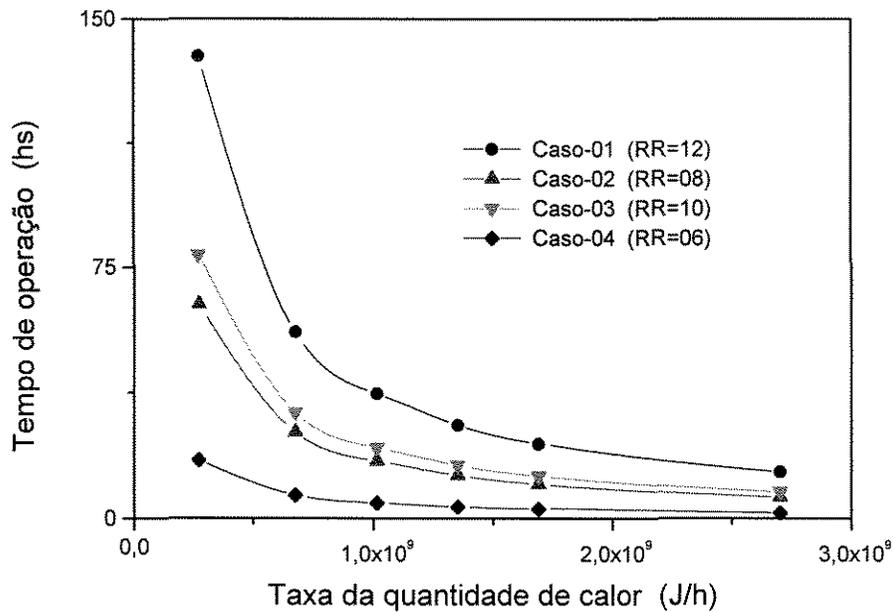


Figura IV.52 - Análise do tempo de operação no Sistema 03.

Tabela IV.12 - Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.52.

Caso	RR	NP	Concentração molar inicial	Pureza
01	08	20	33,33 / 33,33 / 33,34	75 %
02	06	15	20 / 50 / 30	70 %
03	10	30	10 / 75 / 15	75 %
04	04	25	05 / 35 / 60	70 %



**Figura IV.53 - Análise do tempo de operação no Sistema 04.**

**Tabela IV.13 - Parâmetros operacionais considerados nos casos apresentados na Figura IV.53.**

Caso	RR	NP	Concentração molar inicial	Pureza
01	12	15	10 / 75 / 15	99 % (99,9)
02	08	25	33,33 / 33,33 / 33,34	85 %
03	10	20	60 / 05 / 35	99 % (99,9)
04	06	30	15 / 10 / 75	95 %

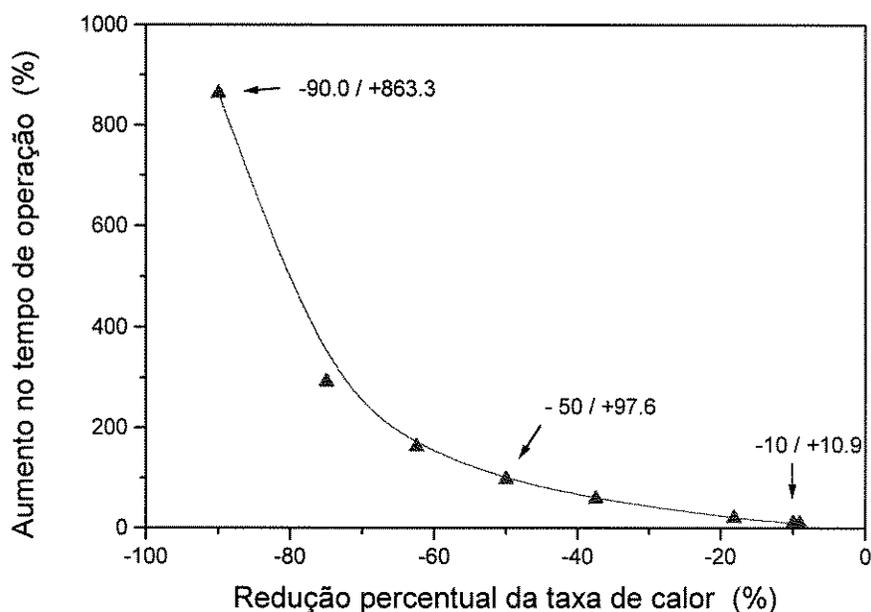
Obs.: O número entre parênteses é a pureza do produto menos volátil.

Nas Figuras IV.50 a 53, observa-se que o comportamento das curvas podem ser divididas aproximadamente em duas regiões distintas. Na primeira, numa região de taxa de calor fornecida ao refeedor que segue uma variação aproximadamente linear e pouco acentuada com relação ao tempo operacional do processo e, na segunda, que segue uma variação bem mais acentuada.

O tempo de operação da coluna de destilação em batelada, onde a taxa de calor fornecida ao refeedor é elevada ( $>5,0E+09$ ), é pouco influenciado para qualquer aumento na

taxa de calor de fornecida ao refervedor. Nesta região haverá a formação de um patamar entre a taxa de calor fornecida ao refervedor e o tempo de operação do processo.

A Figura IV.54 demonstra em termos de variações percentuais médias obtidos, nos quatro sistemas avaliados, a variação percentual de redução da taxa de calor fornecida ao refervedor e a variação percentual de aumento do tempo de operação do processo.



**Figura IV.54 - Análise da variação percentual entre a taxa de calor fornecida ao refervedor e a variação percentual no tempo de operação da coluna.**

A otimização direta da taxa de calor fornecida ao refervedor da coluna, conforme foi proposto por Edgar e Himmelblau (1989), através da sua minimização, não é uma opção viável, pois o tempo de operação do processo aumenta acentuadamente, Figura IV.54, e esta característica não é desejada nos estudos de otimização. Conforme já citado, Farhat et. al. (1991) diz que um dos casos de otimização é a minimização do tempo operacional, ou seja, o caso de mínimo tempo. Portanto, minimizar a taxa de calor é o mesmo que não obedecer a este caso.

No tópico IV.1.3.4 novamente pode-se observar que a redução direta da taxa de calor fornecida ao refervedor não é uma opção viável para os estudos de otimização.

### IV.1.3.2 - ANÁLISE DA PRODUTIVIDADE

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via taxa de calor fornecida ao refeedor, a produtividade do processo é diretamente proporcional à taxa de calor e segue uma relação linear, Figuras IV.55 a IV.58. Em alguns casos, esta linearidade sofreu pequenas variações.

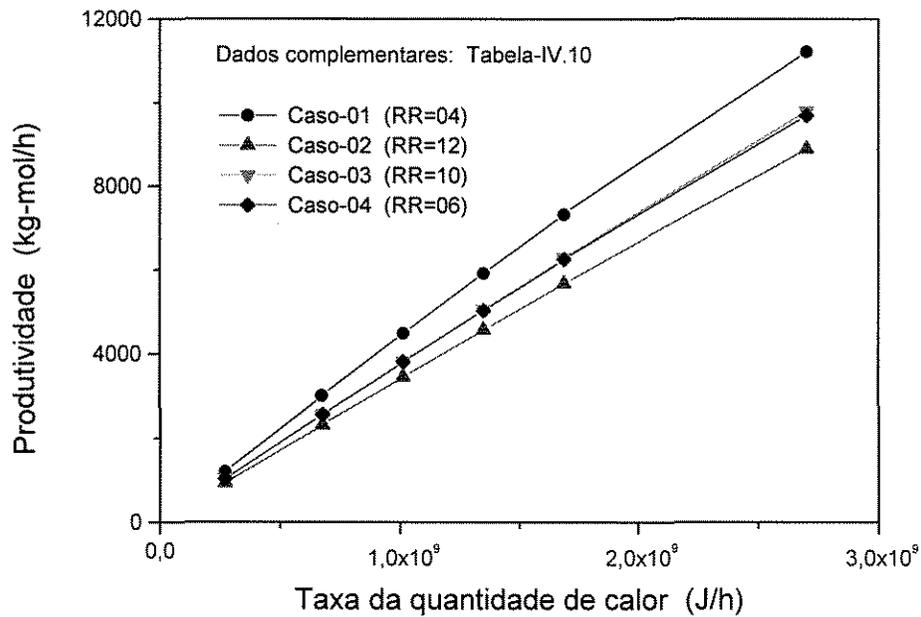


Figura IV.55 - Análise da produtividade no Sistema 01.

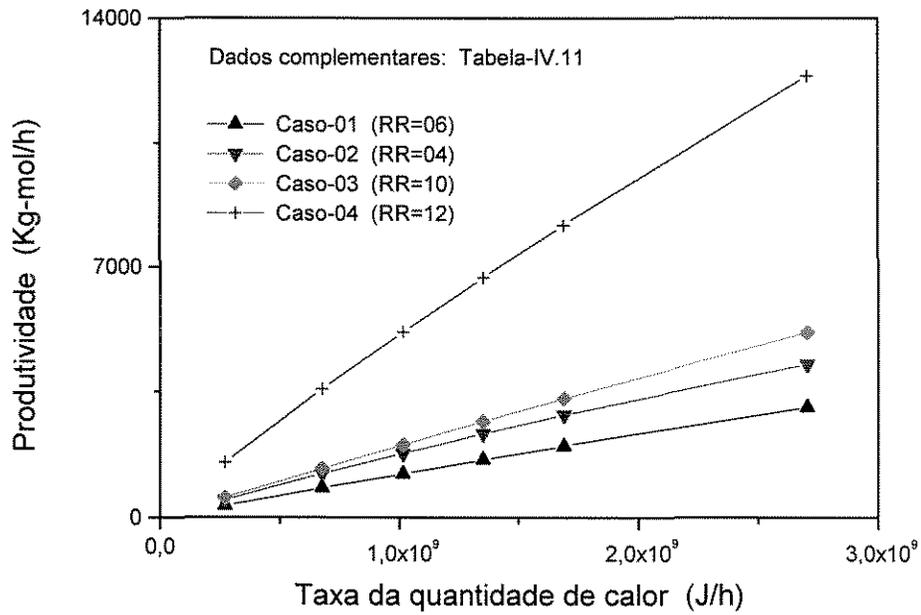


Figura IV.56 - Análise da produtividade no Sistema 02.

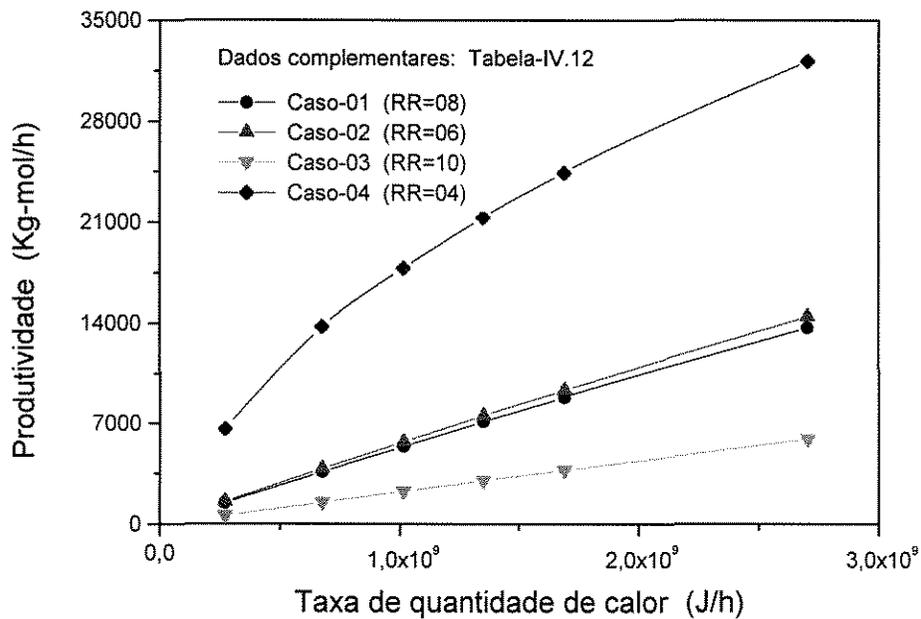
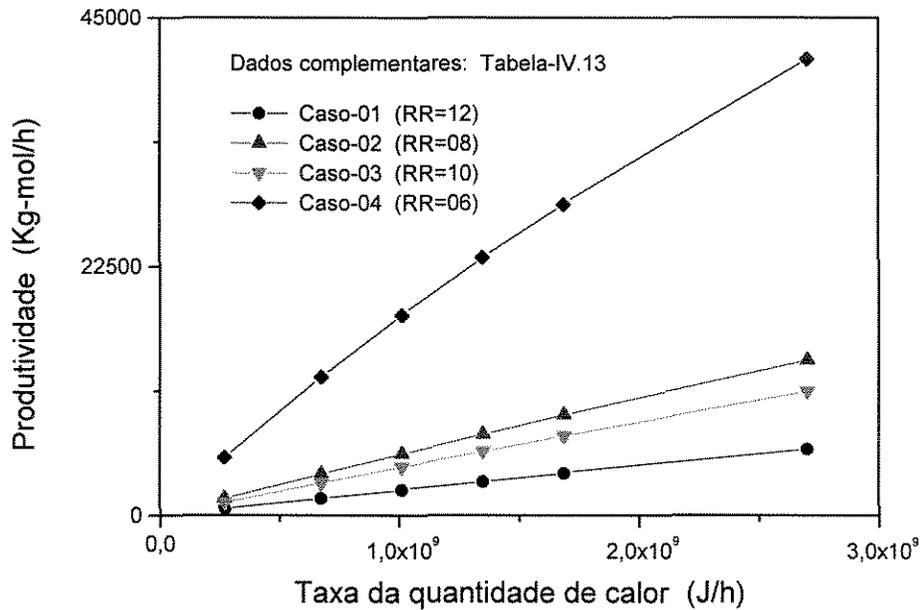
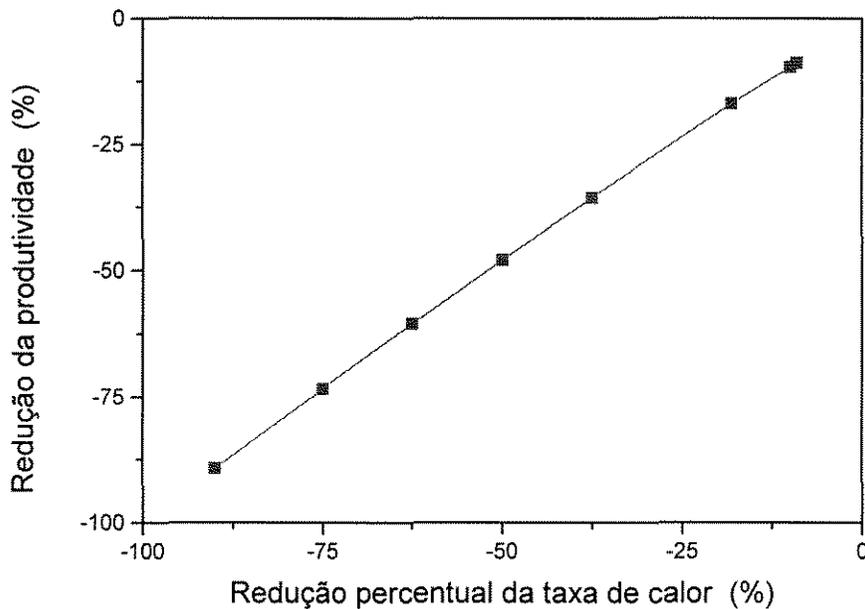


Figura IV.57 - Análise da produtividade no Sistema 03.



