

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

AVALIAÇÃO DE CONDIÇÕES LÍMITES DE OPERAÇÃO E
CRITÉRIOS DE OTIMIZAÇÃO PARA COLUNAS DE
DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE

Autor: Richard Martin Rojas Talavera

Orientador: Prof^a Dr^a Maria Regina Wolf Maciel

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA À
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA COMO PARTE
DOS REQUISITOS EXIGIDOS PARA OBTENÇÃO DO
TÍTULO DE MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Campinas, Dezembro de 1999



UNICAMP
6382
BC/40383
278/2000
D ☒
R\$ 11,00
16-02-00
PD

CM-00138048-4

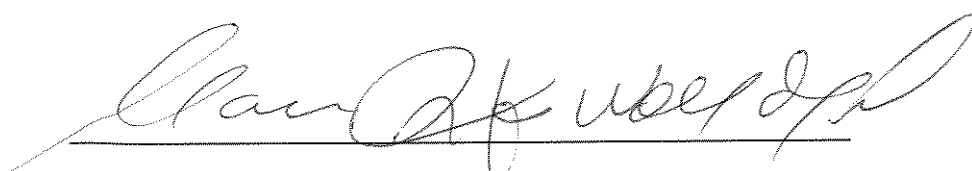
FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

R638a Rojas Talavera, Richard Martin
Avaliação de condições limites de operação e critérios
de otimização para colunas de destilação
multicomponente / Richard Martin Rojas Talavera.--
Campinas, SP: [s.n.], 1999.

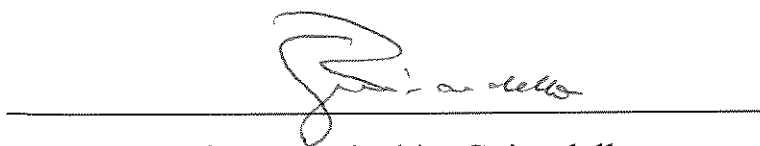
Orientadora: Maria Regina Wolf Maciel
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

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

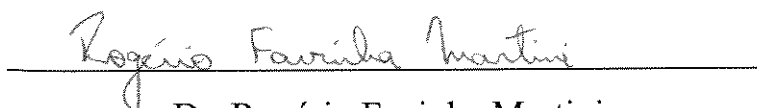
Dissertação de Mestrado defendida por Richard Martin Rojas Talavera e aprovada em 15 de dezembro de 1999 pela banca constituída pelos doutores:



Prof^a Dr^a Maria Regina Wolf Maciel – Orientadora
FEQ/UNICAMP

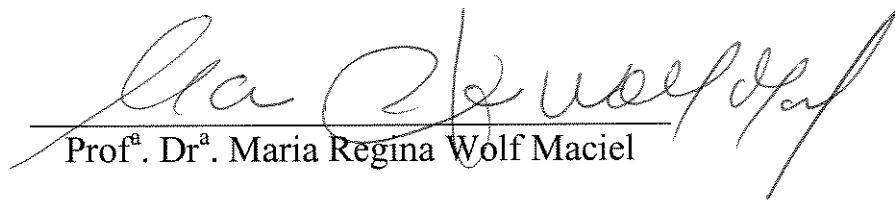


Prof. Dr. Reginaldo Guirardello
FEQ/UNICAMP



Dr. Rogério Favinha Martini
Pós Doutorado - CNPq

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Richard Martin Rojas Talavera e aprovada pela Comissão Julgadora em 15 de Dezembro de 1999.



Prof.ª Dr.ª Maria Regina Wolf Maciel

"Quando vejo os teus céus, obra dos teus dedos, a lua e as estrelas que preparaste; Que é o homem mortal para que te lembres dele? e o filho do homem, para que o visites?

Pois pouco menor o fizeste do que os anjos, e de glória e de honra o coroaste.

Fazes com que ele tenha domínio sobre as obras das tuas mãos; tudo puseste debaixo de seus pés"

Salmo 8: 3-6

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus pela vida, por todas as oportunidades e pelo caminho que Ele tem guiado minha vida.

A minha família pelo carinho e pela força que sempre estiveram presentes em todo momento, mesmo a distância.

À Celeste, por seu apoio, incentivo, compreensão e carinho nos momento mais difíceis.

Ao Ronald por ser meu amigo e por estar sempre presente, quando precisava dele.

Muito especialmente à Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel por sua amizade, dedicação e orientação.

A todos os amigos que encontrei na UNICAMP.

Ao CNPq pela bolsa de estudo.

Aos colegas, professores e funcionários da FEQ - UNICAMP

SUMÁRIO

SUMÁRIO	i
LISTA DE FIGURAS	iv
LISTA DE TABELAS	vii
NOMENCLATURA	xi
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiv
CAPITULO 1 INTRODUÇÃO E OBJETIVOS	1
CAPITULO 2 PROCESSOS DE DESTILAÇÃO: ESTADO DA ARTE	6
2.1 Introdução	6
2.2 Processo de Destilação	7
2.3 Equilíbrio Líquido Vapor	8
2.4 Processo de Destilação Multiestágios	10
2.4.1 Sistemas Binários	10
2.4.2 Sistemas Multicomponentes	11
2.4.3 Destilação Extrativa	12
2.5 Configuração Petlyuk	14
2.6 Conclusão	15
CAPITULO 3 NUMERO DE ESTÁGIOS MÍNIMO: TEÓRICO E PRÁTICO	16
3.1 Introdução	16
3.2 Sistema Binário	17

3.2.1	Cálculo Rigoroso	18
3.2.2	Cálculo Shortcut para o Número de Estágios Mínimo	25
3.2.3	Cálculos para Baixa Pressão	28
3.3	Sistema Ternário	29
3.3.1	Determinação do Número de Estágios Mínimo Prático e o Estágio Ótimo de Alimentação	29
3.3.2	Cálculo Shortcut para o Número Mínimo de Estágios	38
3.4	Coluna de Destilação com Saída Lateral	39
3.5	Destilação Extrativa	46
3.6	Destilação Extrativa numa Coluna com Saída Lateral	52
3.7	Destilação Invertida	54
CAPITULO 4	RAZÃO DE REFLUXO: TEÓRICO E PRÁTICO	57
4.1	Introdução	57
4.2	Sistema Binário	57
4.2.1	Determinação da Razão de Refluxo Mínimo Prático	58
4.2.2	Cálculo Shortcut para a Razão de Refluxo	62
4.2.3	Determinação da Razão de Refluxo Mínimo a Baixa Pressão	65
4.3	Sistema Ternário	66
4.3.1	Razão de Refluxo Mínimo Prático no Sistema Ternário	72
4.3.2	Cálculo Shortcut para o Sistema Ternário	72
4.4	Refluxo Mínimo na Destilação Extrativa	73
4.5	Conclusão	75
CAPITULO 5	OUTROS CASOS ESTUDO	76
5.1	Introdução	76
5.2	Condição Térmica de Alimentação	76
5.3	Posição Ótima da Saída Lateral	81
5.4	Separação de uma Mistura Quaternária	83
5.5	Conclusão	91

CAPITULO 6	COLUNAS PETLYUK	92
6.1	Introdução	92
6.2	Configuração Petlyuk	92
6.2.1	Correntes da Coluna Petlyuk	97
6.2.2	A Coluna Petlyuk na Industria	99
6.2.3	Quando Usar a Coluna Petlyuk	100
6.3	Simulação da Coluna Petlyuk	102
6.4	Conclusão	113
CAPITULO 7	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	114
7.1	Conclusões	114
7.2	Sugestões	118
CAPITULO 8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	119
ANEXO		128

LISTA DE FIGURAS

CAPITULO 2

2.1	Coluna de destilação	8
2.2	(a) Mistura ideal	9
	(b) Mistura não ideal, não azeotrópica	9
	(c) Mistura azeotrópica	9
2.3	Relação entre a razão de refluxo e o número de estágios	11
2.4	(a) Azeótropo de máximo	13
	(b) Azeótropo de mínimo	13

CAPITULO 3

3.1	Curva de equilíbrio da mistura n-hexano (1), n-heptano (2)	18
3.2	Fluxo de líquido e vapor com o número de estágios	22
3.3	(a) Fração molar de líquido através da coluna	23
	(b) Fração molar de vapor através da coluna	23
3.4	(a) Sequência direta	30
	(b) Sequência indireta	30
3.5	Coluna de destilação com saída lateral	40
3.6	Gráfico de vazões molares com o número do estágio	41
3.7	Gráfico da composição do líquido com o número do estágio	41
3.8	Gráfico da composição do vapor com o número do estágio	44
3.9	(a) Curva de equilíbrio da mistura etanol-água	47
	(b) Curva de equilíbrio da mistura etanol-água	47
3.10	Destilação extrativa da mistura etanol-água	48
3.11	Distribuição de frações molares numa coluna de destilação extrativa	52
3.12	Esquema para uma coluna de destilação com saída lateral	53
3.13	Destilação invertida	55

CAPITULO 4

4.1	Número de estágios vs. razão de refluxo	60
4.2	Número de estágios vs. energia no refeedor	60
4.3	Razão de refluxo vs. energia no refeedor	61
4.4	Razão de refluxo para distintas composições de alimentação	62
4.5	Número de estágios vs. razão de refluxo para a primeira coluna. Destilação ternária 33-33-34%	68
4.6	Número de estágios vs. razão de refluxo para a segunda coluna. Destilação ternária 33-33-34%	69
4.7	Número de estágios vs. razão de refluxo para a primeira coluna. Destilação ternária 5-15-80%	71
4.8	Número de estágios vs. razão de refluxo para a segunda coluna. Destilação ternária 5-15-80%	72

CAPITULO 5

5.1	Condições de alimentação	77
5.2	Arranjo 1	85
5.3	Arranjo 2, sequência direta	87
5.4	Arranjo 3, sequência indireta	89

CAPITULO 6

6.1	(a) Coluna Petlyuk – prefracionador e coluna principal	94
	(b) Coluna com parede divisória	94
6.2	Configuração da sequência direta	95
6.3	Remistramento do componente intermediário	96
6.4	Coluna Petlyuk dividida por seções	98
6.5	Prefracionador	102
6.6	Coluna principal	103