**Figura IV.58 - Análise da produtividade no Sistema 04.**

A Figura IV.59 demonstra em termos de variações percentuais médios obtidos, resultados mostrados nas Figuras IV.55 a IV.58, as variações percentuais de redução da taxa de calor fornecida ao refeedor e de produtividade do processo.



**Figura IV.59 - Análise da variação percentual entre a taxa de calor fornecida ao refeedor e a variação na produtividade da coluna.**

Na Figura IV.59, verifica-se que a relação entre a taxa de calor e a produtividade de um sistema pode ser assumido como sendo linear. Assim, a otimização direta da taxa de calor fornecida ao refeedor da coluna reduz a produtividade do processo. Então, novamente conclui-se que a otimização do processo através da redução direta da taxa de calor fornecida ao refeedor não é uma opção viável.

### IV.1.3.3 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE PRODUTO RECUPERADO

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via taxa de calor fornecida ao refeedor, a quantidade de produtos recuperados dentro das especificações desejadas praticamente não se altera com a variação da taxa de calor, Figuras IV.60 a IV.63. A porcentagem total de produtos recuperados sofreu um negativo médio em 0,25%, ou seja, a quantidade de destilado produzido diminuiu na média geral, ocorrência que não é desejada na otimização.

Os valores percentuais indicados nas Figuras IV.60 a IV.63 referem-se à máxima variação percentual observada em cada sistema e, ainda, indica o caso em que ocorreu esta variação.

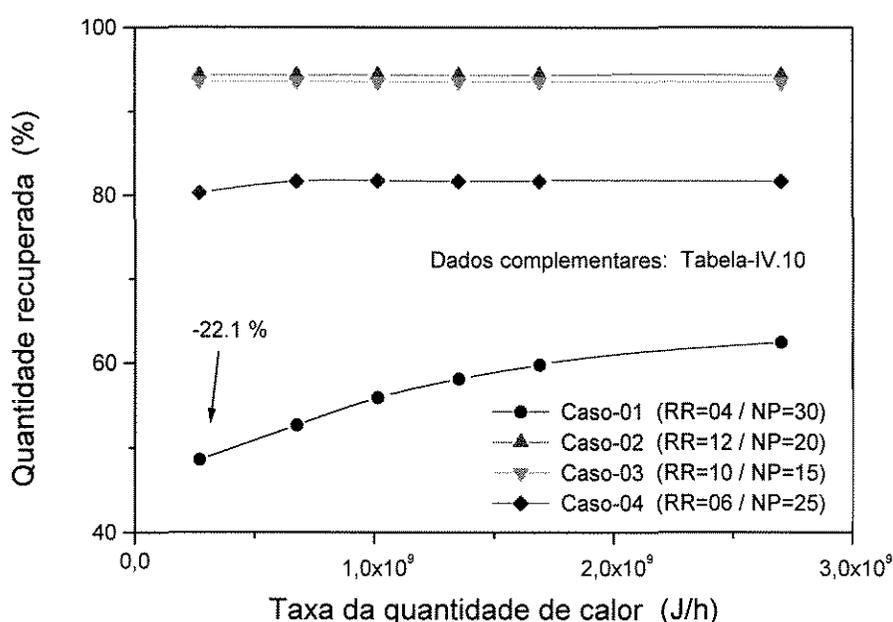


Figura IV.60 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 01.

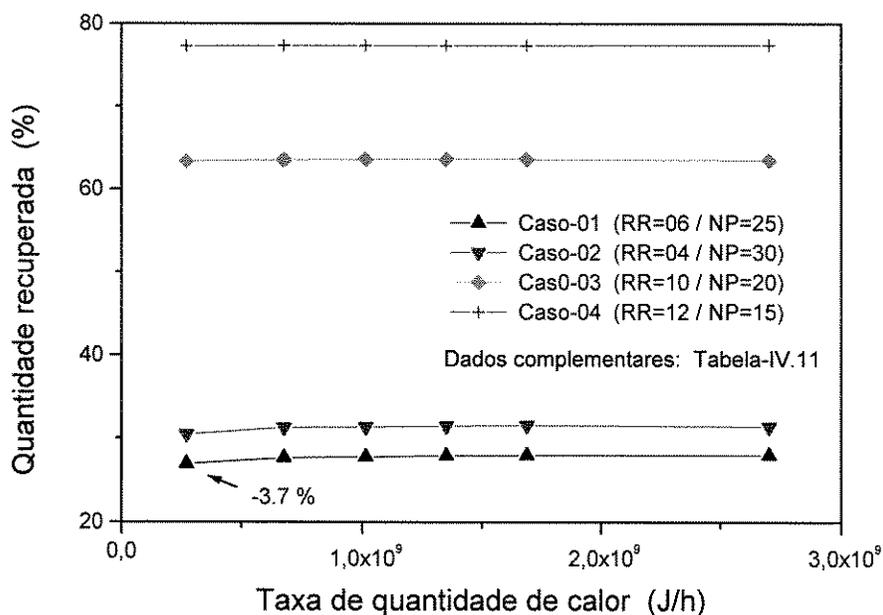


Figura IV.61 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 02.

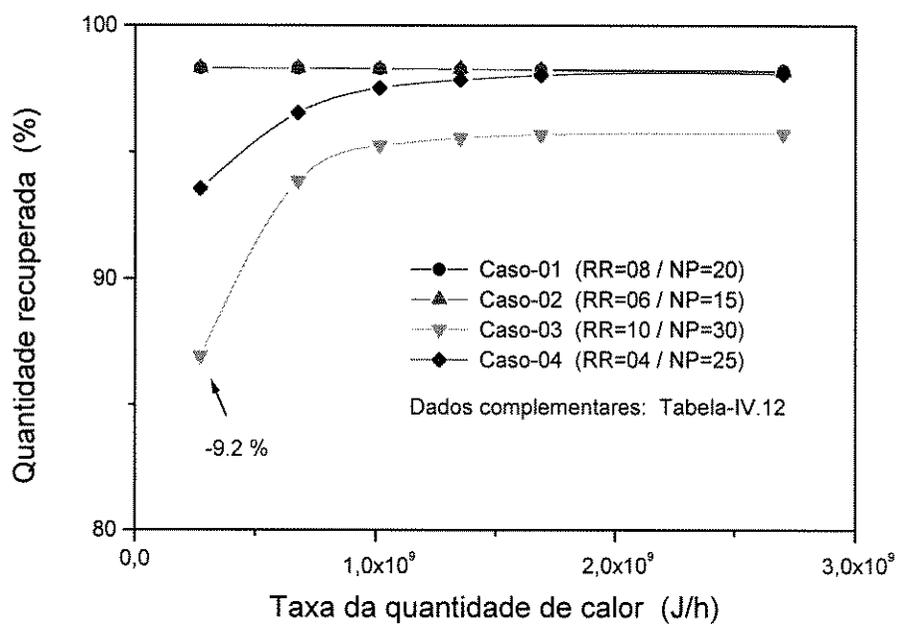
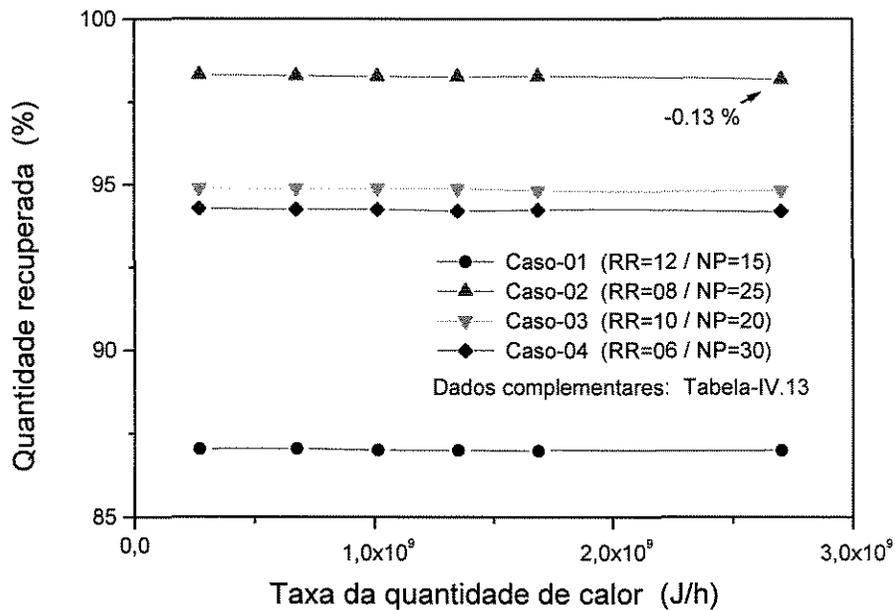


Figura IV.62 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 03.



**Figura IV.63 - Análise da quantidade de produto recuperado no Sistema 04.**

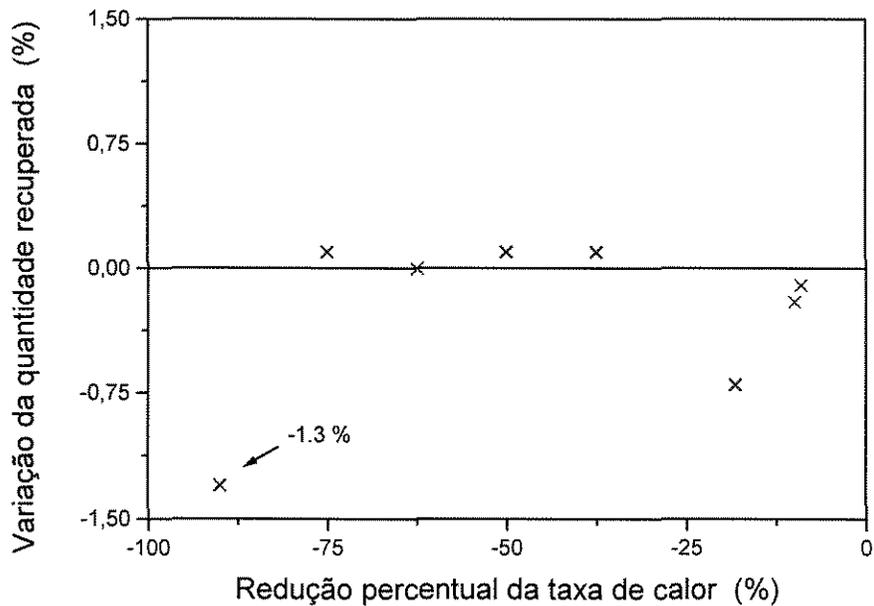
A Tabela IV.14 relata as variações mínimas, máximas e médias observadas na variação percentual da quantidade de produtos recuperados dentro das especificações requeridas em cada um dos sistemas estudados nas Figuras IV.60 a IV.63.

**Tabela IV.14 - Análise das variações percentuais observadas na porcentagem de recuperação dos produtos nos sistemas avaliados.**

Sistema	Varição mínima	Varição máxima	Varição média
01	0,0%	(-) 22,1% *	(-) <0,1% *
02	0,0%	(-) 3,7% *	(-) 0,4% *
03	0,0%	(-) 9,2% *	(-) 0,5% *
04	0,0%	(-) 0,13 % *	<0,1%

\* O sinal negativo indica que a variação foi negativa. Portanto, houve uma queda de produção de destilado

A Figura IV.64 demonstra em termos de variações percentuais médias obtidas, nos quatro sistemas avaliados, Figuras IV.60 a IV.63, a variação percentual de redução da taxa de calor fornecida ao refeedor e a variação percentual da quantidade de produtos recuperados na destilação.



**Figura IV.64 - Análise da variação percentual entre a taxa de calor fornecida ao refeedor e a quantidade de produto recuperado na operação da coluna.**

Assim, a quantidade de produtos recuperados nas especificações requeridas, em geral, não é influenciada pela variação da taxa de calor fornecida e, quando for influenciada as variações são negativas, o que não é desejado. Portanto, nos estudos de otimização no caso de máximo destilado, a variação da quantidade de calor fornecido ao refeedor não é uma opção viável.

#### IV.1.3.4 - ANÁLISE GERAL DA OTIMIZAÇÃO DA TAXA DE CALOR

Resumidamente, nas Tabelas IV.15 e IV.16 são relatadas as variações médias no tempo operacional da coluna, na produtividade, na recuperação total dos produtos nas especificações desejadas e na economia com a quantidade total de calor fornecido ao refeedor da coluna quando a taxa de calor fornecida ao refeedor é reduzida em 20% e 40%, respectivamente.

Os dados apresentados nas Tabelas IV.15 e IV.16 são resultantes dos cálculos de variações relativas entre as simulações dos Casos 01 a 04, apresentados nas Tabelas IV.10

a IV.13 e, as mesmas simulações realizadas, porém, com uma redução da taxa de calor de 20% e 40%, respectivamente.

**Tabela IV.15 - Análise da variação média geral observada quando a taxa de calor é reduzida em 20%.**

Variável analisada	Variação mínima	Variação máxima	Variação média
Tempo operacional	15,9 % (S3)	25,0 % (S4)	23,8 %
Produtividade	(-) 12,5 % (S3)	(-) 19,6 % (S4)	(-) 18,6 %
Recuperação total dos produto	(-) 0,01 % (S4)	(-) 0,3 % (S2)	(-) 0,04 %
Economia com calor	0,0 % (S4)	(-) 7,3 % (S3)	(-) 1,0 %

Nas Tabelas IV.15 e IV.16 as notas entre parênteses indicam em qual sistema foi registrado os valores de mínimo e de máximo, ou seja, (S1) é a ocorrência verificada no Sistema 01, (S2) é a ocorrência verificada no Sistema 02, (S3) é a ocorrência verificada no Sistema 03 e, (S4) é a ocorrência verificada no Sistema 04. O sinal negativo indica que houve uma redução do valor numérico.