6.7	(a) Perfil de temperatura do prefracionador	106
	(b) Perfil de temperatura da coluna principal	106
6.8	(a) Perfil de composições do prefracionador	107
	(b) Perfil de composições da coluna principal	107

LISTA DE TABELAS

CAPITULO 3

3.1	Exemplo do cálculo do número de estágios mínimo prático para a mistura 45-55% de n-hexano e n-heptano a 1 atm	20
3.2	Número de estágios mínimo prático e posição ótima de alimentação	21
3.3	Composição dos produtos da destilação	24
3.4	Resultados da simulação pelo cálculo “shortcut”	27
3.5	Resultados das simulações rigorosas	28
3.6	Resultados das simulações “shortcut”	28
3.7	Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência direta	33
3.8	Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência direta	33
3.9	Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência indireta	33
3.10	Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência indireta	34
3.11	Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência direta, para misturas diluídas	35
3.12	Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência direta, para misturas diluídas	36
3.13	Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência indireta, para misturas diluídas	37
3.14	Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência indireta, para misturas diluídas	37
3.15	Resultados da simulação “shortcut” para o arranjo 1	38
3.16	Resultados da simulação “shortcut” para o arranjo 2	39
3.17	(a) Composições da alimentação e do topo da coluna	42
	(b) Composições da saída lateral e da base da coluna	42
	(c) Resultados da simulação da coluna com saída lateral líquida	43
3.18	(a) Composições da alimentação e do topo da coluna	45
	(b) Composições da saída lateral e da base da coluna	45

(c) Resultados da simulação da coluna com saída lateral vapor	45
3.19 (a) Alimentação à coluna	49
(b) Produto do topo	50
(c) Produto da base	50
(d) Resultados da destilação extrativa	51
3.20 (a) Alimentação à coluna	53
(b) Produto do topo	53
(c) Produto da saída lateral	54
(d) Produto da base	54
(e) Resultados da simulação	54
3.21 (a) Alimentação à coluna	55
(b) Produto do topo	56
(c) Produto da base	56
(d) Resultados da simulação	56

CAPITULO 4

4.1 Variação da razão de refluxo com o número de estágios	59
4.2 Cálculo “shortcut” para a razão de refluxo mínima	64
4.3 Razão de refluxo mínimo para sistema a baixa pressão	65
4.4 Cálculo “shortcut” para sistema a baixa pressão	66
4.5 Razão de refluxo mínimo prático para a primeira coluna	67
4.6 Razão de refluxo mínimo prático para a segunda coluna	69
4.7 Razão de refluxo mínimo prático para a primeira coluna para misturas diluídas	70
4.8 Razão de refluxo mínimo prático para a segunda coluna para misturas diluídas	71
4.9 Calculo “shortcut” para a razão de refluxo mínimo	73
4.10 Razão de refluxo mínimo prático para destilação extrativa	74

CAPITULO 5

5.1	(a) Caracterização das correntes de alimentação	79
	(b) Resultados para o número mínimo prático de estágios	79
	(c) Resultados para uma coluna com 45 estágios	80
	(d) Resultados para a razão de refluxo mínima prática	80
5.2	(a) Composições da alimentação e do topo da coluna	82
	(b) Composições da saída lateral e da base da coluna	82
	(c) Resultados da simulação	83
5.3	Resultados da simulação do arranjo 1	86
5.4	Resultados da simulação do arranjo 2, sequência direta	88
5.5	Resultados da simulação do arranjo 3, sequência indireta	90
5.6	Comparação do requerimento de energia	90

CAPITULO 6

6.1	(a) Composição de alimentação ao prefracionador – Caso 1	108
	(b) Composição dos produtos do prefracionador – Caso 1	108
	(c) Composição de alimentação à coluna principal – Caso 1	108
	(d) Composição dos produtos da coluna principal – Caso 1	108
6.2	(a) Composição de alimentação ao prefracionador – Caso 2	109
	(b) Composição dos produtos do prefracionador – Caso 2	109
	(c) Composição de alimentação à coluna principal – Caso 2	109
	(d) Composição dos produtos da coluna principal – Caso 2	109
6.3	(a) Composição de alimentação ao prefracionador – Caso 3	110
	(b) Composição dos produtos do prefracionador – Caso 3	110
	(c) Composição de alimentação à coluna principal – Caso 3	110
	(d) Composição dos produtos da coluna principal – Caso 3	110
6.4	(a) Composição de alimentação ao prefracionador – Caso 4	111
	(b) Composição dos produtos do prefracionador – Caso 4	111
	(c) Composição de alimentação à coluna principal – Caso 4	111

	(d) Composição dos produtos da coluna principal – Caso 4	111
6.5	(a) Composição de alimentação ao prefracionador – Caso 5	112
	(b) Composição dos produtos do prefracionador – Caso 5	112
	(c) Composição de alimentação à coluna principal – Caso 5	112
	(d) Composição dos produtos da coluna principal – Caso 5	112
6.6	Resultados das simulações da configuração Petlyuk	113

NOMENCLATURA

$\alpha_{LK/HK}$	Volatilidade relativa de A respeito a B
θ	Constante de Underwood
B	Vazão molar no fundo da coluna
C	Número de componentes
D	Vazão molar de destilado
$N_{\min}$	Número mínimo de estágios
N_R	Número de estágios na zona de retificação
N_S	Número de estágios na zona de esgotamento
q	Fração líquida
R_m	Razão de refluxo mínima
S	Número de sequências possíveis
x_{dA}	Fração molar do componente A no destilado
x_{fA}	Fração molar do componente A na alimentação
x_{LK}	Fração molar do componente chave leve
x_{HK}	Fração molar do componente chave pesado
$z_{LK,F}$	Composição molar do componente chave leve na alimentação
$z_{HK,F}$	Composição molar do componente chave pesado na alimentação

RESUMO

TALAVERA, R. M. R., *Avaliação de Condições Limites de Operação e Critérios de Otimização para Colunas de Destilação Multicomponente*, Dissertação de Mestrado, Faculdade de Engenharia Química – UNICAMP, 1999

A destilação é um processo de separação difusional através do qual misturas podem ser separadas em componentes puros, usando como agente de separação o calor e/ou a massa. De acordo com a natureza da alimentação e com as especificações de produto desejadas, este processo pode ser simples, ou complexo, como os que geralmente se encontra na indústria. O projeto para a coluna de destilação tem sido estudado há muito tempo e, hoje, com a ajuda dos computadores e dos simuladores comerciais, modelos mais rigorosos estão sendo aplicados para simular em condições mais reais o comportamento destas colunas. Estes cálculos, no entanto, são complexos e, geralmente, cálculos “shortcut” são realizados primeiramente, para gerar estimativas iniciais aos métodos rigorosos. No entanto, cálculos “shortcut” como as equações de Fenske e Underwood, para o número de estágios mínimo e a razão de refluxo mínima teóricos, que estão disponíveis na maioria dos programas de simulação, não são aplicáveis a misturas complexas, fazendo, então, com que os cálculos rigorosos sejam mais complicados tanto do ponto de vista de convergência, quanto do ponto de vista de possibilidades físicas do processo.

O presente trabalho consiste na avaliação das propriedades limites operacionais usando o simulador comercial, HYSIM. Para o número de estágios mínimo, um número de estágios fixo é usado no início, para a

primeira simulação, depois, o número de estágios é reduzido gradualmente até o ponto onde não se consiga mais convergência. Então, o menor número de estágios com os quais é possível que a coluna convirja, seria o número de estágios mínimo prático. O ponto de alimentação é o ótimo em cada caso. Para calcular a razão de refluxo mínima prática, é preciso o procedimento oposto. O número de estágios é incrementado até que a energia no refeedor permaneça constante, a um valor mínimo, com o aumento do número de estágios. Esta configuração, do número de estágios e da localização ótima de alimentação, para a razão de refluxo mínimo prático seria já o projeto ótimo em termos de consumo de energia. Embora este procedimento pareça simples, é trabalhoso e demorado. A sua vantagem é que trabalha para qualquer mistura que o simulador suporte, simples ou complexa e os resultados são confiáveis. Finalmente, também como parte do trabalho com o simulador HYSIM, demonstra-se que é possível simular configurações de colunas complexas como o caso da coluna Petlyuk.

Palavras-chave: simulação, destilação, otimização, destilação extrativa, coluna Petlyuk.

ABSTRACT

Distillation is a diffusional separation process through which the separation of mixtures into pure components is possible, using heat and/or mass as separation agents. According to the nature of the feed and to the product specifications, this process can be simple, or complex, as the ones generally found in the industry. The design of distillation columns has been studied for a long time and, today, with the aid of computers and commercial simulators, more rigorous models are being applied to simulate the behavior of these columns in more real conditions. These calculations, however, are quite complex and, generally, “shortcut” calculations are first made, to generate initial estimates for the rigorous methods. Shortcut calculations such as the Fenske and Underwood equations, for the minimum number of trays and minimum reflux ratio, that are present in most simulation applications, are not applicable to complex mixtures, thus, making, the rigorous calculations more complex from the convergence point of view as for the physical possibilities of the process point of view.

The present work consists on the evaluation of the limiting operating properties using the process simulator, HYSIM. For the minimum number of trays, a fixed number of these is used at the beginning, for the first simulation, after the number of trays is decreased gradually until the point where no convergence is reached. Then the smallest number of trays for which the column converges would be the practical minimum number of trays. The optimum feed point is calculated in each case. The opposite procedure is required for the calculation of the practical minimum reflux ratio. The number of trays is increased until the energy required by the reboiler remains constant

regardless of the increase in the number of trays. This configuration, number of trays and feed location, for the practical minimum reflux ratio would already be the optimal column design in terms of energy consumption. Although this procedure seems to be simple, it is laborious and time consuming. The advantage is that it works for any mixture supported by the simulator, simple or complex and the results are reliable. Finally, also as part of the work with the HYSIM simulator, it was demonstrated that it is possible to simulate complex configurations of columns such as the Petlyuk configuration.

Key words: simulation, distillation, optimization, extractive distillation, Petlyuk column.

CAPITULO 1

INTRODUÇÃO E OBJETIVOS

A separação de misturas em componentes praticamente puros é de essencial importância para a indústria química, na manufatura de produtos químicos, em processos biotecnológicos, farmacêuticos, etc. É muito difícil encontrar um processo químico que não envolva uma etapa de purificação. Mesmo sendo um processo conhecido e estudado por muitos anos, a destilação segue sendo o processo de separação mais utilizado na indústria de processamento.

Tanto colunas de pratos como de recheio são empregadas para diversas aplicações de separação de componentes. Embora os componentes a serem separados e o equipamento de destilação possam ser diferentes, a modelagem matemática, incluindo os balanços de material e energia e as relações de equilíbrio de fases são semelhantes e igualmente aplicáveis a todas as operações de destilação. Pode-se, ainda, optar pela modelagem de equilíbrio ou de não equilíbrio.

Hoje em dia, existem muitos pacotes de destilação para uso geral que estão disponíveis para o engenheiro. Alguns destes softwares são especializados para este processo, enquanto que outros pacotes são parte de um “flow-sheet” ou um sistema de processos. Já que a destilação é tão universal, todos os simuladores de processos têm um ou mais módulos de programas para esta operação unitária. Frequentemente, a natureza dos módulos de destilação determina a conveniência ou a preferência para o uso

de um simulador específico para uma aplicação determinada, principalmente levando em consideração se o sistema é ideal ou não ideal.

As aplicações em destilação podem ser caracterizadas pelo tipo de material a ser separado, tais como fracionamento de petróleo, separações de gases, separações contendo eletrólitos e reações químicas, enfim, separações líquidas em geral, etc. Estas aplicações têm características específicas em termos do modo ou das correlações pelas quais são determinadas ou calculadas as propriedades físicas, termodinâmicas e de transporte; as configurações especiais do equipamento de processo como ter “strippers” laterais, retiradas múltiplas de produtos, e reciclo interno; a presença de reações ou duas fases líquidas; etc. Vários softwares disponíveis de destilação podem modelar estas características especiais destas aplicações com precisão e eficiência bem aceitáveis.

Em aplicações químicas e petroquímicas, as espécies químicas estão bem definidas para a determinação de suas propriedades físicas, termodinâmicas e de transporte. Para alguns sistemas, métodos especiais de predição podem ser necessários, e certas misturas podem exibir comportamento não ideal, algumas podem até formar azeótropos. O programa de destilação pode não convergir para uma solução devido às fortes não linearidades nas equações provocadas por não idealidades e até mesmo por condições operacionais. A presença de eletrólitos e reações no sistema também introduzem não linearidades, e alguns programas de destilação podem não ser capazes de manipulá-los. Às vezes, aplicações como a separação de isômeros envolvem misturas com uma faixa estreita de pontos de bolha. Em tais casos, a separação requer muitos pratos ou estágios, os cálculos ficam

longos, e alguns programas podem não ser capazes de manipulá-los em um tempo razoável. Às vezes, tais cálculos longos podem causar problemas numéricos e fazem a convergência impossível.

Quase todos os programas de destilação requerem o número de estágios teóricos como dado de entrada, e eles calculam a separação resultante sob várias restrições e condições refluxo. Neste sentido, todos estes programas são de avaliação. A determinação do número de estágios teóricos é feita rodando o programa como um caso de estudo, assumindo vários valores do número de estágios e escolhendo, então, aquele que satisfaz todas as exigências para a separação.

Com o crescente uso dos computadores, vêm sendo desenvolvidos softwares de simulação cada vez mais poderosos. Entre os simuladores de processos comerciais mais conhecidos estão: ASPEN PLUS versão 10.1 (Aspen Tech, 1999), PRO/II versão 5.10 (Simulation Sciences, 1999), HYSIM versão 2.71 (Hyprotech, 1998), HYSYS versão 2.10 (Hyprotech, 1998), etc. Estes simuladores contam com métodos rigorosos de cálculo de colunas de destilação e também com cálculos simplificados. O presente trabalho de tese, foi desenvolvido usando o simulador comercial HYSIM, versão C1.51 (1991).

Dentro deste contexto, o objetivo geral do presente trabalho é :

- Encontrar as condições limites de operação para diversos tipos de sistemas e condições operacionais através do processo de destilação multicomponente considerando-se, inclusive, uma nova metodologia de

cálculo e as especificações ótimas para cada sistema. Pretende-se, ainda, verificar as flexibilidades das configurações Petlyuk.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- Encontrar o número de estágios mínimo prático das colunas de destilação para a separação de uma mistura binária, uma ternária e uma azeotrópica. No caso das duas primeiras, comparar o método rigoroso de cálculo desenvolvido com o método “shortcut”.
- Localizar o prato ótimo de alimentação para cada coluna em termos da otimização da energia no refeedor da coluna.
- Achar a razão de refluxo mínimo prático para alguns sistemas e comparar os resultados do método rigoroso com os do cálculo “shortcut”.
- Localizar a alimentação do solvente no caso da separação de uma mistura azeotrópica.
- Montar e aplicar a configuração Petlyuk a uma mistura ternária.

Primeiramente, no capítulo 2, uma breve introdução ao processo de destilação será dada e o estado da arte nos estudos relacionados ao tema deste trabalho será mostrado.

No capítulo 3, serão apresentados os resultados das simulações realizadas, tanto pelo método rigoroso que será aí apresentado como pelo “shortcut”, para avaliar o número de estágios mínimo, teórico e prático. Trabalhou-se com misturas ideais de hidrocarbonetos, n-C6, n-C7 e n-C8 para

o caso das destilações binária e multicomponente e com a mistura etanol-água para o caso de destilação extrativa. Onde foi possível se fizeram comparações entre os métodos rigoroso e “shortcut”.

Para complementar o trabalho, no capítulo 4, algumas simulações dos mesmos sistemas que no capítulo 3 foram feitas, procurando o valor da razão de refluxo mínima prática, pelo método rigoroso, e o número de estágios que se precisam na coluna para esta razão de refluxo. Fizeram-se também algumas comparações dos resultados dos cálculos rigorosos com os valores teóricos do método “shortcut”.

Além disso, no capítulo 5, trabalhou-se com outros casos, procurando verificar o efeito da condição de alimentação, a posição ótima para uma saída lateral na separação de uma mistura ternária e algumas configurações para a separação de uma mistura quaternária.

No capítulo 6, introduzimos uma configuração de destilação não convencional para separar uma mistura ternária. Esta configuração, conhecida como Petlyuk, consiste de duas colunas unidas por correntes de líquido e vapor que usam um único refeedor e um condensador. O motivo das simulações desta configuração é de avaliar a flexibilidade do simulador, trabalhando com sistemas para os quais não foi projetado.

Finalmente, no capítulo 7, são apresentadas as conclusões e também algumas sugestões para trabalhos futuros, e no capítulo 8, estão as referências bibliográficas utilizadas neste trabalho.

CAPITULO 2

PROCESSOS DE DESTILAÇÃO: ESTADO DA ARTE

2.1. INTRODUÇÃO

A maioria dos processos na indústria de processamento consiste em duas tarefas básicas: reação química e separação de produtos. Embora se tenha a crença de que a separação é a tarefa menos significativa das duas, Humphrey (1995) adequadamente enfatizou a importância econômica e ecológica da tarefa de separação:

“Os processos de separação são a chave principal na manufatura de processos industriais. São usados em tarefas tão essenciais como remoção de contaminantes das matérias primas, recuperação e purificação de produtos primários, e eliminação de poluentes das correntes efluentes de água e ar”.

A chave para qualquer processo de separação é o seu agente de separação primário de transferência de massa, o qual pode ser a adição de uma espécie química (como nos processos de absorção, extração e “stripping”), uma membrana (em separações por membranas) ou energia a partir de uma fonte de calor (como na destilação ou cristalização). Por definição, o processo de destilação separa os componentes químicos de uma mistura baseado na diferença dos pontos de ebulição por meio da adição ou remoção de calor para a evaporação e a condensação ou, ainda, por meio de um agente mássico. É um processo de separação difusional governado pelo equilíbrio.

2.2 PROCESSO DE DESTILAÇÃO

A destilação é um método ou processo físico para separar uma mistura líquida ou vapor, ou líquida mais vapor, em seus constituintes. Este processo está baseado em observações feitas a séculos de que quando uma mistura é parcialmente vaporizada, o vapor normalmente tem uma composição diferente da do líquido residual. Este método inclui a condensação do vapor para formar o produto destilado e o resíduo líquido, chamado de produto de fundo.

Um desenvolvimento importante em destilação foi a constatação de que uma destilação simples, operada em uma base contínua (operação “flash”), podia ter seu efeito multiplicado através do uso de estágios, isto é, operando várias vaporizações “flash” em série, com o líquido residual em contracorrente. Combinando estágios em um casco vertical, cilíndrico, com um refluxo líquido no topo e um vapor de um refulvedor no fundo, uma operação de contato líquido-vapor em contracorrente foi estabelecida e se encontrou que era economicamente atrativa (McKetta, 1993).

A maioria das destilações hoje em dia são do tipo fracionamento por múltiplos estágios. Quando a coluna opera como um processo contínuo, a alimentação consiste em uma mistura, localizada em certa região da coluna, provendo uma zona de esgotamento (“stripping”) abaixo do ponto de alimentação e uma zona de retificação acima do ponto de alimentação. Um diagrama de coluna típico de destilação é mostrado na figura 2.1.

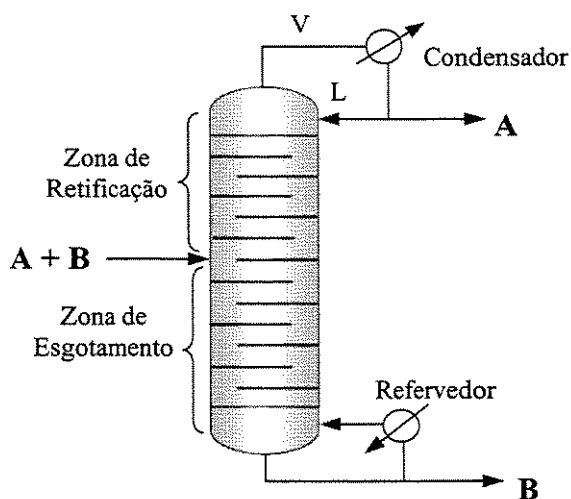


Figura 2.1 Coluna de Destilação

2.3 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR

A razão de equilíbrio envolvendo as fases em questão tem um papel fundamental no processo de destilação. O sistema em questão pode ser binário ou multicomponente, ideal ou não ideal. Existem métodos para prever as relações de equilíbrio ou modelos para calculá-los. Estes estão baseados na aplicação dos critérios de equilíbrio termodinâmico.