Na Tabela IV.15, somente a variável da quantidade de calor economizada é que forneceu resultado favorável à otimização, conforme indicado pela área hachurada. Mesmo resultado foi verificado na Tabela IV.16.

**Tabela IV.16 - Análise da variação média geral observada quando a taxa de calor é reduzida em 40%.**

Variável analisada	Variação mínima	Variação máxima	Variação média
Tempo operacional	41,2 % (S3)	66,6 % (S4)	63,1 %
Produtividade	(-) 26,9 (S3)	(-) 39,4 % (S4)	(-) 37,7 %
Recuperação total dos produto	0,0 % (S1-2-4)	(-) 6,4 % (S1)	(-) 0,5 %
Economia com calor	(-) 0,04 % (S4)	(-) 15,3 % (S3)	(-) 2,1 %

Nota-se que a redução direta da taxa de calor fornecida como foi proposta por Edgar e Himmelblau (1989) através da sua minimização não é viável. Além disto, a otimização do tempo operacional, da produtividade e da quantidade de produtos recuperados não foram verificadas. Somente o caso de custo mínimo foi verificado, entretanto, o lucro com a economia de calor foi inferior à 2,1% na média geral.

---

#### **IV.1.4 - ANÁLISE VIA “HOLDUP” DO PRATO**

A variável otimizadora em análise é o “holdup” líquido nos pratos da coluna, ou seja, é a quantidade de líquido acumulada nos pratos. O “holdup” formado nos estágios de equilíbrio auxilia a transferência de massa e calor entre as correntes de líquido e de vapor.

Converse and Huger (1965) realizaram análises de otimização de colunas de destilação em batelada via efeito do “holdup”.

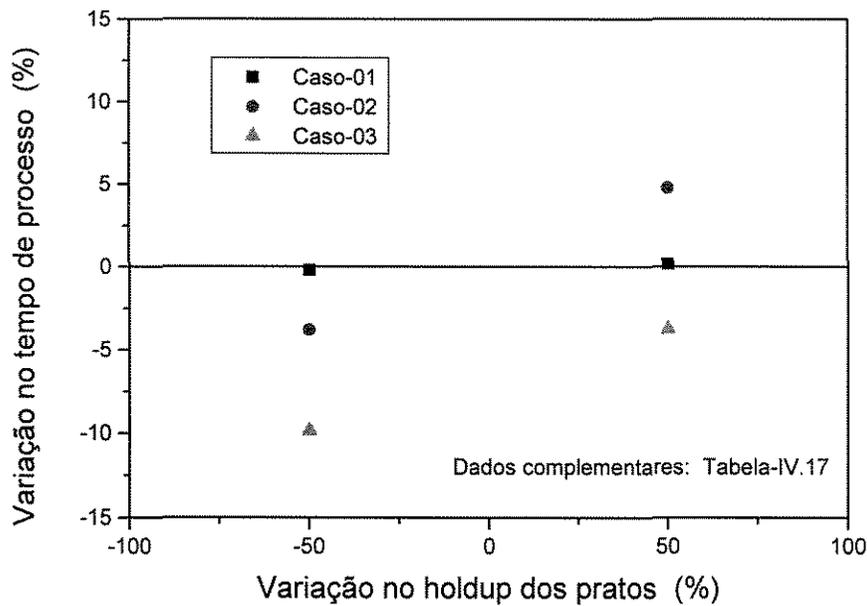
Nos estudos, o “holdup” nos pratos foi considerado constante e igual em todas as simulações devido à sua complexidade de análise.

##### **IV.1.4.1 - ANÁLISE DO TEMPO DE OPERAÇÃO DO PROCESSO**

A análise via “holdup” líquido dos pratos, mostra que o tempo de operação do processo é geralmente proporcional à variação do “holdup” líquido nos pratos. Algumas exceções foram observadas nesta regra.

Nas Figuras IV.65 a IV.68 mostram o comportamento do tempo de operação quando o “holdup” sofre uma variação de (-) 50% e de (+) 50%.

No Sistema 01, mostrado na Figura IV.65, verificou-se que existem casos em que o aumento ou diminuição do “holdup” líquido faz com que o tempo do processo diminua. Na Tabela IV.17 são descritos os dados operacionais para os casos avaliados na Figura IV.65 e, na Tabela IV.18, as variações percentuais são observadas.



**Figura IV.65 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 01.**

**Tabela IV.17 - Dados operacionais para o Sistema 01.**

Caso	NP	RR	Concentração molar inicial	Taxa de calor (J/h)	Pureza (%)
01	20	12	33,33/33,33/33,34	2700988000,0	95,0
02	25	06	10/75/15	2700988000,0	95,0
03	30	04	05/35/60	2700988000,0	99,0

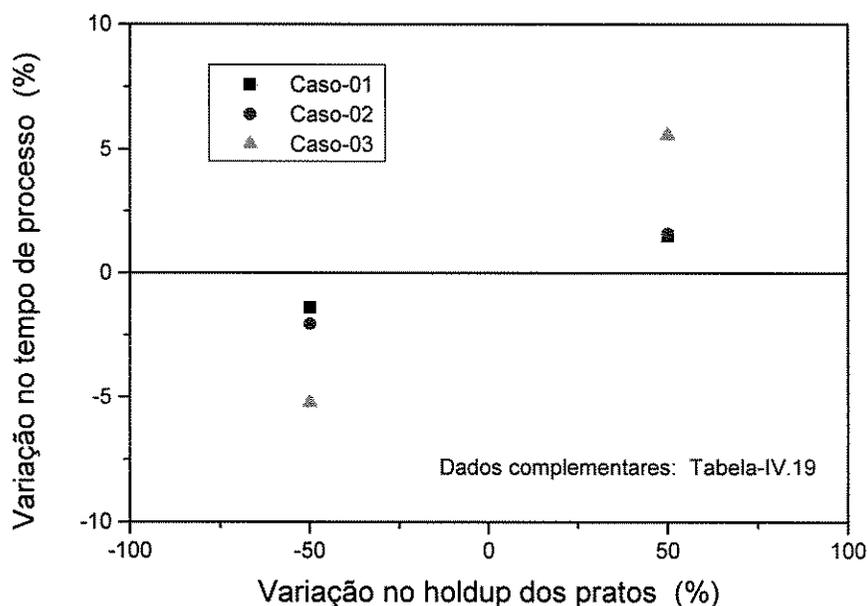
**Tabela IV.18 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 01.**

Varição "holdup"	Limite inferior	Limite superior	Varição média
- 50 %	(-) 9,86 %	(-) 0,20 %	(-) 4,62 %
+ 50 %	(-) 3,75 %	4,80 %	0,42 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

Os limites (inferior e superior) mencionados em todas as tabelas que medem as variações observadas indicam os extremos do intervalo, esquerdo e direito, respectivamente, na qual foram registradas todas as variações percentuais observadas.

No Sistema 02, mostrado na Figura IV.66, verificou-se que a condição de proporcionalidade entre a variação no "holdup" líquido e o tempo do processo é válida. Na Tabela IV.19 são descritos os dados operacionais para os casos avaliados na Figura IV.66 e, na Tabela IV.20, as variações percentuais são observadas.



**Figura IV.66 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 02.**

**Tabela IV.19 - Dados operacionais para o Sistema 02.**

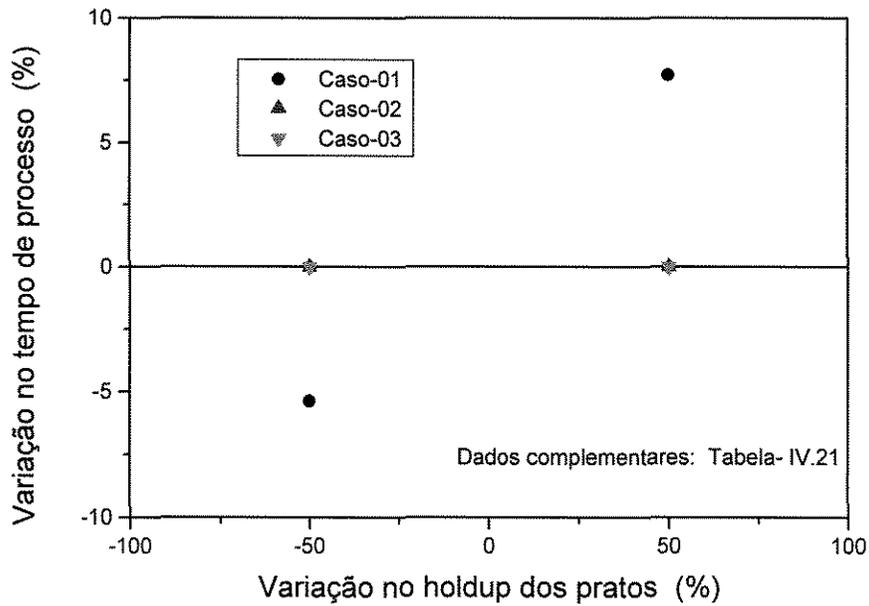
Caso	NP	RR	Concentração molar inicial	Taxa de calor (J/h)	Pureza (%)
01	25	06	50/01/49	2700988000,0	95,0
02	30	04	49/02/49	2700988000,0	90,0
03	15	12	20/00/80	2700988000,0	90,0

**Tabela IV.20 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 02.**

Variação "holdup"	Limite inferior	Limite superior	Variação média
- 50 %	(-) 5,22 %	(-) 1,39 %	(-) 2,88 %
+ 50 %	1,50 %	5,57 %	2,89 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

No Sistema 03, mostrado na Figura IV.67, também verificou-se que a condição de proporcionalidade entre a variação no "holdup" líquido e o tempo do processo é válida. Entretanto, para alguns casos o sistema não apresentou variações na faixa de valores estudados. Na Tabela IV.21 são descritos os dados operacionais para os casos avaliados na Figura IV.67 e, na Tabela IV.22, as variações percentuais são observadas.



**Figura IV.67 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 03.**

**Tabela IV.21 - Dados operacionais para o Sistema 03.**

Caso	NP	RR	Concentração molar inicial	Taxa de calor (J/h)	Pureza (%)
01	30	10	10/75/15	2700988000,0	75,0
02	20	08	33,33/33,33/33,34	2700988000,0	75,0
03	15	06	20/50/30	2700988000,0	70,0

**Tabela IV.22 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 03.**

Varição "holdup"	Limite inferior	Limite superior	Varição média
- 50 %	(-) 5,36 %	0,0 %	(-) 1,79 %
+ 50 %	0,0 %	7,72 %	2,57 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

No Sistema 04, mostrado na Figura IV.68, verificou-se que existem casos em que o aumento ou diminuição do "holdup" líquido faz com que o tempo do processo aumenta. Na Tabela IV.23 são descritos os dados operacionais para os casos avaliados na Figura IV.68 e, na Tabela IV.24, as variações percentuais são observadas.

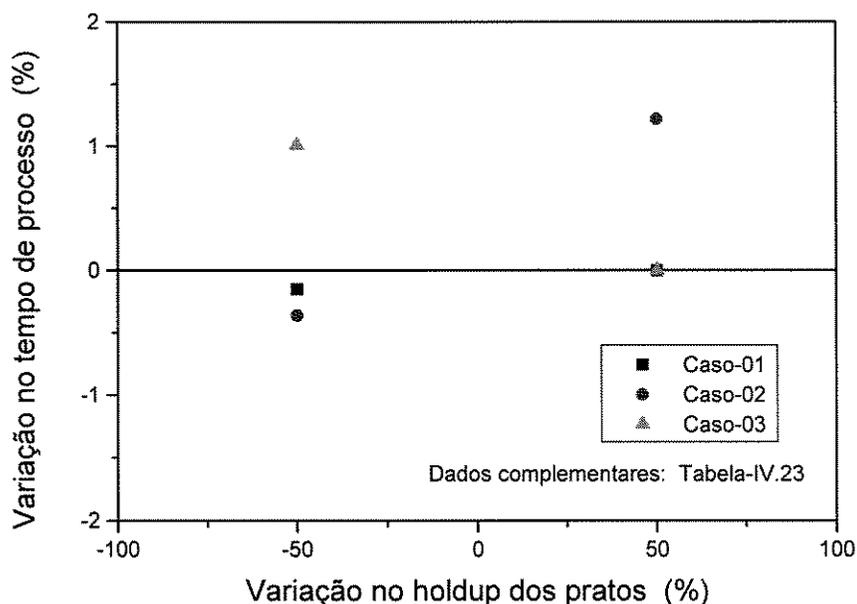


Figura IV.68 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 04.

Tabela IV.23 - Dados operacionais para o Sistema 04.

Caso	NP	RR	Concentração molar inicial	Taxa de calor (J/h)	Pureza (%)
01	25	08	33,33/33,33/33,34	2700988000,0	85,0
02	15	12	10/75/15	2700988000,0	99,0
03	20	10	60/05/35	2700988000,0	99,9

Tabela IV.24 - Variações observadas no tempo do processo no Sistema 04.

Varição "holdup"	Limite inferior	Limite superior	Varição média
- 50 %	(-) 0,36 %	1,01 %	0,41 %
+ 50 %	0,0 %	1,12 %	0,41 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

Conclui-se através das Tabelas IV.18, IV.20, IV.22 e IV.24 que a análise do "holdup" líquido nos pratos e o tempo de processo da coluna são proporcionais. As pequenas variações observadas no tempo de processo dentro desta regra foram inferiores à 3,8%, ou seja, um aumento do "holdup" poderá resultar na queda de produtividade em até 3,8%, portanto, não sendo diretamente proporcional.

#### IV.1.4.2 - ANÁLISE DA PRODUTIVIDADE

A produtividade do processo é geralmente proporcional à variação do “holdup” líquido nos pratos. Algumas exceções foram observadas nesta regra.

No Sistema 01, mostrado na Figura IV.69, verificou-se a validade da regra de proporcionalidade e, na Tabela IV.25, as variações percentuais obtidas são mostradas.