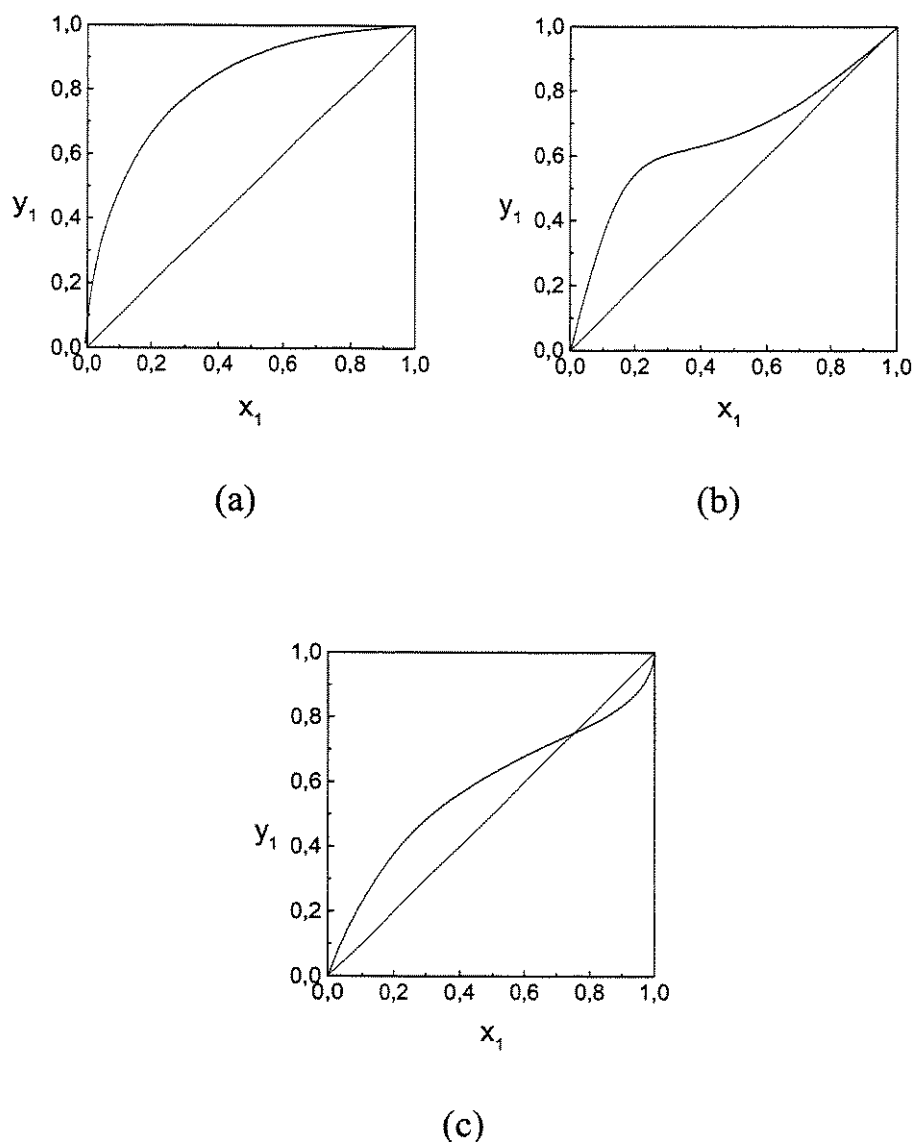


Figura 2.2 (a) Mistura ideal, (b) Mistura não ideal, não azeotrópica,
(c) Mistura azeotrópica

As composições de equilíbrio em um sistema binário podem ser calculadas e plotadas para construir os diagramas x-y. A linha diagonal é conveniente para se verificar a diferença entre a composição de vapor com relação à do líquido. Na figura 2.2, mostram-se diagramas de equilíbrio de alguns tipos de misturas.

O primeiro sistema, figura 2.2 (a), trata-se de uma mistura binária ideal. Este tipo de mistura pode ser separado por um processo de destilação convencional. O seguinte, figura 2.2 (b), é uma mistura não ideal mas que não apresenta um azeótropo, e finalmente a figura 2.2 (c) representa uma mistura azeotrópica.

2.4 PROCESSOS DE DESTILAÇÃO MULTISTÁGIOS

Se um estágio não é suficiente para alcançar as especificações da separação, então deve ser usado um processo com múltiplos estágios. Este processo é levado a cabo em uma coluna de destilação com vários estágios e com refluxo líquido, como a que se mostrou na figura 2.1.

2.4.1 SISTEMAS BINÁRIOS

O caso mais simples de destilação por múltiplos estágios é a destilação contínua de sistemas binários. Para este caso, pode-se utilizar o método de McCabe – Thiele, para explicar o processo de destilação por ser um método gráfico simples e didático. Até bem pouco tempo, usava-se este método no projeto de colunas de destilação.

Existem também publicações sobre métodos rigorosos de modelagem, simulação e propostas de novas configurações que incluem o uso de refeedores e condensadores intermediários ou o uso de “strippers” laterais e correntes de reciclo (Agrawal e Herron, 1998; Olsen e Endrestøl, 1997; Kyriakopoulou e Kalitventzeff, 1998; von Watzdorf et al. 1998, 1999) .

2.4.2 SISTEMAS MULTICOMPONENTES

Para sistemas multicomponentes, existem dois métodos para o projeto de colunas de destilação. Métodos aproximados que podem ser realizados até à mão e métodos rigorosos que precisam ser executados num computador (Holland, 1981; King, 1980; Treybal, 1981).

Nos métodos aproximados ou “shortcut”, geralmente se calculam o número de estágios mínimos de equilíbrio, pela equação de Fenske, para um refluxo total, e a razão de refluxo mínimo, pelas equações de Underwood, para um número infinito de estágios.

Para cada sistema existe, teoricamente, um número infinito de combinações de número de estágios e de razão de refluxo que podem satisfazer as especificações da separação. Isto é mostrado na figura 2.3. Note-se que o número mínimo de estágios requer um refluxo total e que a razão de refluxo mínimo requer um número infinito de estágios.

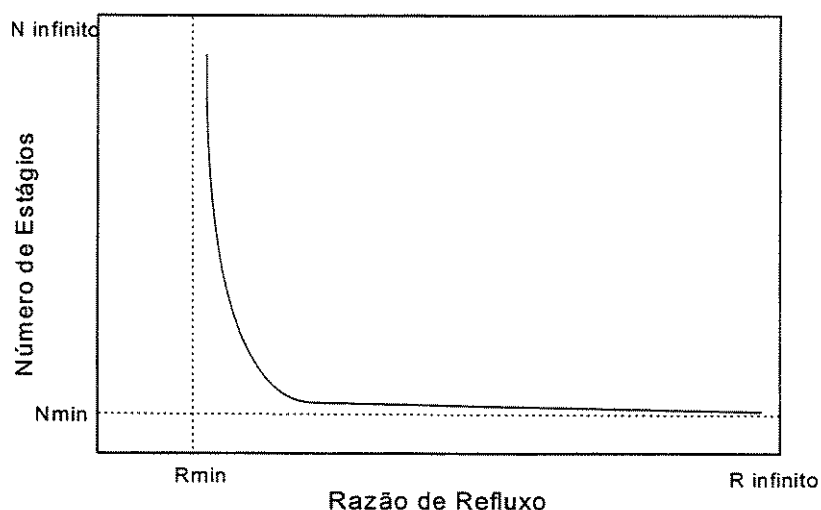


Figura 2.3 Relação entre a razão de refluxo e o número de estágios

Também existem métodos de cálculos “shortcut” para misturas não ideais como o proposto por Eckert e Hlavácek (1978).

Os métodos rigorosos consistem em cálculos por estágios. Além dos textos de separações e operações unitárias, a literatura descreve modelos alternativos para projetar colunas de destilação multicomponente (Ricker e Grens, 1974; Kehlen e Rätzch, 1987), métodos de simulação de colunas tanto em regime permanente como dinâmico (Eiden e Scholl, 1997; Kyriakopoulou e Kalitventzeff, 1998; Kooijman e Taylor, 1995; Olsen e Endrestøl, 1997), modelos de controle (Skogestad, 1997); e finalmente modelos de otimização de colunas de destilação em termos do requerimento mínimo de energia para o processo (Offers et al. 1995; Halvorsen e Skogestad, 1997, 1999; Lestak e Collings, 1997) e de refluxo mínimo (Henry e Chien, 1978; Zhicai et al. 1996; Wu et al. 1999).

Alguns métodos para o projeto de coluna incluem modelos de colunas com múltiplas alimentações ou saídas laterais (Rooks et al. 1996; Nikolaides e Malone, 1987).

Pode-se verificar que o assunto é tema de estudo até hoje.

2.4.3 DESTILAÇÃO EXTRATIVA

A destilação extrativa é um processo no qual um agente mássico é adicionado para alterar a volatilidade relativa entre os componentes sem que exista a formação de um novo azeótropo e de duas fases líquidas. Este processo é usado, geralmente, para melhorar a separação entre componentes

com pontos de ebulição próximos (Lee, 1998) ou algumas misturas que formam azeótropo, para as quais uma separação por um processo de destilação convencional não é possível.

Os azeótropos são pontos singulares na relação de equilíbrio líquido-vapor. Estes são chamados binários, ternários, quaternários, etc., dependendo do número de componentes envolvidos na formação do azeótropo. Já que a força motriz nos pontos de azeótropo é zero, as misturas azeotrópicas não podem ser separadas por destilação convencional. Um azeótropo é chamado de mínimo quando o ponto de ebulição do azeótropo é menor que o ponto de ebulição de qualquer um dos componentes puros, e é chamado de máximo quando ocorre o contrário, como se mostra nas figuras 2.4.

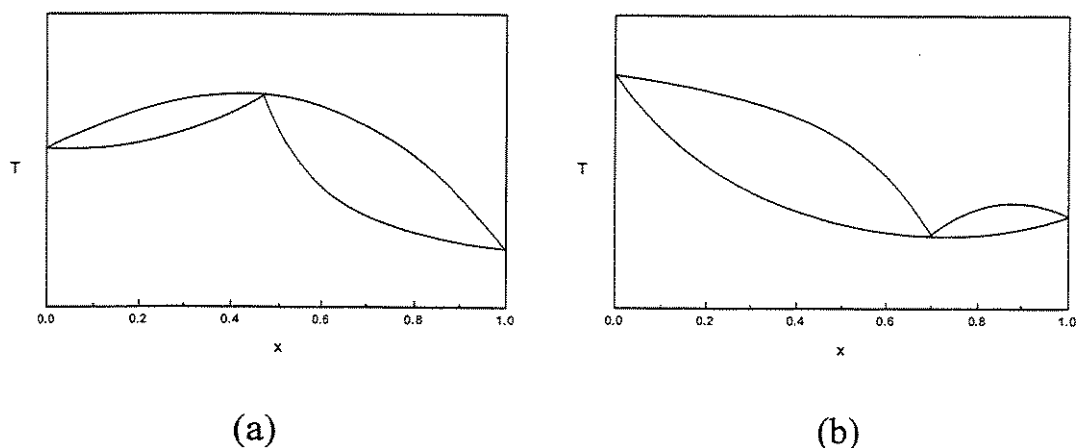


Figura 2.4 (a) Azeótropo de máximo, (b) Azeótropo de mínimo

Em geral, os processos de separação de misturas azeotrópicas são bem conhecidos. Encontram-se na literatura várias publicações sobre a otimização (Bauer e Stichlmair, 1995) e simulação (Brito, 1997) destes processos. As otimizações, geralmente, consistem em métodos para minimizar o consumo de

energia no processo (Collura e Luyben, 1988; Stichlmair e Herguijuela, 1992; Knapp e Doherty, 1990).

Lee e Gentry (1997) apresentam algumas considerações de quando e de como é conveniente utilizar a destilação extrativa e como esta, às vezes, pode ser uma operação alternativa para algum processo.

Informação sobre vários sistemas se encontram na literatura como, Lynd e Grethlein (1984) que fizeram um estudo sobre a separação de etanol, de soluções aquosas por destilação extrativa, e um estudo do comportamento dinâmico para a mesma mistura que foi realizado por Wolf e Brito (1995).

2.5 CONFIGURAÇÃO PETLYUK

Os sistemas de destilação termicamente acoplados consistem em colunas conectadas por correntes de líquido e vapor em contracorrente. Um exemplo prático deste tipo de arranjo é a configuração Petlyuk. Esta configuração requer uma menor quantidade de energia que as configurações convencionais que consistem em séries de colunas (Stupin e Lockhart, 1972; Wolff e Skogestad, 1995; Agrawal e Fidkowski, 1998). Embora Agrawal e Fidkowski (1998) afirmem que isto nem sempre acontece.

Embora esta configuração tenha sido conhecida desde há muito tempo, sua complexidade tem proibido seu uso e a aplicação na indústria.

Hoje em dia, com os desenvolvimentos na área de processos e computacionais, está crescendo o interesse novamente por esta configuração.

Novas pesquisas, com relação à configuração Petlyuk, vêm sendo realizadas em todas as áreas, principalmente na área de modelagem, controle e otimização de processos (Wolff e Skogestad, 1994; Halvorsen e Skogestad, 1997, 1998, 1999; Mizsey et al. 1998; Triantafyllou e Smith, 1992; Fidkowski e Królikowski, 1986; Nikolaidis e Malone, 1988).

Também na área de simulação, existem pesquisas de novos modelos de simulação de colunas Petlyuk para minimizar o consumo de energia (Christtiansen e Skogestad, 1997; Fidkowski e Królikowski, 1987; Lestak e Collins, 1997; Morud e Skogestad, 1994), e se propõem até modelos para separações quaternárias (Christtiansen et al. 1997).

2.6 CONCLUSÃO

Pode-se constatar, pelas referências das seções anteriores, que o processo de destilação se mantém como um assunto atual de pesquisa. A maioria dos trabalhos citados consiste no desenvolvimento de modelos rigorosos para a simulação de colunas de destilação e de modelos para melhorar a eficiência ou para achar as condições ótimas de operação destas colunas, sempre procurando minimizar o consumo de energia do processo. Neste sentido, faz-se necessário o conhecimento de condições limites, ou seja, condições de refluxos máximo e mínimo que se referem, respectivamente, a tamanhos reduzidos e longos de colunas.

CAPITULO 3

NÚMERO DE ESTÁGIOS MÍNIMO: TEÓRICO E PRÁTICO

3.1 INTRODUÇÃO

Para modelar uma coluna de destilação é preciso que esta esteja entre os limites de razão de refluxo mínimo e número de estágios mínimo. A razão de refluxo mínimo, teoricamente, assume um número de estágios infinito e o número de estágios mínimo uma razão de refluxo infinita. Existem métodos de cálculo para estes limites; estes são cálculos “shortcut” que estão baseados em equações teóricas, geralmente simplificadas. Estes cálculos consideram a mistura multicomponente como uma mistura binária, já que só se precisa a composição de dois componentes da mistura, a do componente chave leve e a do chave pesado. Chamam-se componentes chaves aqueles que se encontram distribuídos entre os produtos. O componente chave leve é aquele que tem uma volatilidade maior no produto da base e o chave pesado é aquele que tem menor volatilidade no produto de topo (Coulson e Richarson, 1991).

Na prática não é possível que uma coluna opere com o número mínimo de estágios devido ao fato de que o diâmetro da coluna seria muito grande. Só simulando o processo com equações rigorosas MESH (King, 1980) é que se pode chegar perto deste valor e conferi-lo com o resultado teórico. Este resultado prático de número de estágios mínimo chama-se de número de estágios mínimo prático (Maciel, 1989) definido como o número de estágios mínimo com o qual uma coluna pode operar nas condições desejadas. Isto é verificado através da convergência do caso em estudo, com equações rigorosa.

No caso dos cálculos no simulador HYSIM, este número mínimo prático será o menor número de estágios em que é possível ter convergência no projeto de uma coluna. A convergência representara a possibilidade física do processo e a não convergência, a impossibilidade física do processo.

Para o estudo deste número de estágios mínimo prático, considerou-se três tipos de misturas, uma mistura binária ideal, uma mistura ternária, também ideal e uma mistura complexa que forma um azeótropo. Nos casos onde foi possível foram feitas comparações entre os resultados rigorosos e os cálculos “shortcut”. Para separar a mistura azeotrópica se usou o processo de destilação extrativa. Optou-se por usar o modelo de Peng-Robinson para o caso das misturas ideais e o método Unifac para a mistura azeotrópica, representando a fase líquida.

3.2 SISTEMA BINÁRIO

A mistura escolhida foi a de n-hexano e n-heptano, uma mistura binária ideal. A figura 3.1 mostra a curva de equilíbrio desta mistura obtida através de cálculos “Flash” no próprio simulador, para uma pressão de 1 atmosfera.

Fizeram-se os cálculos, no simulador, pelo método rigoroso e pelo “shortcut”, variando a composição de n-hexano na corrente de alimentação de 0,05 até 0,95 em intervalos de 0,05.

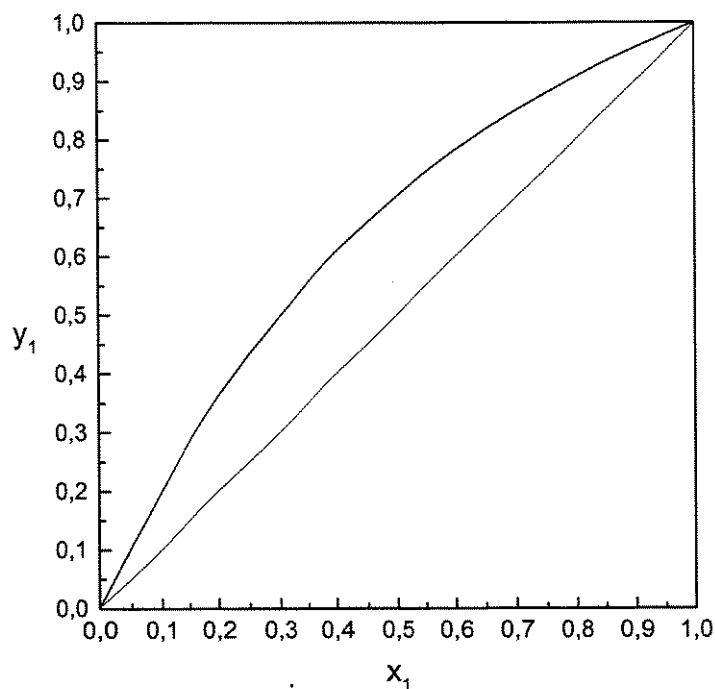


Figura 3.1 Curva de equilíbrio da mistura n-hexano (1), n-heptano (2)

3.2.1 CÁLCULO RIGOROSO

Uma vez montada a coluna no simulador, deve-se optar por algumas especificações de acordo com o tipo de coluna. Estas especificações dependerão dos graus de liberdade do sistema. Para uma coluna convencional com um condensador total e um refeedor, o número de especificações necessário é 3 (HYPROTECH, 1994). O simulador especifica automaticamente a razão de refluxo, a vazão molar de vapor e a vazão molar do produto destilado. Estas especificações podem ser mudadas dependendo de cada caso. Como, neste trabalho, é importante obter-se produtos de alta pureza, mudam-se estas especificações para as seguintes:

1. Vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-heptano líquido no estágio n deve ser 0,9999

Onde o estágio 1 representa o condensador e o estágio n o refeedor.

Aplicando-se o conceito de número de estágios mínimo prático, usa-se um método de busca da menor coluna em que há convergência, que é função do número de estágios e da posição ótima de alimentação. Começamos com um número arbitrário de estágios 40 ou 50, calcula-se a posição ótima da alimentação deste mesmo número de estágios considerado. Daí diminuimos o número de estágios cumprindo o procedimento acima, e assim chegamos ao valor pretendido, quando, diminuindo mais não há convergência.