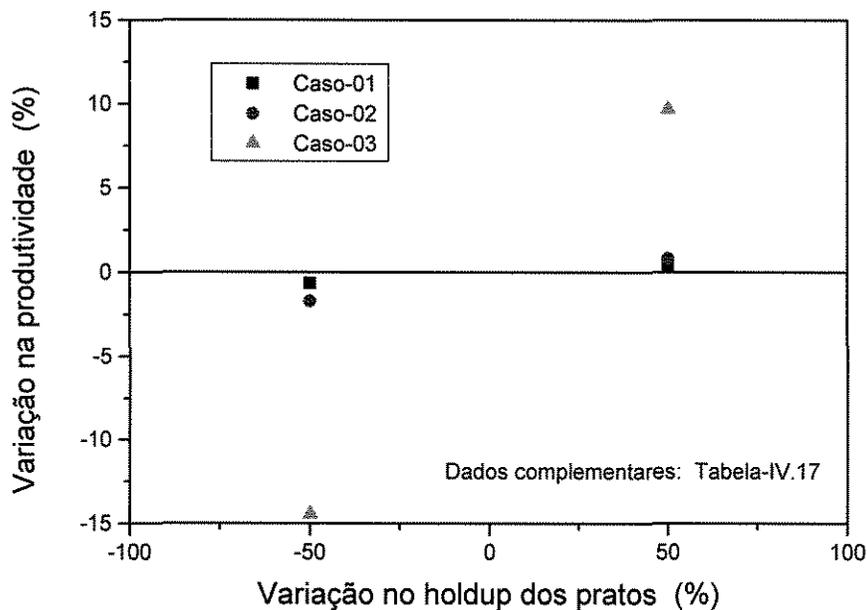


Figura IV.69 - Análise da variação na produtividade no Sistema 01.

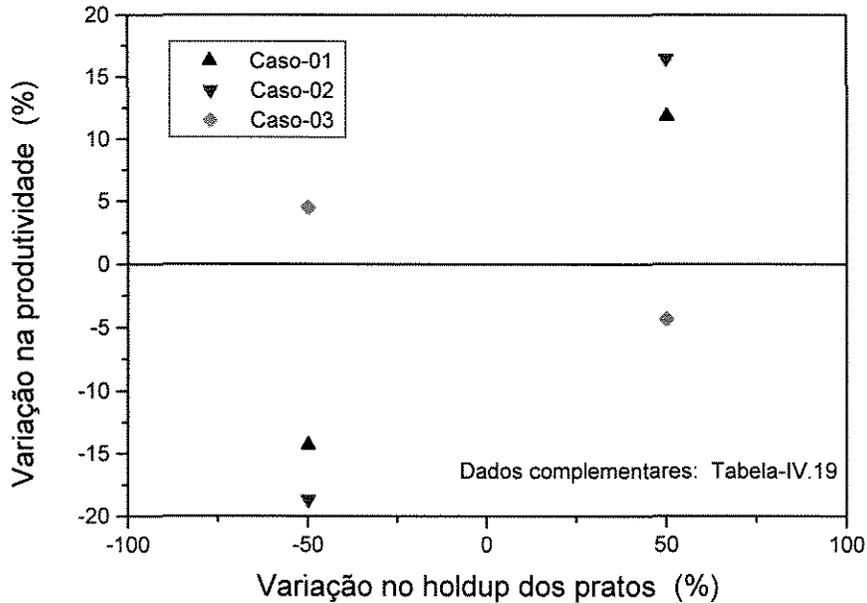
Tabela IV.25 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 01.

Varição “holdup”	Limite inferior	Limite superior	Varição média
- 50 %	(-) 14,45 %	(-) 0,61 %	(-) 5,59 %
+ 50 %	0,38 %	9,68 %	3,63 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

Os resultados da Tabela IV.25 mostram uma variação média pequena mas que poderá atingir níveis significativos na produtividade. Uma análise similar pode ser realizada para a Tabela IV.26.

No Sistema 02, mostrado na Figura IV.70, verificou-se que existem casos em que o comportamento da relação entre “holdup” e produtividade é inversamente proporcional e, na Tabela IV.26, são mostradas as variações percentuais obtidas.



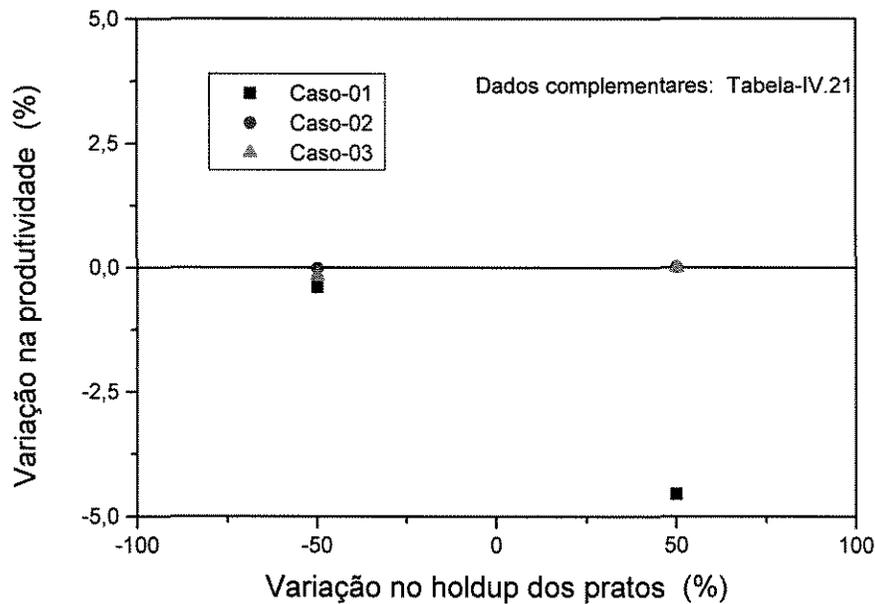
**Figura IV.70 - Análise da variação na produtividade no Sistema 02.**

**Tabela IV.26 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 02.**

Varição “holdup”	Limite inferior	Limite superior	Varição média
- 50 %	(-) 18,67 %	4,51 %	(-) 9,49 %
+ 50 %	(-) 16,48 %	(-) 4,32 %	(-) 8,00 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

No Sistema 03, mostrado na Figura IV.71, verificou-se que existem casos em que o comportamento da relação entre “holdup” e produtividade é inversamente proporcional ou que o comportamento não se altera na variação do “holdup”. Os resultados da Tabela IV.27 mostram uma variação média pequena, e poderá não atingir níveis significativos de redução da produtividade



**Figura IV.71 - Análise da variação na produtividade no Sistema 03.**

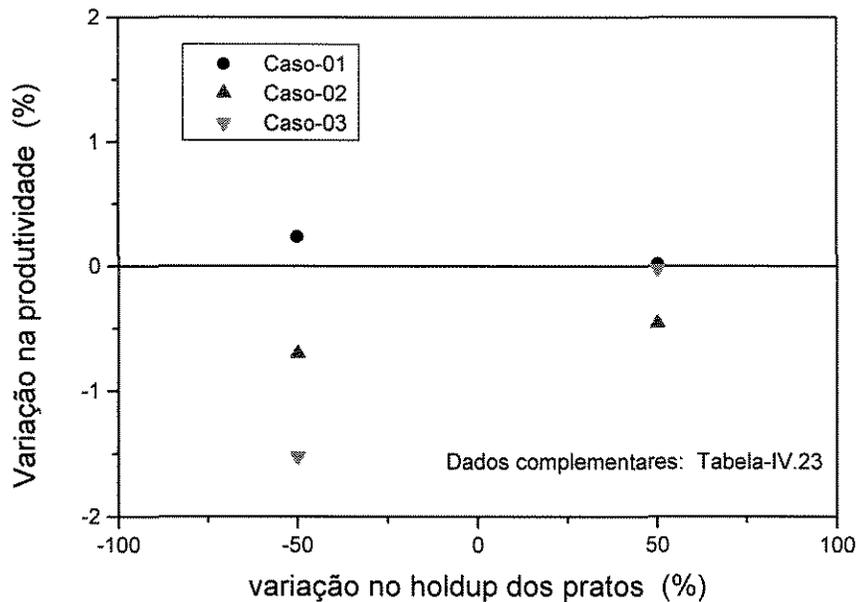
**Tabela IV.27 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 03.**

Varição "holdup"	Limite inferior	Limite superior	Varição média
- 50 %	(-) 0,39 %	(-) 0,01 %	(-) 0,19 %
+ 50 %	(-) 4,55 %	(-) 0,02 %	(-) 1,51 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

Os resultados da Tabela IV.27 mostram uma variação média relativamente pequeno, ou seja, dependendo do caso em análise, a variação do "holdup" não influencia na produtividade. Uma análise similar pode ser realizada para a Tabela IV.28.

No Sistema 04, mostrado na Figura IV.72, verificou-se que existem casos em que o comportamento da relação entre "holdup" e produtividade é inversamente proporcional. Os resultados da Tabela IV.28 mostram uma variação pequena e que poderá não atingir níveis de redução na variação da produtividade.



**Figura IV.72 - Análise da variação na produtividade no Sistema 04.**

**Tabela IV.28 - Variações observadas na produtividade do processo no Sistema 04.**

Variação holdup"	Limite inferior	Limite superior	Variação média
- 50 %	(-) 1,52 %	0,24 %	(-) 0,66 %
+ 50 %	(-) 0,46 %	0,02 %	(-) 0,15 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica que houve uma redução no tempo operacional.

Conclui-se através da análise do “holdup” líquido nos pratos que a produtividade do processo não apresenta nenhuma relação com a variação do “holdup” líquido do prato.

#### **IV.1.4.3 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE PRODUTO RECUPERADO**

A quantidade de produto recuperado nas especificações requeridas é geralmente proporcional à variação do “holdup” líquido nos pratos. As únicas exceções observadas à esta regra foram verificadas no Sistema 04, entretanto, as variações se mantiveram entre uma queda de 1,05% e um aumento de 0,69% na recuperação total de produtos. Assim, esta variação é relativamente pequena quando comparada à obtida na variação do “holdup”, que pelas análises efetuadas foram registradas uma queda máxima de

22,12% e um aumento máximo em 18,32% na quantidade total de produtos recuperados. Na Tabela IV.29 é avaliada a influência da variação do “holdup” sobre a quantidade de produtos recuperados.

**Tabela IV.29 - Análise da variação percentual da quantidade de produto recuperado no processo quando o “holdup” líquido do prato sofre uma variação.**

Sistema	Variação “holdup”	Limite inferior	Limite superior	Variação média
01	- 50 %	(-) 22,12 %	(-) 0,76 %	(-) 9,36 %
	+ 50 %	0,53 %	6,07 %	4,0 %
02	- 50 %	(-) 20,14 %	(-) 0,5 %	(-) 12,01 %
	+ 50 %	0,52 %	18,32 %	10,76 %
03	- 50 %	(-) 5,52 %	(-) 0,01 %	(-) 1,90 %
	+ 50 %	0,0 %	2,63 %	0,88 %
04	- 50 %	(-) 1,05 %	0,0 %	(-) 0,53 %
	+ 50 %	(-) 0,02 %	0,69 %	0,23 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica uma redução da quantidade de produto recuperado.

Resumidamente, através de uma análise geral da Tabela IV-29, conclui-se que uma queda do “holdup” líquido do prato diminui a eficiência de troca de massa e de calor entre as fases nos estágios de equilíbrio e, conseqüentemente, a quantidade de produto recuperado diminui. Caso contrário, um aumento do “holdup” aumentará a eficiência de troca e, conseqüentemente, a quantidade de produto recuperado aumenta.

#### **IV.1.4.4 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE CALOR FORNECIDO AO REFERVEDOR**

A quantidade de calor fornecido ao refervedor é diretamente proporcional ao tempo de processo, conforme mencionado no início do tópico IV.1, portanto, se faz necessário avaliar o seu comportamento junto à variação do “holdup” líquido do prato. Na Tabela IV.30 é avaliada a influência da variação do “holdup” sobre a quantidade de calor fornecido ao refervedor.

**Tabela IV.30 - Análise da variação percentual da quantidade de calor total fornecido ao refeedor quando o “holdup” de líquido do prato da coluna sofre uma variação.**

Sistema	Variação “holdup”	Limite inferior	Limite superior	Variação média
01	- 50 %	(-) 8,99 %	(-) 0,15 %	(-) 2,20 %
	+ 50 %	(-) 3,30 %	11,16 %	2,67%
02	- 50 %	(-) 4,80 %	(-) 1,27 %	(-) 2,63 %
	+ 50 %	1,46 %	5,07 %	2,70 %
03	- 50 %	(-) 5,16 %	0,0 %	(-) 1,72 %
	+ 50 %	0,0 %	7,53 %	2,51 %
04	- 50 %	(-) 0,24 %	0,99 %	0,13 %
	+ 50 %	0,0 %	1,16 %	0,39 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica uma redução da quantidade de produto recuperado.

A complexidade na relação entre “holdup” líquido do prato e a quantidade total de calor fornecido ao refeedor justifica, mais uma vez, a não utilização do “holdup” como variável otimizadora. Entretanto, de uma forma geral, pode-se atribuir uma relação de proporcionalidade entre o “holdup” líquido e a quantidade de calor total fornecido ao refeedor. A exceção foi novamente verificada no Sistema 04 com uma variação média de 0,13% contra a variação média de 1,72%, no mínimo, para os demais sistemas.

#### IV.1.5 – ANÁLISE VIA “HOLDUP” DO CONDENSADOR

A variável em análise é o “holdup” líquido no condensador da coluna, ou seja, é a quantidade de líquido acumulado no condensador-acumulador.

##### IV.1.5.1 - ANÁLISE DO TEMPO DE OPERAÇÃO DO PROCESSO

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada, via “holdup” líquido do condensador, o tempo de operação para as várias simulações do processo manteve as seguintes relações:

- Se na diminuição do “holdup” do condensador o tempo operacional aumentar, no aumento do “holdup” o tempo do processo diminui;

• Se na diminuição do “holdup” do condensador o tempo operacional diminuir, no aumento do “holdup” o tempo do processo aumenta;

Nas Figuras IV.73 a IV.76 são verificadas estas regras, entretanto, no Sistema-04 verifica uma exceção, mas a variação de 0,14% não foi muito significativa quando comparada aos demais resultados obtidos.

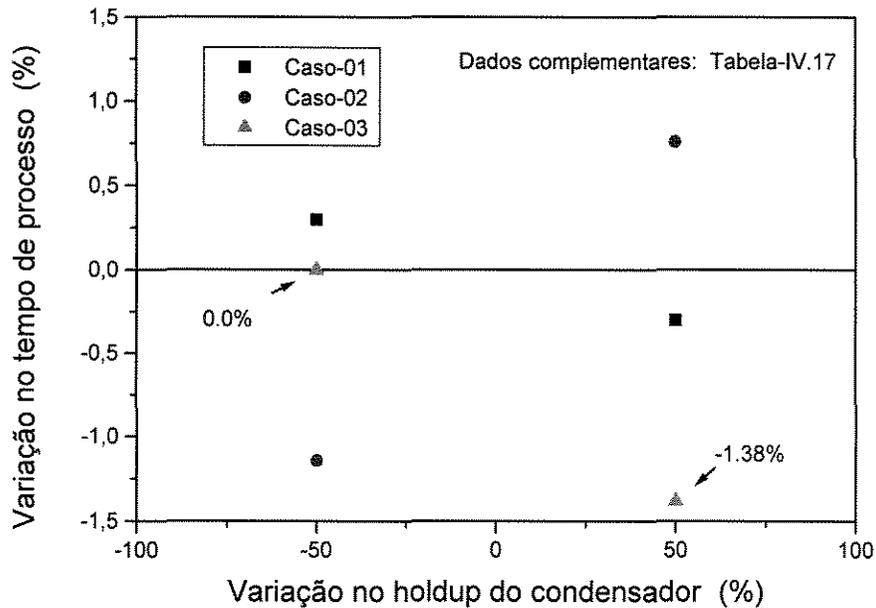


Figura IV.73 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 01.