Na tabela 3.1, mostram-se, como exemplo, os últimos passos para encontrar o número de estágios mínimo para a mistura 45-55% de n-hexano e n-heptano. Para se encontrar a posição ótima de alimentação, esta foi sendo mudada prato a prato até chegar naquele que promova um mínimo de energia no refeedor. Como se pode observar, para uma coluna com 23 estágios, existem 8 estágios nos quais a coluna converge, e o menor número de estágios com os quais a coluna pode operar é 21, e para esse número de estágios, a alimentação só pode ser no estágio 21, que é o refeedor. Já para uma coluna com um número de estágios menor que 21, os cálculos não convergem.

Tabela 3.1 Exemplo do cálculo do número de estágios mínimo prático para a mistura 45-55% de n-hexano e n-heptano a 1 atm.

Número de Estágios	Estágio de Alimentação	Energia no Refervedor [kcal/h]
23	23	2,3E+10
23	22	1,6E+12
23	21	1,9E+12
23	20	2,8E+12
23	19 ao 6	Não Converge
23	5	6,4E+12
23	4	8,6E+9
23	3	6,7E+10
23	2	1,9E+10
22	22	7,0E+14
22	21	1,1E+12
22	20 ao 2	Não Converge
21	21	1,8E+12
21	2 ao 20	Não Converge
20	2 ao 20	Não Converge
19	2 ao 19	Não Converge

Nas simulações, que se mostraram na tabela 3.1, observou-se que quando se está perto do número de estágios mínimo ou nesse estágio, vão diminuindo os estágios de alimentação nos quais o cálculo da coluna converge. Usualmente, quando se está trabalhando com um número de estágios que é o mínimo prático, a coluna converge só com um estágio de alimentação. Na tabela 3.2 mostram-se os resultados das simulações para o número mínimo prático de estágios e as posições ótimas de alimentação.

Pode-se ver que para esta mistura de n-hexano e n-heptano, o número de estágios mínimo prático oscila entre 21 e 22 para toda a faixa de concentrações, e que a alimentação, geralmente entra no refervedor.

Tabela 3.2 Número de estágios mínimo prático e posição ótima de alimentação

Alimentação			Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Energia no Refervedor [kcal/h]
Vazão [kgmol/h]	Composição					
	n-hexano	n-heptano				
100	0,05	0,25	22	3	1,8E+5	6,18E+9
100	0,10	0,90	22	22	1,3E+7	8,72E+11
100	0,15	0,85	21	21	3,8E+7	3,94E+12
100	0,20	0,80	21	21	1,2E+8	1,64E+13
100	0,25	0,75	21	21	8,2E+7	1,43E+13
100	0,30	0,70	22	22	2,8E+6	5,80E+11
100	0,35	0,65	21	21	6,4E+6	1,56E+12
100	0,40	0,60	21	21	6,0E+6	1,66E+12
100	0,45	0,55	21	21	5,6E+6	1,76E+12
100	0,50	0,50	21	21	1,3E+7	4,56E+12
100	0,55	0,45	21	21	6,1E+6	2,31E+12
100	0,60	0,40	21	21	5,9E+6	2,44E+12
100	0,65	0,35	21	21	6,8E+6	3,06E+12
100	0,70	0,30	21	21	1,3E+8	6,45E+13
100	0,75	0,25	21	21	2,1E+8	1,10E+14
100	0,80	0,20	22	22	4,2E+6	2,31E+12
100	0,85	0,15	22	2	9,9E+4	5,84E+10
100	0,90	0,10	22	22	6,3E+6	3,96E+12
100	0,95	0,05	21	21	1,3E+7	8,31E+12

Observando-se a tabela de resultados, nota-se que para os valores da mistura 85% de n-hexano e 15% de n-heptano, há uma incongruência nos resultados. Uma alimentação no estágio 2 parece um erro se se comparar com os outros casos onde a alimentação é no refrervador. Porém, este valor foi conferido e é efetivamente o estágio no qual a energia requerida no refrervador é a mínima. Se se fosse comparar este resultado com uma alimentação no estágio 22 ou 21, a energia requerida é de 1,68E+14 e 3,55E+13 kcal/h, respectivamente. Por outro lado, conferiu-se também a posição ótima de

alimentação para a mistura de 90% de n-hexano com a alimentação no estágio 2 e o resultado foi de $5,71\text{E}+12$ kcal/h.

Já que os cálculos consideram o número de estágios mínimo para uma determinada separação, é de se esperar ter um alto valor para a razão de refluxo, já que o número mínimo de estágios corresponde a um refluxo total (Henley, 1981), o que significa que não se tem produto destilado, tudo volta para a coluna como refluxo. Por tanto, os valores das vazões no interior da coluna serão muito elevadas.

As figuras 3.2 e 3.3 mostram como os fluxos e as frações molares de líquido e vapor no interior da coluna variam com o número do estágio, para a mistura 50-50%. Pode-se ver que, tanto as vazões de líquido como de vapor, estão na ordem de 6×10^8 kgmol/h.

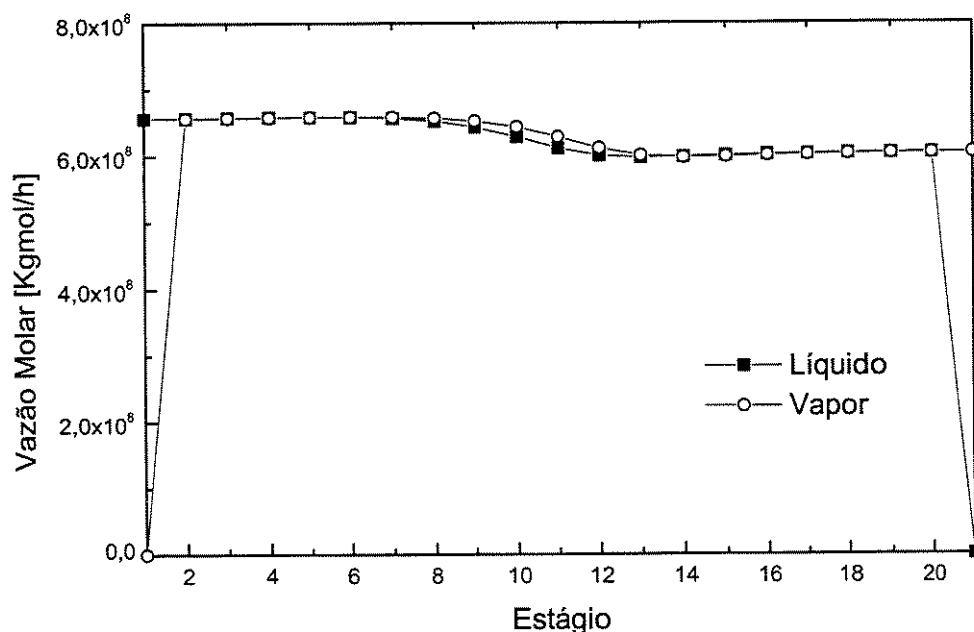


Figura 3.2 Fluxo de líquido e vapor com o número do estágio

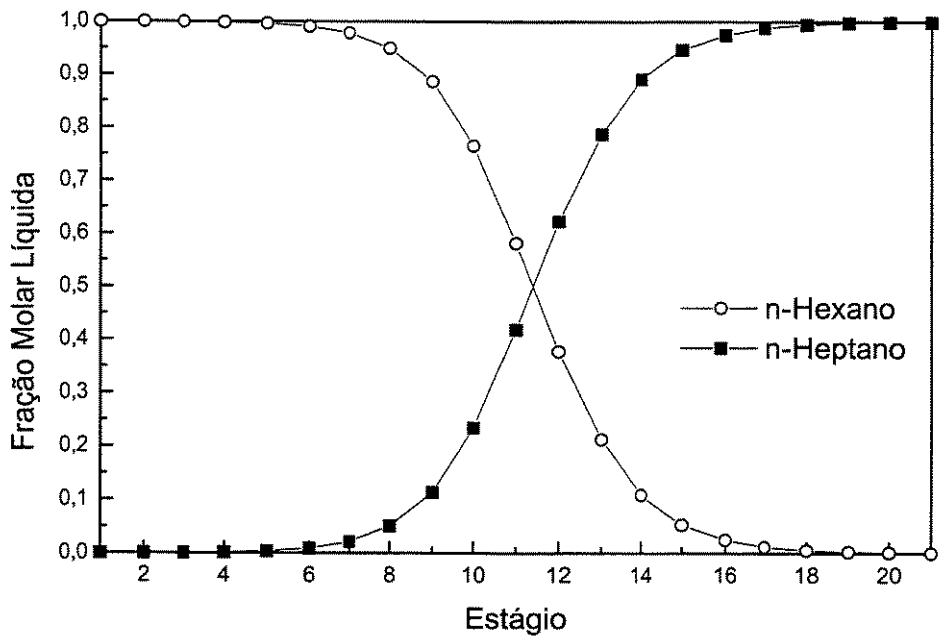


Figura 3.3-(a) Fração molar de líquido através da coluna

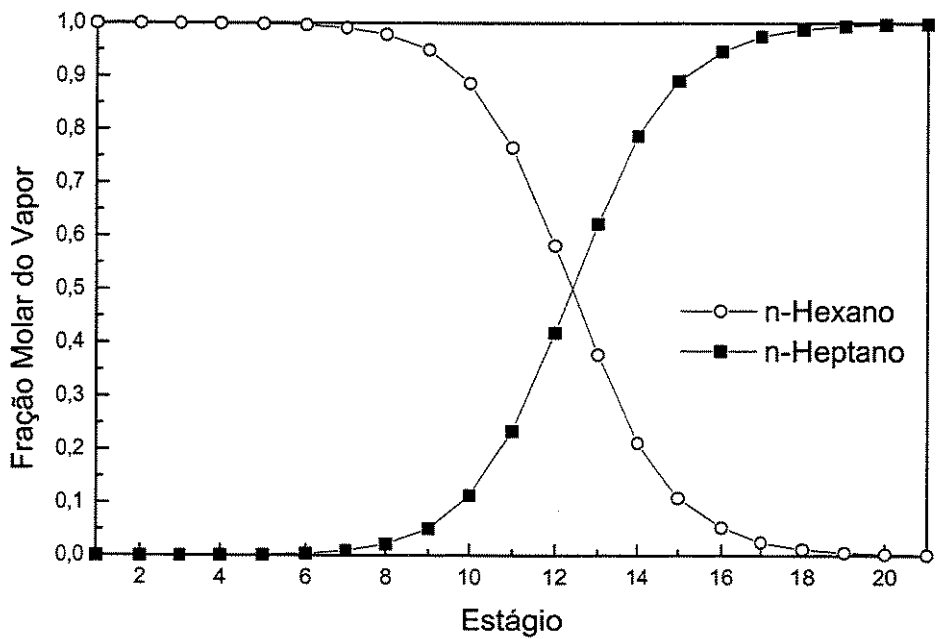


Figura 3.3-(b) Fração molar de vapor através da coluna

A figura 3.2, que corresponde ao perfil de fluxo do líquido e do vapor através da coluna, mostra que o fluxo do líquido desce rapidamente na base da coluna, estágio número 21; e no caso do fluxo de vapor, o fluxo desce no topo, estágio número 1. No caso das frações molares, pode-se ver que tanto no topo como na base da coluna tem-se produtos com uma elevada pureza.