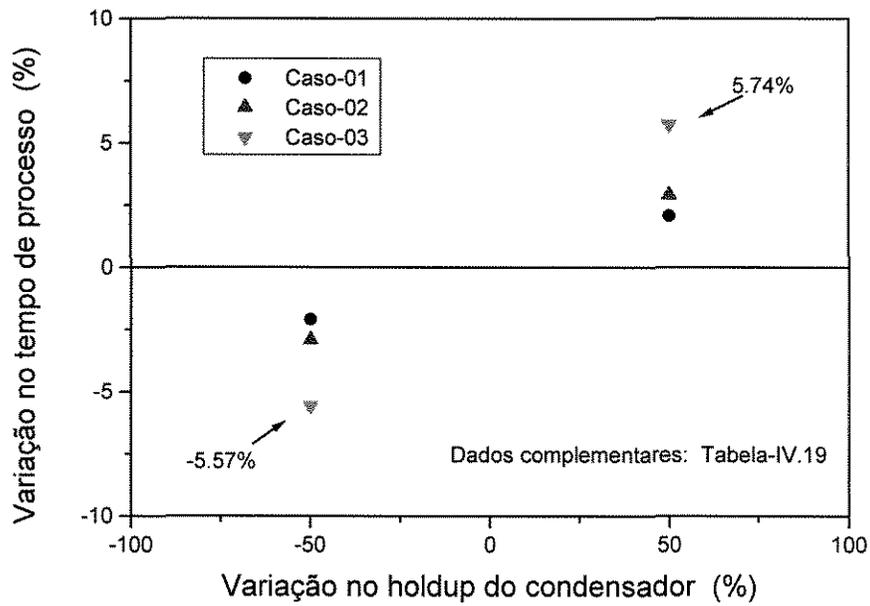


Figura IV.74 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 02.

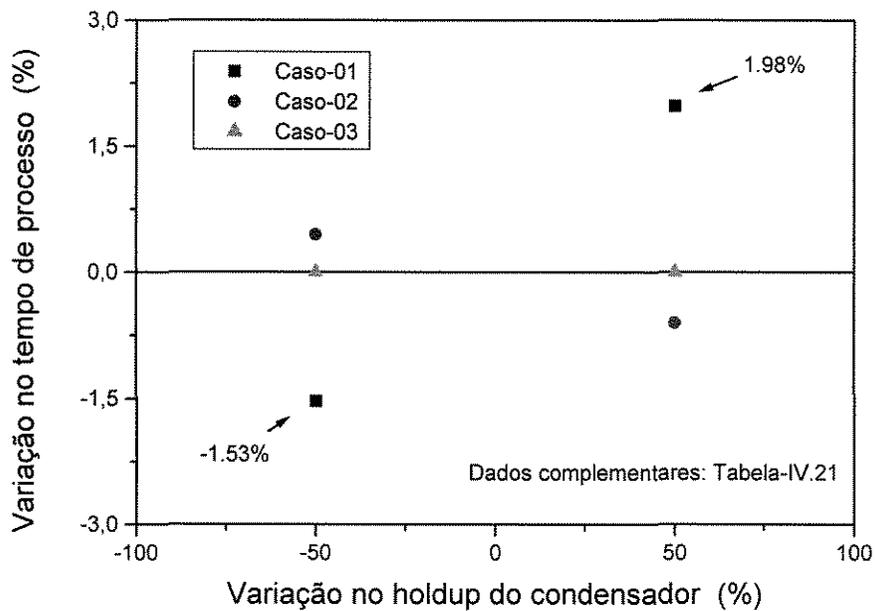
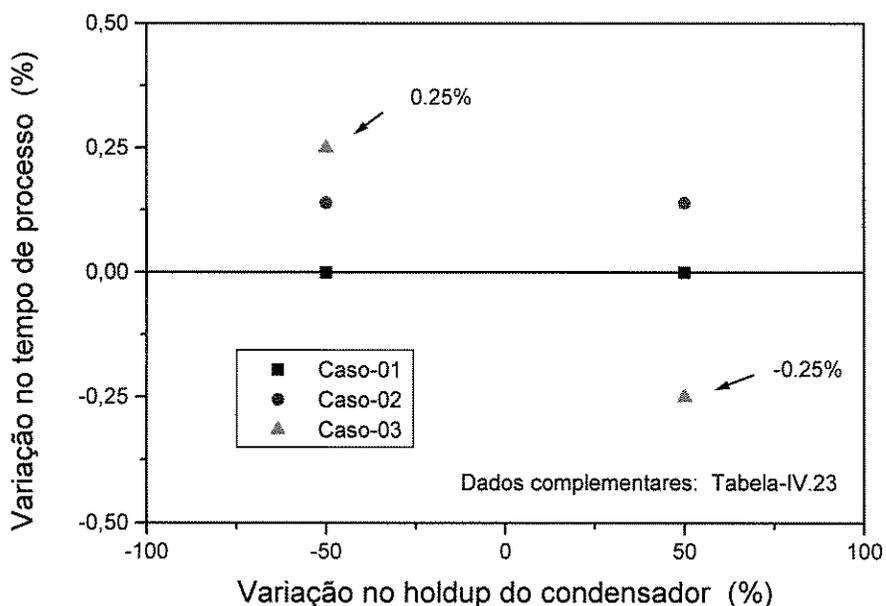


Figura IV.75 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 03.

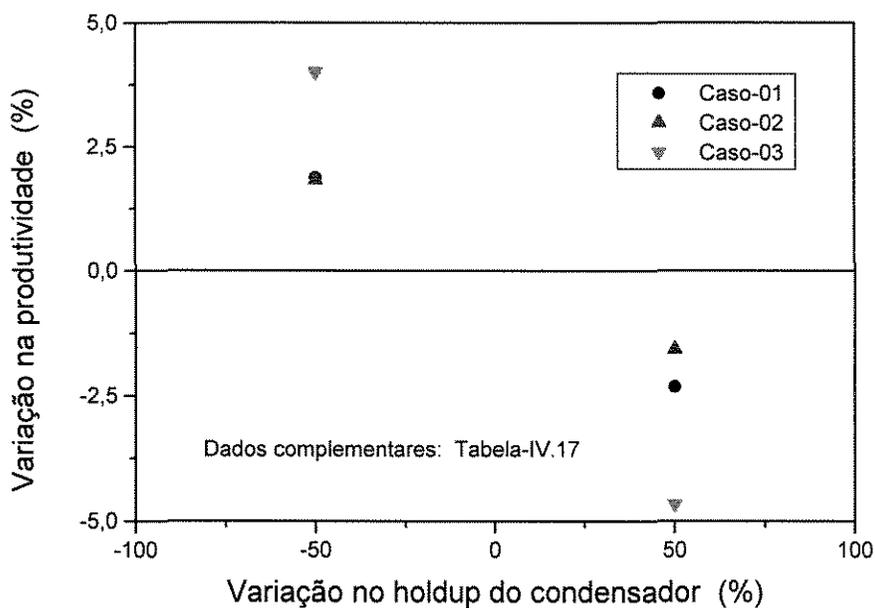


**Figura IV.76 - Análise da variação do tempo de processo no Sistema 04.**

Nos estudos em otimização o “holdup” no condensador será considerado, à priori, constante e igual em todas as simulações avaliadas. Contudo, a regra de reduzir a carga molar do “holdup” do condensador para se obter um menor tempo de processo poderá ser empregada no processo de otimização conforme observado nas Figuras IV.73 a IV.76.

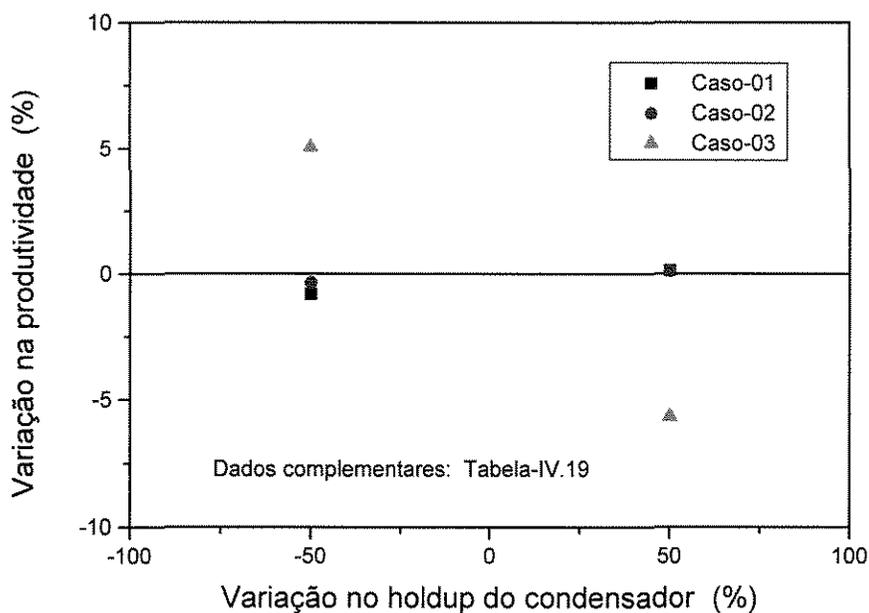
#### **IV.1.5.2 - ANÁLISE DA PRODUTIVIDADE**

Na análise da coluna de destilação multicomponente em batelada, via “holdup” líquido do condensador, a produtividade do processo tem uma relação inversamente proporcional, conforme as Figuras IV.77 a IV.80.



**Figura IV.77 - Análise da variação na produtividade no Sistema 01.**

No Sistema 02 são verificadas algumas exceções, entretanto, as variações verificadas foram inferiores a variação absoluta de 0,8% e, portanto, é pequena quando comparada aos 4,66%, no mínimo, verificado nos outros casos. Assim, a relação de inversamente proporcional ainda pode ser considerada.



**Figura IV.78 - Análise da variação na produtividade no Sistema 02.**

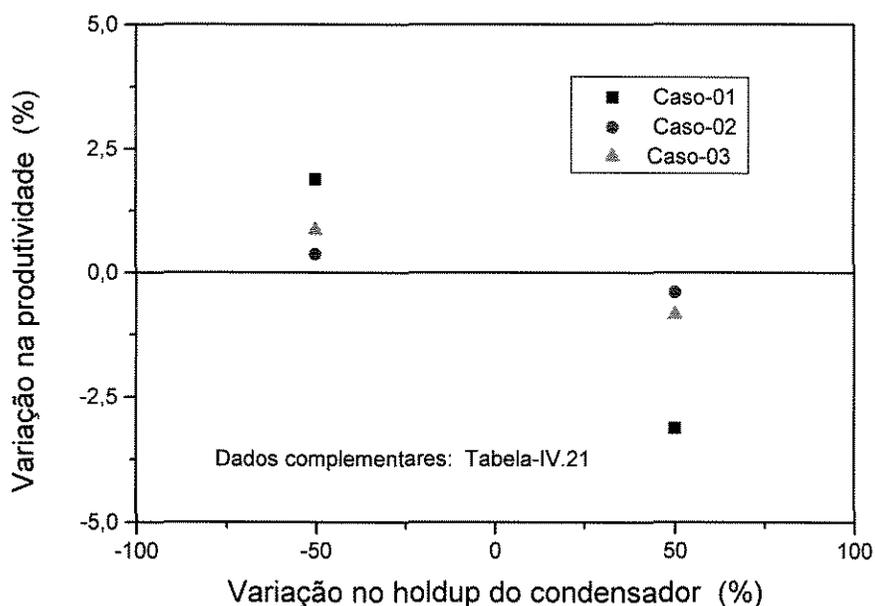


Figura IV.79 - Análise da variação na produtividade no Sistema 03.

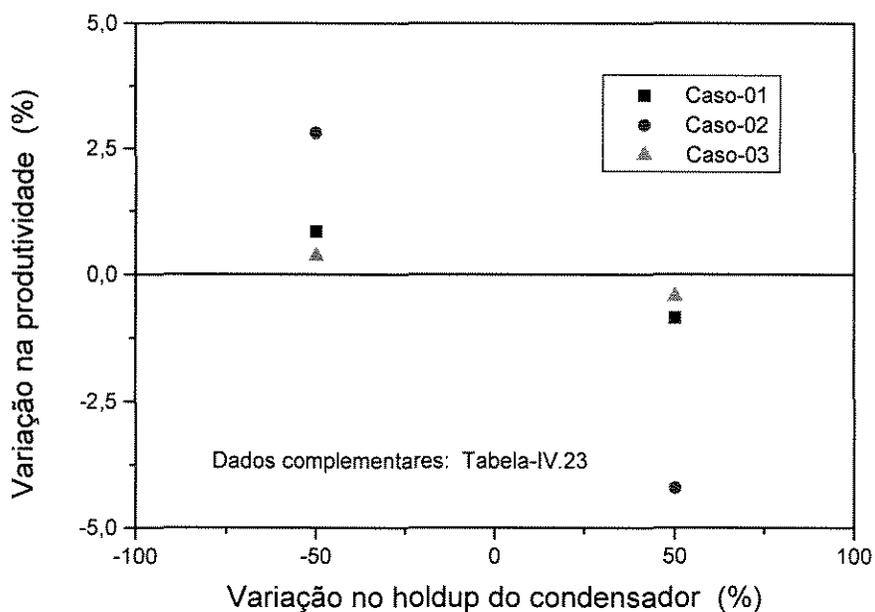


Figura IV.80 - Análise da variação na produtividade no Sistema 04.

Conclui-se através das Figuras IV.77 a IV.80 que o “holdup” líquido do condensador e a produtividade mantêm uma relação sempre de proporcionalidade inversa e,

nos casos em que isto não ocorreu o máximo foi de 0,8%. Assim, para os sistemas avaliados a consideração de proporcionalidade inversa poderá ser empregada.

#### IV.1.5.3 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE PRODUTO RECUPERADO

Na análise da coluna de destilação multicomponente em batelada, via “holdup” líquido do condensador, a quantidade de produto recuperado tem uma relação complexa conforme mostrado na Tabela IV.31.