Em todas as simulações se especificou a pureza dos produtos, cumprindo assim com um de nossos objetivos que é a obtenção de produtos de alta pureza. Estes são os resultados para as especificações propostas. Como podemos ver na tabela 3.3, as correntes de produtos tem uma alta pureza, que na maioria dos casos alcança os 99,99%.

Tabela 3.3 Composição dos produtos da destilação

Alimentação			Topo			Fundo		
Vazão	Composição		Vazão	Composição		Vazão	Composição	
kgmol/h	n-C6	n-C7	kgmol/h	n-C6	n-C7	kgmol/h	n-C6	n-C7
100	0,05	0,95	4,9943	0,9996	0,0004	95,0057	0,0001	0,9999
100	0,10	0,90	9,9788	0,9999	0,0001	90,0212	0,0002	0,9998
100	0,15	0,85	14,9540	0,9999	0,0001	85,0460	0,0006	0,9994
100	0,20	0,80	19,9581	0,9999	0,0001	80,0419	0,0005	0,9995
100	0,25	0,75	24,9609	0,9999	0,0001	75,0391	0,0006	0,9994
100	0,30	0,70	29,9857	0,9999	0,0001	70,0143	0,0002	0,9998
100	0,35	0,65	34,9684	0,9999	0,0001	65,0316	0,0005	0,9995
100	0,40	0,60	39,9715	0,9999	0,0001	60,0285	0,0005	0,9995
100	0,45	0,55	44,9747	0,9999	0,0001	55,0253	0,0005	0,9995
100	0,50	0,50	49,9781	0,9999	0,0001	50,0219	0,0005	0,9995
100	0,55	0,45	54,9811	0,9999	0,0001	45,0189	0,0005	0,9995
100	0,60	0,40	59,9843	0,9999	0,0001	40,0157	0,0005	0,9995
100	0,65	0,35	64,9876	0,9999	0,0001	35,0124	0,0005	0,9995
100	0,70	0,30	69,9908	0,9999	0,0001	30,0092	0,0005	0,9995
100	0,75	0,25	74,9938	0,9999	0,0001	25,0062	0,0005	0,9995
100	0,80	0,20	80,0031	0,9999	0,0001	19,9969	0,0002	0,9998
100	0,85	0,15	85,0230	0,9997	0,0003	14,9770	0,0001	0,9999
100	0,90	0,10	90,0067	0,9999	0,0001	9,9933	0,0002	0,9998
100	0,95	0,05	95,0067	0,9999	0,0001	4,9933	0,0005	0,9995

3.2.2 CÁLCULO “SHORTCUT” PARA O NÚMERO DE ESTÁGIOS MÍNIMO

O método “shortcut” consiste em cálculos baseados em equações e balanços simplificados ou fórmulas empíricas de fácil aplicação que fornecem resultados aproximados. Estes cálculos são muito utilizados pela simplicidade e rapidez para chegar aos resultados. Antigamente, este tipo de cálculo era utilizado para o projeto de colunas de destilação, mas hoje em dia, estes cálculos são utilizados como estimativas iniciais dos métodos rigorosos.

O número de estágios requeridos para uma separação desejada em condições de refluxo total pode ser encontrado aplicando a equação de Fenske, (Coulson, 1991 e Henley, 1981):

$$N_{\min} + 1 = \frac{\log \left\{ \left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}} \right)_D \left(\frac{x_{HK}}{x_{LK}} \right)_B \right\}}{\log(\alpha_{LK/HK})} \quad (3.1)$$

Nesta equação, o número de estágios mínimo, $N_{\min}$, está em função das composições dos chamados componentes chaves, x_{LK} e x_{HK} , tanto do produto destilado como do produto de fundo, e da volatilidade relativa média, $\alpha_{LK/HK}$. Os componentes chaves, numa mistura multicomponente, estão distribuídos entre os produtos e, geralmente, são componentes adjacentes em volatilidade. A volatilidade relativa média é uma razão entre a volatilidade do componente chave leve e a volatilidade do componente chave pesado, e é considerada como constante ao longo da coluna.

Assim como a equação para o número mínimo de estágios, existe uma equação para a localização ótima do estágio de alimentação. Esta equação é conhecida como a equação de Kirkbride (Kirkbride, 1944) e é uma razão entre o número de estágios na zona de retificação e o número de estágios na zona de esgotamento (Henley, 1981). Como a equação de Fenske, a equação de Kirkbride está baseada nas frações molares dos componentes chaves dos produtos e da alimentação, e nas vazões dos produtos destilado e fundo. Tendo o número de estágios total da coluna, e esta razão pela equação de Kirkbride, pode-se calcular quantos pratos há em cada zona da coluna, determinando, assim, a localização da alimentação.

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[\left(\frac{z_{HK,F}}{z_{LK,F}} \right) \left(\frac{x_{LK,B}}{x_{HK,D}} \right)^2 \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0,206} \quad (3.2)$$

Para comparar o resultados das simulações com o cálculo rigoroso, fizeram-se as mesmas simulações pelo cálculo “shortcut”. Como é preciso, para este cálculo, especificar um valor da razão de refluxo para calcular o número de estágios teóricos, usou-se para cada caso, o valor obtido no cálculo rigoroso. Desta forma, o número de estágios teóricos calculados por este método coincide com o número mínimo de estágios. Isto é importante já que a posição da alimentação é dada para o número de estágios teóricos e não para o número mínimo de estágios. Na tabela 3.4 mostram-se os resultados destas simulações. Convém salientar que o arredondamento feito para o número de estágios, no método “shortcut”, é sempre para acima.

Tabela 3.4 Resultados da simulação pelo cálculo “shortcut”

Alimentação			Número Mínimo de Estágios	Número de Pratos Teóricos	Estágio de Alimentação	Razão de Refluxo
Vazão [kgmol/h]	Composição					
	n-C6	n-C7				
100	0,05	0,95	22	22	17,2	1,7E+05
100	0,10	0,90	22	22	15,9	1,2E+07
100	0,15	0,85	22	22	14,9	3,7E+07
100	0,20	0,80	22	22	14,1	1,1E+08
100	0,25	0,75	22	22	13,5	8,2E+07
100	0,30	0,70	22	22	12,9	2,7E+06
100	0,35	0,65	22	22	12,4	6,4E+06
100	0,40	0,60	22	22	11,9	5,9E+06
100	0,45	0,55	22	22	11,4	5,6E+06
100	0,50	0,50	22	22	10,9	1,3E+07
100	0,55	0,45	22	22	10,4	6,0E+06
100	0,60	0,40	22	22	10,0	5,8E+06
100	0,65	0,35	22	22	9,5	6,7E+06
100	0,70	0,30	22	22	9,0	1,3E+08
100	0,75	0,25	22	22	8,4	2,1E+08
100	0,80	0,20	22	22	7,8	4,1E+06
100	0,85	0,15	22	22	7,1	9,9E+04
100	0,90	0,10	22	22	6,2	6,3E+06
100	0,95	0,05	22	22	4,9	1,2E+07

O que é muito diferente, entre os dois métodos de cálculo, é a posição de alimentação. No caso do cálculo rigoroso o estágio de alimentação, na maioria dos casos, resulta ser o próprio refeedor. Entretanto para o “shortcut”, o estágio de alimentação fica acima do refeedor para misturas diluídas no componente mais leve, e conforme a composição deste aumenta, a posição da alimentação vai mudando gradualmente em direção ao topo da coluna. Deve-se considerar que está-se trabalhando com o número mínimo de estágios. Em outras circunstâncias, a posição ótima de alimentação, pelo

método rigoroso, estaria localizada acima do refeedor, dependendo do número de estágios, da composição e da natureza da mistura de alimentação.

3.2.3 CÁLCULOS PARA BAIXA PRESSÃO

Para ver o comportamento do número de estágios mínimo com a pressão, considerou-se a mistura 50-50% de n-hexano, n-heptano, e mudou-se a pressão de uma atmosfera ou 760 mmHg, para 100 mmHg. As comparações dos resultados das simulações a 760 e 100 mmHg, estão nas tabelas 3.5 e 3.6.

Tabela 3.5 Resultados das simulações rigorosas

	P = 760 mmHg	P = 100 mmHg
Número de estágios mínimo :	21	17
Prato de alimentação ótimo:	21	17
Razão de refluxo :	1,3E+7	8,3E+6
Energia no Refeedor [kcal/h]:	4,6E+12	3,2E+12

Tabela 3.6 Resultados das simulações “shortcut”

	P = 760 mmHg	P = 100 mmHg
Número de estágios:	21,83	16,32
Prato de alimentação:	10,92	8,16
Razão de refluxo :	1,3E+7	8,3E+6
Número mínimo de estágios:	21,8327	16,3160
Refluxo mínimo :	1,51	0,96

Pode-se ver claramente o efeito da pressão no tamanho da coluna. Em ambos casos, tanto para os cálculos rigorosos como para os “shortcut”, o número de estágios está relacionado à pressão da coluna. Neste caso, para uma pressão de 100 mmHg, tem-se 17 estágios em vez dos 21 estágios para uma

pressão de 760 mmHg, o que significa que uma diminuição na pressão leva a um número menor de estágios. Forem mantidos os números decimais nos cálculos “shortcut” pois os valores vem de cálculos analíticos e por conveniência deixou-se assim. É claro que para aplicações em simulação eles devem ser arredondados.