**Tabela IV.31 - Análise da variação percentual da quantidade de produto recuperado quando o “holdup” de líquido do condensador da coluna sofre uma variação.**

Sistema	Varição “holdup”	Limite inferior	Limite superior	Varição média
01	- 50 %	0,82 %	4,02 %	2,34 %
	+ 50 %	(-) 5,79 %	(-) 0,80 %	(-) 3,07%
02	- 50 %	(-) 3,06 %	(-) 0,28 %	(-) 2,04 %
	+ 50 %	0,43 %	2,84 %	1,80 %
03	- 50 %	0,42 %	0,86 %	0,71 %
	+ 50 %	(-) 0,86 %	1,78 %	0,02 %
04	- 50 %	0,85 %	2,92 %	1,45 %
	+ 50 %	(-) 4,09 %	(-) 0,62 %	(-) 1,85 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica uma redução da quantidade de produto recuperado.

Na Tabela IV.31, nos Sistemas 01 e 04 a relação entre a quantidade de produto recuperado é inversamente proporcional ao “holdup” líquido do condensador. No Sistema 02, a relação é diretamente proporcional e, no Sistema 03, a relação não está definida, o que demonstra a complexidade desta relação.

#### IV.1.5.4 - ANÁLISE DA QUANTIDADE DE CALOR FORNECIDO AO REFERVEDOR

Na política de otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada via “holdup” líquido do condensador a quantidade de calor fornecido ao refervedor é uma relação complexa, conforme Tabela IV.32.

**Tabela IV.32 - Análise da variação percentual da quantidade de calor total fornecido ao refeedor quando o “holdup” de líquido do condensador da coluna sofre uma variação.**

Sistema	Variação “holdup”	Limite inferior	Limite superior	Variação média
01	- 50 %	0,0 %	5,26 %	1,86 %
	+ 50 %	(-) 1,20 %	7,16 %	1,88 %
02	- 50 %	(-) 5,06 %	(-) 2,00 %	(-) 3,26 %
	+ 50 %	2,00 %	5,33 %	3,35 %
03	- 50 %	(-) 1,44 %	0,0 %	(-) 0,33 %
	+ 50 %	(-) 0,46 %	5,05 %	1,53 %
04	- 50 %	0,0 %	0,20 %	0,11 %
	+ 50 %	(-) 0,20 %	0,0 %	(-) 0,03 %

Obs.: O sinal negativo entre parênteses indica uma redução da quantidade de produto recuperado.

Na Tabela IV.32, a complexidade na relação entre “holdup” líquido do condensador e a quantidade total de calor fornecido ao refeedor justifica, mais uma vez, a não utilização do “holdup” como variável a ser otimizada. De fato, o “holdup” é uma variável intrínseca do projeto e de variáveis operacionais.

#### IV.1.6 – ANÁLISE VIA COMBINAÇÃO DOS “HOLDUP’S”

As variáveis em análise são os “holdup’s” de líquido nos pratos e no condensador combinados. Nas Tabelas IV.33 a 36 observam-se as variações percentuais no tempo de operação do processo, na produtividade, na quantidade de produtos recuperados e a quantidade de calor total fornecido ao refeedor, respectivamente, para cada um dos sistemas em estudo e para cada caso escolhido para análise. Nas áreas hachuradas estão destacadas as simulações em que foram obtidas melhorias no desempenho do processo para as quatro variáveis otimizadas.

**Tabela IV.33 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.**

<b>SISTEMA - 01</b>						
Caso	HN	HC	Tempo	Produtividade	Recuperação	Calor
01	- 50 %	- 50 %	0,0 %	1,10 %	1,09 %	0,0 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 0,3 %	(-) 2,87 %	(-) 3,18 %	(-) 0,31 %
	+ 50 %	- 50 %	0,79 %	2,26 %	3,05 %	0,79 %
	+ 50 %	+ 50 %	(-) 0,2 %	(-) 2,12 %	(-) 2,28 %	(-) 0,15 %
02	- 50 %	- 50 %	(-) 4,42 %	(-) 0,27 %	(-) 4,42 %	1,89 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 3,41 %	(-) 3,17 %	(-) 6,24 %	2,95 %
	+ 50 %	- 50 %	3,28 %	2,48 %	5,73 %	9,68 %
	+ 50 %	+ 50 %	6,94 %	(-) 1,53 %	4,91	13,26 %
03	- 50 %	- 50 %	(-) 14,79 %	(-) 13,90 %	(-) 25,50 %	(-) 13,47 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 1,78 %	(-) 15,33 %	(-) 16,60 %	(-) 1,50 %
	+ 50 %	- 50 %	(-) 2,76 %	14,09 %	11,37 %	(-) 2,40 %
	+ 50 %	+ 50 %	(-) 4,73 %	4,39 %	0,02 %	(-) 4,20 %

Nota: O sinal negativo indica que houve redução no valor numérico da variável.

**Tabela IV.34 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.**

<b>SISTEMA - 02</b>						
Caso	HN	HC	Tempo	Produtividade	Recuperação	Calor
01	- 50 %	- 50 %	(-) 3,82 %	(-) 15,00 %	(-) 18,08 %	(-) 3,64 %
	- 50 %	+ 50 %	1,16 %	(-) 14,15 %	(-) 13,26 %	1,09 %
	+ 50 %	- 50 %	(-) 0,35 %	11,74 %	11,33 %	(-) 0,36 %
	+ 50 %	+ 50 %	3,47 %	12,10 %	15,76 %	3,28 %
02	- 50 %	- 50 %	(-) 5,39 %	(-) 19,86 %	(-) 23,87 %	(-) 4,98 %
	- 50 %	+ 50 %	1,46 %	(-) 19,09 %	(-) 18,01 %	1,36 %
	+ 50 %	- 50 %	(-) 1,02 %	17,25 %	16,19 %	(-) 0,9 %
	+ 50 %	+ 50 %	4,37 %	16,47 %	21,19 %	35,75 %
03	- 50 %	- 50 %	(-) 11,83 %	11,38 %	(-) 0,80 %	(-) 10,93 %
	- 50 %	+ 50 %	1,22 %	(-) 1,27 %	(-) 0,22 %	1,07 %
	+ 50 %	- 50 %	0,0 %	0,22 %	0,22 %	0,0 %
	+ 50 %	+ 50 %	10,78 %	(-) 8,15 %	0,90 %	9,87 %

Nota: O sinal negativo indica que houve redução no valor numérico da variável.

**Tabela IV.35 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.**

SISTEMA - 03						
Caso	HN	HC	Tempo	Produtividade	Recuperação	Calor
01	- 50 %	- 50 %	(-) 5,87 %	0,71 %	0,86 %	(-) 0,24 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 4,59 %	(-) 1,69 %	(-) 0,84 %	(-) 0,24 %
	+ 50 %	- 50 %	5,49 %	(-) 1,76 %	0,86 %	0,57 %
	+ 50 %	+ 50 %	9,25 %	(-) 7,78 %	(-) 0,80 %	0,0 %
02	- 50 %	- 50 %	(-) 0,36 %	2,13 %	1,77 %	(-) 0,35 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 0,22 %	(-) 4,56 %	(-) 4,78 %	(-) 0,23 %
	+ 50 %	- 50 %	1,22 %	2,91 %	4,09 %	1,16 %
	+ 50 %	+ 50 %	1,43 %	(-) 4,82 %	(-) 3,51 %	1,38 %
03	- 50 %	- 50 %	1,26 %	(-) 0,99 %	0,19 %	1,18 %
	- 50 %	+ 50 %	0,88 %	(-) 1,95 %	(-) 1,18 %	0,79 %
	+ 50 %	- 50 %	0,38 %	0,17 %	0,57 %	0,39 %
	+ 50 %	+ 50 %	(-) 0,38 %	(-) 0,23 %	(-) 0,62 %	(-) 0,39 %

Nota: O sinal negativo indica que houve redução no valor numérico da variável.

**Tabela IV.36 - Análise da variação percentual das variáveis otimizadas quando são submetidas a uma variação combinada dos “holdup’s” do prato e do condensador.**

SISTEMA - 04						
Caso	HN	HC	Tempo	Produtividade	Recuperação	Calor
01	- 50 %	- 50 %	(-) 0,15 %	1,09 %	0,86 %	(-) 0,24 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 0,15 %	(-) 0,60 %	(-) 0,84 %	(-) 0,24 %
	+ 50 %	- 50 %	0,77 %	0,13 %	0,86 %	0,72 %
	+ 50 %	+ 50 %	0,0 %	(-) 0,81 %	(-) 0,80 %	0,0 %
02	- 50 %	- 50 %	(-) 0,36 %	2,13 %	1,77 %	(-) 0,35 %
	- 50 %	+ 50 %	(-) 0,22 %	(-) 4,56 %	(-) 4,78 %	(-) 0,23 %
	+ 50 %	- 50 %	1,22 %	2,91 %	4,09 %	1,16 %
	+ 50 %	+ 50 %	1,43 %	(-) 4,82 %	(-) 3,51 %	1,38 %
03	- 50 %	- 50 %	1,26 %	(-) 0,99 %	0,19 %	1,18 %
	- 50 %	+ 50 %	0,88 %	(-) 1,95 %	(-) 1,18 %	0,79 %
	+ 50 %	- 50 %	0,38 %	0,17 %	0,57 %	0,39 %
	+ 50 %	+ 50 %	(-) 0,38 %	(-) 0,23 %	(-) 0,62 %	(-) 0,39 %

Nota: O sinal negativo indica que houve redução no valor numérico da variável.

Através das Tabelas IV.33 a IV.36 é verificado que se pode obter uma maior variação das variáveis otimizadas através da análise de “holdup” de líquido nos estágios de equilíbrio.

## IV.2 - RESULTADOS E ANÁLISES DOS SISTEMAS OTIMIZADOS

Na otimização da coluna de destilação multicomponente em batelada é desejado que seja verificado que:

- ❶ O tempo de operação do processo seja o menor possível;
- ❷ A quantidade de produtos recuperados nas especificações desejadas seja a maior possível;
- ❸ A produtividade do processo seja a maior possível;
- ❹ A quantidade de calor fornecido ao refeedor da coluna seja a menor possível para se processar a separação dos diversos componentes da mistura líquida.

Após uma avaliação geral dos dados obtidos nas simulações conclui-se que, as variáveis otimizadoras que conduziram o processo a uma melhoria nas variáveis otimizadas foram a razão de refluxo e o número de estágios de equilíbrio. O “holdup” de líquido do prato e do condensador foram usados apenas para verificar a sua influência na separação da mistura. A otimização direta da taxa de calor não é viável.

A estratégia seguida para a determinação heurística do política operacional ótima da coluna de destilação em batelada foi:

01) Determinar a razão de refluxo, denominada de razão de refluxo mínima, na qual seja processada a separação máxima da mistura em seus constituintes puros, dentro das especificações desejadas, mantendo-se fixas as demais variáveis operacionais. A razão de refluxo mínima é o valor na qual para qualquer razão de refluxo superior a este valor a quantidade de produtos recuperados praticamente não se alteram;

02) A partir da razão de refluxo mínima, repetir o passo 01), sucessivamente, para os demais cortes (“main-cut” e “off-cut”) intermediários do processo;

03) Desta forma, determina-se o perfil ótimo para a política de razão de refluxo para a operação e, então, faz-se a avaliação da influência do número de estágios de equilíbrio;

04) Finalmente, pode-se verificar a influência dos “holdup’s” na recuperação dos componentes da destilação.

Para a construção das Tabelas IV.37, IV-42, IV-47 e IV-52, foram utilizados os dados gerados da simulação, dos vários casos estudados para cada sistema, com a razão de refluxo mínima determinada inicialmente para o primeiro corte do processo. Nas demais tabelas entre as Tabelas IV.37 e IV.56, teremos as variações relativas obtidas com a otimização, ou seja, procedendo-se com o passo da estratégia de otimização de 01) até 04).

Nos tópicos a seguir, são mostrados os resultados otimizados para a operação da coluna de destilação em batelada e também são identificados os casos de tempo mínimo, destilado máximo, mínimo custo (máximo lucro) e máxima produtividade.

#### IV.2.1 - OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA 01: BENZENO, TOLUENO E M-XILENO

A operação da coluna com razão de refluxo mínima, o ponto que fornece a máxima quantidade de destilado, para todos os casos avaliados para este sistema estão sumarizados na Tabela IV.37.

**Tabela IV.37 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 01.**

Caso Avaliado	Tempo de operação (h)	Produtividade (Kg-mol/h)	Recuperação total (%)	Calor total fornecido ao processo (J)
01	16,10	5415,8	89,90	4,4836E+10
02	23,75	3956,0	95,93	6,5499E+10
03	44,78	2157,9	97,72	1,2231E+11
04	53,02	1758,5	94,11	1,4455E+11

Nas Tabelas IV.38 a IV.41 são mostradas as variações relativas obtidas na otimização do Sistema 01, com relação à Tabela IV.37, quando aplicados os passos mencionados para a estratégia de otimização.

**Tabela IV.38 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 01.**

Tipo de otimização	Recuperação Dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo	3,38 %	(-) 32,17 %	50,31 %	(-) 31,20 %
Destilado máximo	5,01 %	(-) 28,14 %	44,45 %	(-) 27,29 %

Na Tabela IV.38, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% para tempo mínimo, produtividade máxima e custo mínimo e, “holdup” do condensador está reduzido em 50% para o destilado máximo.

**Tabela IV.39 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 01.**

Tipo de otimização	Recuperação Dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo	2,78 %	(-) 29,68 %	44,91 %	(-) 29,07 %
Destilado máximo	2,81 %	(-) 29,47 %	44,52 %	(-) 28,87 %

Na Tabela IV.39, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% para tempo mínimo, produtividade máxima e custo mínimo e, o número de pratos foi aumentado em 25% e, o “holdup” do condensador está reduzido em 50% para o destilado máximo.

**Tabela IV.40 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 01.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo	1,36 %	(-)61,19 %	156,7 %	(-)60,52%
Produtividade máxima	1,36 %	(-)61,21 %	156,9 %	(-)60,54%
Destilado máximo	1,37 %	(-)61,26 %	157,2 %	(-)60,58%
Custo mínimo	1,37 %	(-)61,30 %	157,4 %	(-)60,62%

Na Tabela IV.40, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% e, a variação do número de estágios de equilíbrio químico não alteraram significativamente os resultados na otimização e as linha de cima para baixo indicam a quantidade de pratos presentes na coluna (para a primeira linha NP=15, na segunda NP=20, na terceira NP=25 e na última linha NP=30).

**Tabela IV.41 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 01.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Custo mínimo	0,06 %	(-) 17,39 %	20,89 %	(-) 17,22 %
Destilado máximo Produtividade máxima	3,26 %	(-) 16,88 %	23,99 %	(-) 16,72 %

Na Tabela IV.41, o “holdup” dos pratos estão reduzidos em 50% para a otimização de tempo e de custo e, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% para a otimização da produtividade e de destilado máximo e, o número dos estágios de equilíbrio é 20% maior.

Os resultados mostrados nas Tabelas IV.38 a IV.41 são significativos e mostram que os objetivos desta dissertação foram alcançados neste sistema.

## IV.2.2 - OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA 02: $\alpha$ -PINENO, CANFENO E $\beta$ -PINENO

A operação da coluna com razão de refluxo mínima, o ponto que fornece a máxima quantidade de destilado, para todos os casos avaliados para este sistema estão sumarizados na Tabela IV.42.

**Tabela IV.42 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 02.**

Caso Avaliado	Tempo de operação (h)	Produtividade (Kg-mol/h)	Recuperação total (%)	Calor total fornecido ao processo (J)
01	28,23	3419,1	98,24	7,7609E+10
02	11,97	7882,6	98,27	3,3672E+10
03	30,10	3189,7	97,61	8,2651E+10
04	18,55	4521,2	86,13	5,1454E+10

Nas Tabelas IV.43 a IV.46 são mostrados os resultados obtidos na otimização do Sistema 02, com relação Tabela IV.42, quando aplicados os passos, já mencionados, para a estratégias de otimização.

**Tabela IV.43 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 02.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo	<i>(-) 1,09 %</i>	<i>(-) 10,98 %</i>	<i>10,87 %</i>	<i>(-) 10,79 %</i>
Destilado máximo	<i>0,02 %</i>	<i>(-) 0,04 %</i>	<i>0,07 %</i>	<i>(-) 0,15 %</i>

Na Tabela IV.43, como nas Tabelas IV.44 a IV.46, o “holdup” do condensador foi reduzido em 50% e a variação do número de estágios de equilíbrio químico fez com que a operação do processo fosse ineficaz.

**Tabela IV.44 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 02.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo Destilado máximo	<i>0,39 %</i>	<i>(-) 0,84 %</i>	<i>1,17 %</i>	<i>(-) 0,77 %</i>

**Tabela IV.45 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 02.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo Destilado máximo	<i>0,71 %</i>	<i>(-) 1,26 %</i>	<i>1,98 %</i>	<i>(-) 1,28 %</i>

**Tabela IV.46 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 02.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo Destilado máximo	<i>0,21 %</i>	<i>(-) 8,25 %</i>	<i>8,66 %</i>	<i>(-) 8,05 %</i>

Os resultados mostrados nas Tabelas IV.43 a IV.46 são significativos e mostram que os objetivos desta dissertação foram alcançados neste sistema.

### IV.2.3 - OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA 03: ACETALDEÍDO, ETANOL E ÁGUA

A operação da coluna com razão de refluxo mínima, o ponto que fornece a máxima quantidade de destilado, para todos os casos avaliados para este sistema estão sumarizados na Tabela IV.47.

**Tabela IV.47 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 03.**

Caso Avaliado	Tempo de operação (h)	Produtividade (Kg-mol/h)	Recuperação total (%)	Calor total fornecido ao processo (J)
01	6,67	13704,6	98,22	1,9366E+10
02	9,58	9741,2	98,22	2,7235E+10
03	64,87	1504,0	98,30	1,7656e+11
04	3,67	23573,5	98,22	1,1254E+10

Nas Tabelas IV.48 a IV.51 são mostrados os resultados obtidos na otimização do Sistema 03, com relação à Tabela IV.47, quando aplicados os passos, já mencionados, para as estratégias de otimização.

**Tabela IV.48 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 03.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo	0,80 %	(-) 12,89 %	14,37 %	(-) 11,90 %
Produtividade máxima				
Custo mínimo	0,81 %	(-) 12,29 %	13,78 %	(-) 11,44 %
Destilado máximo				

Na Tabela IV.48, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% para o caso de tempo mínimo, produtividade máxima e custo mínimo e, a variação no número de estágios prejudica os resultados e, o “holdup” do condensador está reduzido em 50% para o caso de destilado máximo;

**Tabela IV.49 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 03.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Custo mínimo	0,0 %	(-) 10,75 %	11,41 %	(-) 10,25 %
Destilado máximo Produtividade máxima	0,76 %	(-) 10,54 %	12,16 %	(-) 10,08 %

Na Tabela IV.49, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% para a otimização da produtividade e de destilado máximo.

**Tabela IV.50 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 03.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos Produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima	0,86 %	(-)77,23%	331,83%	(-)76,64%
Custo mínimo Destilado máximo	0,89 %	(-)76,37%	316,43%	(-)75,78%

Na Tabela IV.50, o “holdup” do condensador está reduzido em 50%. Na primeira linha temos que NP = 20 e na segunda linha que NP = 30.

**Tabela IV.51 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 03.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo	(-) 1,38 %	(-) 30,52 %	34,72 %	(-) 26,80 %
Destilado máximo	0,87 %	(-) 5,45 %	5,95 %	(-) 4,72

Na Tabela IV.51, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% e, a variação do número de estágios de equilíbrio alterou os resultados em ~(-)30%.

Os resultados mostrados nas Tabelas IV.48 a IV.51 são significativos e mostram que os objetivos desta dissertação foram alcançados neste sistema.

#### IV.2.4 - OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA 04: BENZENO, MONO-CLORO-BENZENO E O-DI-CLORO-BENZENO

A operação da coluna com razão de refluxo mínima, o ponto que fornece a máxima quantidade de destilado, para todos os casos avaliados para este sistema estão sumarizados na Tabela IV.52.

**Tabela IV.52 - Resultados obtidos com razão de refluxo mínima para o Sistema 04.**

Casos avaliados	Tempo de operação (h)	Produtividade (Kg-mol/h)	Recuperação total (%)	Calor total fornecido ao processo (J)
01	43,35	2066,3	90,61	1,1844E+11
02	7,87	11739,0	98,22	2,2598E+10
03	10,02	9043,8	95,11	2,8405E+10
04	2,68	29812,7	94,90	8,5981E+09

Nas Tabelas IV.53 a IV.56 são mostrados os resultados obtidos na otimização do Sistema 04, com relação à Tabela IV.52, quando aplicados os passos, já mencionados, para a estratégias de otimização.

**Tabela IV.53 - Resultado ótimo para o Caso 01 no Sistema 04.**

Tipo de Otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo	4,49 %	(-) 42,28 %	80,07 %	(-) 41,80 %
Produtividade máxima				
Custo mínimo				
Destilado máximo				

Na Tabela IV.53, o “holdup” do condensador está reduzido em 50%. Para o caso de destilado máximo o número de pratos foi dobrado, passando de 15 para 30.

**Tabela IV.54 - Resultado ótimo para o Caso 02 no Sistema 04.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo	0,86 %	(-) 3,05 %	3,75 %	(-) 2,83 %
Produtividade máxima	0,89 %	(-) 3,18 %	3,96 %	(-) 2,95 %
Destilado máximo	4,14 %	(-) 3,18 %	3,96 %	(-) 2,99 %
Custo mínimo	(-) 3,99 %	(-) 3,18 %	3,97 %	(-) 2,95 %

Na Tabela IV.54, o “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50%, a variação do número de estágios de equilíbrio não alteraram significativamente os resultados na otimização e as variações de “holdup’s” não alteram significativamente os resultados.

Nesta Tabela IV.54, as linhas representam NP = 15/20/25/30, observa-se a existência de um número de pratos ótimo para uma determinada destilação (NP=25).

**Tabela IV.55 - Resultado ótimo para o Caso 03 no Sistema 04.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo	0,17 %	(-) 0,48 %	0,27 %	(-) 0,35 %
Destilado máximo	0,46 %	0,1 %	0,31 %	0,46 %

Na Tabela IV.55, o “holdup” do condensador está reduzido em 50% para o caso de destilado máximo.

**Tabela IV.56 - Resultado ótimo para o Caso 04 no Sistema 04.**

Tipo de otimização	Recuperação dos produtos	Valores percentuais obtidos na otimização		
		Tempo	Produtividade	Calor
Tempo mínimo Produtividade máxima Custo mínimo	2,38 %	(-) 1,87 %	4,01 %	(-) 1,57 %
Destilado máximo	3,00 %	1,49 %	1,93 %	1,08 %

Na Tabela IV.56, os “holdup’s” dos pratos e do condensador estão reduzidos em 50% para o caso de tempo mínimo, produtividade máxima e custo mínimo, a variação no número de estágios prejudica os resultados e o “holdup” do condensador está reduzido em 50% para o caso de destilado máximo.

Os resultados mostrados nas Tabelas IV.53 a IV.56 são significativos e novamente mostram que os objetivos desta dissertação foram alcançados para estes sistemas.

Os resultados obtidos da otimização para os quatro sistemas avaliados foram satisfatórios, sendo para alguns casos mais significativo e para outros menos. Isto se deve à flexibilidade do sistema. Entretanto, os objetivos desta dissertação foram alcançados para os quatro sistemas avaliados.

A metodologia empregada para a obtenção da otimização heurística abrangeu grande parte das possibilidades neste processo para cada um dos sistemas estudados.

A identificação da importância de cada variável otimizadora na operação da coluna de destilação forneceu subsídios suficientes para uma melhor compreensão do processo em estudo e, de sua real importância na otimização. A partir daqui, procedimentos de planejamento fatorial (aplicada a dados de simulação) podem ser avaliadas, visando a otimização.

## CONCLUSÕES E SUGESTÕES

◆ Após analisadas as Tabelas IV.37 a IV.56, pode-se afirmar que os objetivos propostos nesta dissertação foram cumpridos, ou seja, foi verificada a flexibilidade operacional da coluna de destilação em batelada.

◆ A variável-chave do processo de otimização da coluna de destilação em batelada foi a razão de refluxo.

◆ Em algumas políticas de otimização verificou-se a necessidade de se fazer uma escolha entre os objetivos da otimização, pois as variáveis otimizadas não eram verificadas simultaneamente. Portanto, a partir de algum critério, econômico ou ambiental, deve-se fazer a escolha mais adequada.

◆ Após a definição da política de razão de refluxo ótima, deve-se verificar a influência das outras variáveis otimizadoras.

◆ Não se deve variar diretamente a taxa de calor fornecida ao refeedor, pois:

✘ Para uma diminuição direta na taxa de calor fornecida ao refeedor acarreta um aumento no tempo de processo e, vice-versa;

✘ Para uma diminuição direta na taxa de calor fornecida ao refeedor, a produtividade do processo diminuiu linearmente e, vice-versa;

✘ Para uma variação direta na taxa de calor fornecida ao refeedor, a quantidade de produtos recuperados dentro das especificações requeridas tem uma variação mínima.

---

◆ A concentração molar inicial da mistura líquida a ser destilada exerce forte influência na política de otimização adotada. Entretanto, observou-se que para uma mesma concentração inicial os diversos sistemas apresentaram o mesmo comportamento em relação a qualquer variável analisada. A influência da concentração inicial é com relação à intensidade com que as variáveis otimizadas variam com relação às variáveis otimizadoras.

◆ A razão de refluxo e o tempo de operação da coluna tem uma relação aproximadamente linear, por isto muitos autores, Diwekar et. al. (1987) e Logsdon e Biegler (1993), assumem uma relação linear entre o tempo e a razão de refluxo nos estudos de otimização.

◆ Para a continuidade deste trabalho, é necessário que se faça este mesmo tipo de análise para os processos de destilação extrativa em batelada. Para sistemas que apresentam azeótropos ou volatilidades relativas próximas, é impossível obter todos os componentes com elevada pureza. Assim sendo, a introdução de um agente mássico (ou solvente) para alterar a volatilidade relativa dos componentes se faz necessária. Este processo, no entanto, é mais complexo que o aqui apresentado. No Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação, na dissertação de Cirne (1998), orientada pela Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel, a modelagem e a otimização heurística já está sendo realizada.

◆ Com relação ao programa computacional utilizado:

- ⌘ São observados, em alguns casos, erros na execução do programa. Tal ocorrência foi verificada quando um corte principal “main-cut” era processado nas especificações desejadas e, outro corte “main-cut” também estava dentro das especificações desejadas. Este fato ocasionou erro lógico de execução devido à ambiguidade da decisão, fazendo com que o programa interrompesse a sua execução;
- ⌘ Devido ao esgotamento da mistura líquida contida no refeedor, em alguns casos, o programa finalizou a simulação e não mostrou os dados obtidos na simulação. Tais simulações ocorreram quando a especificação do componente menos volátil era verificada, “main-cut”, e o refeedor tinha esgotado;
- ⌘ Mistura líquida a ser destilada com concentrações molares dos componentes menos volátil e de volatilidade intermediária menor que 15% poderá apresentar erros de execução ou não processar a separação destes nas especificações requeridas, pois a modelagem utilizada não descreve eficientemente sistemas diluídos;
- ⌘ Todos estes aspectos devem, então, serem considerados e incorporados ao programa para conferir-lhe maior robustez.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CIRNE, M. I. S., Dissertação de Mestrado, LDPS/FEQ/UNICAMP, 1998 (em andamento).

CONVERSE, A. O., HUBER, C. I., "Effect of Holdup on Batch Distillation Optimization", **I&EC Fundamentals**, v.4, n.4, p.475-77, 1965.

CONVERSE, A. O., GROSS, G. D., "Optimal Distillate-Rate Policy in Batch Distillation", **I&EC Fundamentals**, v.2, n.3, p.217-21, 1963

CHRISTENSEN, F. M., JORGENSEN, S. B., "Optimal Control of Binary Batch Distillation with Recycled Waste Cut", **Chem. Engng. J.**, v.34, p.57-64, 1987.

DIWEKAR, U. M., MADHAVAN, K. P., "Multicomponent Batch Distillation Column Design", **Ind. Eng. Chem. Res.**, v.30, p.713-21, part a, 1991.

DIWEKAR, U. M., MADHAVAN, K. P., "Batch-Dist: A Comprehensive Package for Simulation, Design, Optimization and Optimal Control of Multicomponent", Multifraction Batch Distillation Columns". **Comp. Chem. Engng.**, v.15, n.12, p.833-42, part b, 1991.

DIWEKAR, U. M., MALIK, R. K., MADHAVAN, K. P., "Optimal Reflux Rate policy Determination for Multicomponent Batch Distillation Columns", **Computer and Chem. Engng.**, v.11, n.6, p.629-37, 1987.

---

DOMENECH, S., ENJALBERT, M., “Modele Mathematique D’Une Colonne de Rectification Discontinue - I. Etablissement Du Modele” [Mathematical Model of a Batch Rectification Column - I. Establishment of a Model], **Chem. Eng. Sci.**, v.29, n.7, p.1519-28, 1974.

DOMENECH, S., ENJALBERT, M., “Modele Mathematique D’Unce Colonne Rectification Discontinue - II. Exploitation Numerique” [Mathematical Model of a Batch Rectification Column - II. Numerical Studies], **Chem. Eng. Sci.**, v.29, n.7, p.1529-35, 1974.

EDGAR, T. F., HIMMELBLAU, D. M., “Optimization of Chemical Processes”, McGraw-Hill, 1989.

EGLY, H., RURY, V., SEID, B., “Optimal Design and Operation of Batch Rectification Accompanied by Chemical Reaction”, **Comput. and Chem. Engng.**, v.3, p169-74, 1979.

FARHAT, S., PIBOULEAU, L., DOMENECH, S., CZERNICKI, M., “Optimal Control of Batch Distillation via NonLinear Programming”, **Chem. Eng. Process**, v.29, p.33-8, 1991.

HANSEN, T. T., JORGENSEN, S. B., “Optimal Control of Binary Batch Distillation in Tray or Packed Columns”, **Chem. Engng. Sci.**, v.33, p.151-5, 1986.

KERKHOF, L. H. J., VISSERS, H. J. M., “On the Profit of Optimun Control in Batch Distillation”, **Chem. Engng. Sci.**, v.33, p.961-70, 1978.

LOGSDON, J. S., BIEGLER, L. T., “Accurate Determination of Optimal Reflux Policies for the Maximum Distillate Problem in Batch Distillation”, **Ind. Eng. Chem. Res.**, v.32., p.692-700, 1993

---

LOGSDON, J. S., DIWEKAR, U. M., BIEGLER, L. T., "On the Simultaneous Optimal Design and Operation of Batch Distillation Columns", **Trans IChemE**, v.68 (part A), n.9, p.434-44, 1990.

LUYBEN, W. L., "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers" McGraw-Hill International Editions, Second edition, 1989.

LUYBEN, W. L., "Some Practical Aspects of Optimal Batch Distillation Design" **Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.**, v.10, n.1, p.54-9, 1971.

LUZ JR., L. F. L., Dissertação de Mestrado, LDPS/FEQ/UNICAMP, 1993.

LUZ JR., L. F. L., MACIEL, M. R. W., "Modelagem, Política de Operação e Otimização de Colunas de Destilação em Batelada", **9º. Congr. Bras. de Engenharia Química**, 1991.

MACIEL, M. R. W., LUZ JR., L. F. L., "Batch Process Analysis for Separation of Ideal and Non-Ideal Systems", Science, **Engng. and Tech. of Intensive Processing**, Edited by Akay and B. J. Azzopardi, University of Nottingham, p. 201-4, Quorn Litho, 1995.

MAYUR, D. N., JACKSON, R., "Time Optimal Problems in Batch Distillation for Multicomponent Mixtures and for Columns with Holdup". **Chem. Engng. J.**, v.2, p.150-63, 1971.

MURTY, B. S. N., GANGIAH, K., HUSAIN, A., "Performance of Various Methods in Computing Optimal Control Policies", **Chem. Engng. J.**, v.19, p.201-8, 1980.

PERRY, R. H., GREEN, D., "Perry's Chemical Engineers Handbook", 6<sup>a</sup> ed., Singapura, McGraw-Hill, 1984.

POWELL, M. J. D., "Introduction to Constrained Optimization, in Numerical Methods for Constrained Optimization" (Gill and Nurray, eds.), Academic Press, London and New York, p.01-28, 1974.

REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M., POLING, B. E., "The Properties of Gases and Liquids", 4<sup>a</sup> ed., McGraw-Hill, 1987.

## ANEXO 01

### Planilhas de dados termodinâmicos e operacionais para os sistemas avaliados na otimização heurística

#### Propriedades físico-químicas para o Sistema 01: benzeno, tolueno e m-xileno

3	100	8	2		
BENZENO					
TOLUENO					
M-XILENO					
562.2	48.9	259.0	0.212	0.0	
591.8	41.0	316.0	0.263	0.4	
617.1	35.4	376.0	0.325	0.3	
-3.392E+1	4.739E-1	-3.017E-4	7.130E-8		
-2.435E+1	5.125E-1	-2.765E-4	4.911E-8		
-2.917E+1	6.297E-1	-3.747E-4	8.478E-8		
0.5	0.05	0.95			
0.0	0.0	0.0			
0.0	0.0	0.0			
0.0	0.0	0.0			
-6.98273	1.33213	-2.62863	-3.33399		
-7.28607	1.38091	-2.83433	-2.79168		
-7.59222	1.39441	-3.22746	-2.40376		
353.2	288.0	562.2	1		
383.8	309.0	591.8	1		
412.3	332.0	617.1	1		
78.114d0	0.885d0	289.000d0			
92.141d0	0.867d0	293.000d0			
106.168d0	0.864d0	293.000d0			
1					

#### Dados operacionais para o Sistema 01: benzeno, tolueno e m-xileno

1.01300	1.11300	350.0	83.144
33.33E-02	33.33E-02	33.34E-02	
10000.0000	1666.6670	166.6667	
15	1.000000E-04		
1.000000	1.000000E-05		
5	1		
4			
3	1350494000.00	08.00	
1	0.990	0	
4			
8	1350494000.00	08.00	
2	0.990	0	
4			
3	1350494000.00	08.00	
2	0.990	0	
4			
8	1350494000.00	08.00	
3	0.990	0	
4			
9	1350494000.00	08.00	
0.999	3	0	
2019866.4d0	1	12.000D0	0.4064D0

### Propriedades físico-químicas para o Sistema 02: $\alpha$ -pineno, canfeno e $\beta$ -pineno

```

3      999      8      2
ALFA-PINENO
CANFENO
BETA-PINENO
638.44      27.57      490.0      0.271      0.0
638.44      27.50      493.5      0.275      0.0
638.44      27.50      487.5      0.277      0.0
-6.252E+1   9.889E-1   -5.795E-4   1.291E-7
-2.900E+1   7.293E-1   -4.363E-4   9.998E-8
-1.645E+1   6.996E-1   -4.120E-4   9.328E-8
0.5      0.05      0.95
0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0
9.14316      3337.51      -64.1480      0.00000
9.14376      3354.07      -64.5403      0.00000
9.14603      3409.22      -65.9219      0.00000
429.7      256.2      477.6      3
431.8      256.2      477.6      3
439.2      256.2      477.6      3
136.235      0.8665      293.0000
136.235      0.8700      293.0000
136.235      0.8750      293.0000
1

```

### Dados operacionais para o Sistema 02: $\alpha$ -pineno, canfeno e $\beta$ -pineno

```

1.01300      1.11300      350.0      83.144
33.33E-02      33.33E-02      33.34E-02
100000.0000      1666.6670      166.6667
15      1.000000E-04
1.000000      1.000000E-05
5
4
3      1350494000.00      08.00
1      0.950      0
4
8      1350494000.00      08.00
2      0.950      0
4
3      1350494000.00      08.00
2      0.950      0
4
8      1350494000.00      08.00
3      0.950      0
4
9      1350494000.00      08.00
0.950      3      0
2019866.4d0      1      12.000D0      0.4064D0

```

### Propriedades físico-químicas para o Sistema 03: acetaldeído, etanol e água

```

3      999      2      2
ACETALDEIDO
ETANOL
AGUA
461.0      55.7      154.0      0.303      2.5
513.9      61.4      167.1      0.644      1.7
647.3      221.2      57.1      0.344      1.8
7.716E+0    1.823E-1    -1.007E-4    2.380E-8
9.014E+0    2.141E-1    -8.390E-5    1.373E-9
3.224E+1    1.924E-3    1.055E-5    -3.596E-9
0.5      0.05      0.95
0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0
-7.04687    0.12142    -2.66037e-2    -5.90300
-8.51838    0.34163    -5.73683      8.32581
-7.76451    1.45838    -2.77580      -1.23303
294.0      273.0      461.0      1
351.4      293.0      513.9      1
373.2      275.0      647.3      1
44.054      0.778      293.0
46.069      0.789      293.0
18.015      0.998      293.0
0.2380
0.2520
0.2380
1.899      1.796      1.796
2.1054      1.972      1.972
0.92      1.3997      1.3997
0.0      -414.3110      53.3508
467.5422      0.0      25.6064
136.6789      116.7639      0.0
1

```

### Dados operacionais para o Sistema 03: acetaldeído, etanol e água

```

1.01300      1.11300      350.0      83.144
33.33E-02      33.33E-02      33.34E-02
100000.0000      1666.6670      166.6667
15      1.000000E-04
1.000000      1.000000E-05
5
4
3      1350494000.00      08.00
1      0.750      0
4
8      1350494000.00      08.00
2      0.750      0
4
3      1350494000.00      08.00
2      0.750      0
4
8      1350494000.00      08.00
3      0.750      0
4
9      1350494000.00      08.00
0.750      3      0
2019866.4d0      1      12.000D0      0.4064D0

```

**Propriedades físico-químicas para o Sistema 04: benzeno, MCB e o-DCB**

```

3      1000      8      2
benz
Mono-Cl-Bz
Orto-2Cl-Bz
562.2      48.9      259.0      .212      0.0
632.4      45.2      308.0      .249      1.6
729.0      41.0      360.0      .272      2.3
-3.392E+1      4.739E-1      -3.017E-4      -7.130E-8
-3.389E+1      5.631E-1      -4.522E-4      1.426E-7
-1.430E+1      5.506E-1      -4.513E-4      1.429E-7
0.9      0.05      0.95
0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0
0.0      0.0      0.0
-6.98273      1.33213      -2.62863      -3.33399
-7.58700      2.26551      -4.09418      0.17038
-8.23991      6.34949      -13.24326      17.25417
353.2      288.0      562.2      1
404.9      335.0      632.4      1
452.0      403.0      729.0      1
78.114      0.885      289
112.559      1.106      293
147.004      1.306      293
1

```

**Dados operacionais para o Sistema 04: benzeno, MCB e o-DCB**

```

1.01300      1.11300      350.0      83.144
33.33E-02      33.33E-02      33.34E-02
100000.0000      1666.6670      166.6667
15      1.000000E-04
1.000000      1.000000E-05
5      1
4
3      1350494000.00      08.00
1      0.990      0
4
8      1350494000.00      08.00
2      0.990      0
4
3      1350494000.00      08.00
2      0.990      0
4
8      1350494000.00      08.00
3      0.990      0
4
9      1350494000.00      08.00
0.999      3      0
2019866.4d0      1      12.000D0      0.4064D0

```

O significado de cada número nas planilhas poderão ser identificados por comparação com os quadros a seguir.

PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS				
Componentes	Iterações	Modelo para fase líquida	Modelo para fase vapor	
Nome do primeiro componente				
Nome do segundo componente				
Nome do terceiro componente				
Temperatura crítica	Pressão crítica	Volume crítico	Fator acêntrico	Momento dipolar
Temperatura crítica	Pressão crítica	Volume crítico	Fator acêntrico	Momento dipolar
Temperatura crítica	Pressão crítica	Volume crítico	Fator acêntrico	Momento dipolar
Constantes do polinômio de terceiro grau para cálculo de CP				
Constantes do polinômio de terceiro grau para cálculo de CP				
Constantes do polinômio de terceiro grau para cálculo de CP				
Chute inicial para Z usando modelagem SRK, respectivamente: valor inicial, Z-líquido e Z-vapor				
Constante Kij usando modelagem SRK, respectivamente: K11, K12 e K13				
Constante Kij usando modelagem SRK, respectivamente: K21, K22 e K23				
Constante Kij usando modelagem SRK, respectivamente: K31, K32 e K33				
Constantes da equação de Wagner para cálculo de pressão de vapor				
Constantes da equação de Wagner para cálculo de pressão de vapor				
Constantes da equação de Wagner para cálculo de pressão de vapor				
Temperatura de bolha	Temperatura mínima	Temperatura máxima	Tipo de equação para P <sub>vap</sub>	
Temperatura de bolha	Temperatura mínima	Temperatura máxima	Tipo de equação para P <sub>vap</sub>	
Temperatura de bolha	Temperatura mínima	Temperatura máxima	Tipo de equação para P <sub>vap</sub>	
Peso molecular	Densidade		Temperatura para esta densidade	
Peso molecular	Densidade		Temperatura para esta densidade	
Peso molecular	Densidade		Temperatura para esta densidade	
Fator de compressibilidade de Rackett				
Fator de compressibilidade de Rackett				
Fator de compressibilidade de Rackett				
Constante da equação UNIQUAC	Constante da equação UNIQUAC	Constante modificada		
Constante da equação UNIQUAC	Constante da equação UNIQUAC	Constante modificada		
Constante da equação UNIQUAC	Constante da equação UNIQUAC	Constante modificada		
Parâmetro de interação binária da equação UNIQUAC				
Parâmetro de interação binária da equação UNIQUAC				
Parâmetro de interação binária da equação UNIQUAC				
Cálculo da entalpia de excesso				

DADOS OPERACIONAIS			
Pressão de topo	Pressão de fundo	Estimativa inicial para Tb	Constante dos gases (R)
Fração molar inicial	Fração molar inicial	Fração molar inicial	
Quantidade molar a ser destilada	"Holdup" do condensador	"Holdup" do prato	
Número de prato na coluna	Passo de integração		
Peso das variáveis	Tolerância		
Número de cortes ("main-cut"+"off-cut")	Acúmulo de energia no estágio de equilíbrio		
Especificação para início da separação da fração de destilado			
Especificação de parada	Calor fornecido ao retervedor	Razão de refluxo	
Componente	Especificação de pureza	Parâmetro de controle	
Especificação para início da separação da fração de destilado			
Especificação de parada	Calor fornecido ao retervedor	Razão de refluxo	
Componente	Especificação de pureza	Parâmetro de controle	
Especificação para início da separação da fração de destilado			
Especificação de parada	Calor fornecido ao retervedor	Razão de refluxo	
Componente	Especificação de pureza	Parâmetro de controle	
Especificação para início da separação da fração de destilado			
Especificação de parada	Calor fornecido ao retervedor	Razão de refluxo	
Componente	Especificação de pureza	Parâmetro de controle	
Especificação para início da separação da fração de destilado			
Especificação de parada	Calor fornecido ao retervedor	Razão de refluxo	
Especificação de pureza	Componente	Parâmetro de controle	
Fator de conversão (relação KJ/Kg-vapor)	Tipo de recheio	Altura da coluna	Diâmetro da coluna