3.3 SISTEMA TERNÁRIO

Para o caso de uma mistura multicomponente ternária, os componentes n-hexano, n-heptano e n-octano foram considerados. Esta mistura tem também um comportamento ideal, como no caso anterior, só que agora, para obter os componentes com uma alta pureza, é preciso usar duas colunas para separá-los. O número de estágios mínimo dependerá da composição de alimentação e do arranjo das colunas a serem usadas.

3.3.1 DETERMINAÇÃO DO NÚMERO DE ESTÁGIOS MÍNIMO PRÁTICO E O ESTÁGIO ÓTIMO DE ALIMENTAÇÃO

Assim como para a destilação binária, foram determinados, pela mesma metodologia, o número de estágios mínimo prático e o prato ótimo de alimentação. Isto foi feito para cada coluna nos dois arranjos, a sequência direta e a indireta (figuras 3.4). Nestas figuras os componentes A, B, C decrescem em volatilidade.

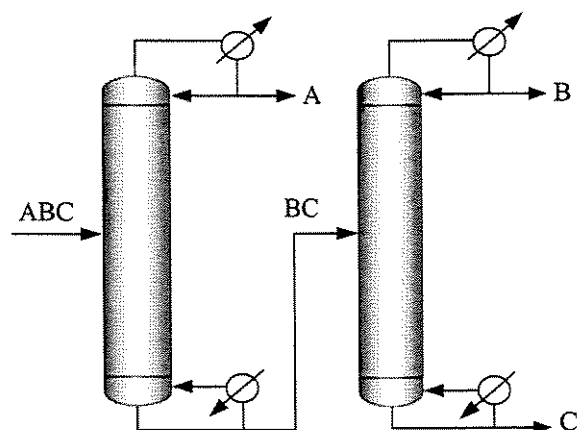


Figura 3.4 (a) Sequência direta

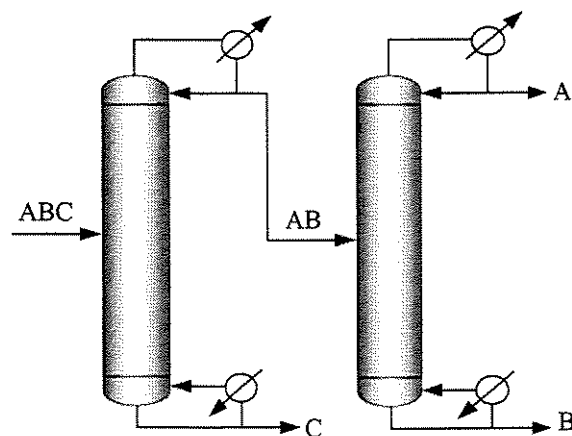


Figura 3.4 (b) Sequência indireta

Para o cálculo pelo método rigoroso é preciso mudar as especificações iniciais para obter os produtos desejados com uma alta pureza. Não é mais possível especificar as composições de dois componentes puros porque para a sequência direta o n-hexano sai praticamente puro no topo, mas na base o produto é uma mistura de n-heptano e n-octano, dos quais a composição muda

de acordo a sua composição na alimentação. Nas especificações, o estágio, n , representa o refeedor.

Para a sequência direta, as especificações foram:

Coluna 1

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-hexano líquido no estágio n deve ser 0,0001

Com a primeira especificação, estamos garantindo que o condensador será um condensador total. Com as outras duas, que o produto do topo será praticamente n-hexano puro, tendo um mínimo deste na base da coluna, permitindo que praticamente os outros dois componentes saiam pela base.

Coluna 2

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-heptano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio n deve ser 0,9999

As especificações da segunda coluna garantem que os produtos serão n-heptano no topo e n-octano na base, com uma pureza de 99,99% em cada caso.

Para a sequência indireta, as especificações usadas foram as mesmas, a única coisa que muda é a posição e o componente puro a ser retirado, já que

neste caso o n-octano é separado no fundo da primeira coluna. As especificações para este arranjo foram:

Coluna 1

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h,
2. A fração molar do n-octano líquido no estágio n deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio 1 deve ser 0,0001

Isto garante que no topo da coluna, tem-se prioritariamente uma mistura de n-hexano e n-heptano, e na base o n-octano praticamente puro.

Coluna 2

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h,
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-heptano líquido no estágio n deve ser 0,9999

Nesta segunda coluna separam-se o n-hexano, que é o produto de topo, e o n-heptano, que é o produto da base, ambos com uma pureza de 99,99%.

A seguir mostram-se os resultados das simulações para a sequência direta nas tabelas 3.7, para a primeira coluna, e 3.8, para a segunda. Em todos os casos, a pureza de todos os produtos foi de 99,99%.

Tabela 3.7 Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência direta

Alimentação				COLUNA 1			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,33	0,33	0,34	24	2	8,9E+08	2,0E+14
100	0,50	0,10	0,40	25	10	2,4E+01	8,9E+06
100	0,10	0,50	0,40	25	3	5,7E+07	4,0E+12
100	0,50	0,40	0,10	26	12	2,0E+02	7,0E+07

Tabela 3.8 Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência direta

Alimentação				COLUNA 2			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,00	0,49	0,51	25	2	1,3E+06	3,2E+11
100	0,00	0,20	0,80	26	26	3,1E+07	2,4E+12
100	0,00	0,56	0,44	24	24	1,7E+08	6,5E+13
100	0,00	0,80	0,20	24	24	7,4E+07	2,3E+13

Para a sequência indireta se realizaram as mesmas simulações. Os resultados para este arranjo se encontram nas tabelas 3.9 e 3.10.

Tabela 3.9 Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência indireta

Alimentação				COLUNA 1			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,33	0,33	0,34	27	26	7,4E+07	3,7E+13
100	0,50	0,10	0,40	25	25	4,9E+07	2,1E+13
100	0,10	0,50	0,40	27	27	7,7E+07	3,6E+13
100	0,50	0,40	0,10	27	27	1,3E+08	8,5E+13

Tabela 3.10 Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência indireta

Alimentação				COLUNA 2			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Refervedor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,50	0,50	0,00	21	21	6,4E+06	1,5E+12
100	0,83	0,17	0,00	22	22	6,9E+07	2,4E+13
100	0,17	0,83	0,00	21	21	4,5E+07	3,1E+12
100	0,56	0,44	0,00	21	21	6,1E+06	2,1E+12

Para o primeiro arranjo, a sequência direta, os valores do número de estágio mínimo prático variam de 24 a 26 para a primeira coluna e no segundo arranjo, sequência indireta, estes variam de 25 a 27. Para a segunda coluna, no primeiro arranjo o número de estágios mínimo prático varia entre 24 e 26, igual ao da primeira coluna, enquanto que para o segundo arranjo estes variam entre 21 e 22. Isto é lógico já que para a primeira coluna, é mais fácil separar o n-hexano da sequência direta que o n-octano da sequência indireta, e para a segunda coluna acontece a mesma coisa, a mistura binária da sequência indireta é mais fácil de separar que a mistura binária da sequência direta.

Mais uma vez, como se trata do número mínimo de estágios, a razão de refluxo tende ao infinito, o que explica os altos valores nos resultados de razão de refluxo. A mesma coisa acontece com a energia requerida no refervedor, já que esta é diretamente proporcional à razão de refluxo.

Somando-se os valores para a energia requerida pelos refervedores em cada arranjo, pode-se observar que para misturas com uma concentração alta do componente mais volátil, a sequência direta é mais eficiente que a indireta, como é o caso das misturas 50-10-40% e 50-40-10% de n-hexano, n-heptano e

n-octano. Usando o arranjo de sequência direta, estas misturas requerem um calor total nos refeedores de $2,4 \text{ E}+12$ e $2,3 \text{ E}+12 \text{ kcal/h}$, respectivamente, enquanto que usando uma sequência indireta estas requerem $4,5 \text{ E}+13$ e $8,71 \text{ E}+13 \text{ kcal/h}$, respectivamente. O contrário acontece quando o componente mais volátil é minoritário, o calor total requerido para a sequência indireta é menor que o requerido para a sequência direta. Isto prova que dependendo da composição da alimentação uma sequência pode ser preferida em relação à outra, em termos de gastos energéticos.

A posição do prato ótimo de alimentação na maioria dos casos se encontra no refeedor, exceto para a primeira coluna da sequência direta, para a qual em nenhum dos casos se encontrou o refeedor como posição ótima de alimentação.

Trabalhou-se também com misturas diluídas, com composições de 0,05, 0,15 e 0,80, da mesma mistura, n-hexano, n-heptano e n-octano. Os mesmos cálculos foram realizados usando-se as mesmas especificações que para o caso anterior. Os resultados destas simulações estão nas tabelas 3.11 e 3.12, para a sequência direta, e 3.13 e 3.14, para a sequência indireta.

Tabela 3.11 Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência direta, para misturas diluídas

Alimentação				COLUNA 1			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Refeedor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,05	0,80	0,15	25	3	$3,0 \text{ E}+09$	$1,1 \text{ E}+14$
100	0,05	0,15	0,80	24	4	$3,7 \text{ E}+05$	$1,3 \text{ E}+10$
100	0,80	0,05	0,15	25	9	$2,4 \text{ E}+01$	$1,4 \text{ E}+07$
100	0,80	0,15	0,05	26	10	$6,5 \text{ E}+01$	$3,7 \text{ E}+07$

Tabela 3.12 Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência direta, para misturas diluídas

Alimentação				COLUNA 2			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,00	0,84	0,16	24	23	1,4E+08	8,3E+13
100	0,00	0,16	0,84	26	2	2,2E+05	2,6E+10
100	0,00	0,25	0,75	24	2	1,1E+07	4,1E+11
100	0,00	0,75	0,25	25	25	2,7E+07	3,1E+12

Nestas simulações pode-se observar que para a primeira coluna, a posição de alimentação vai mudando principalmente com a composição do componente mais leve. Já para o caso da separação binária na segunda coluna, a posição de alimentação se encontra ou no topo ou na base da coluna e depende da composição do componente mais leve. Pode-se ver que para misturas concentradas em n-heptano a posição ótima de alimentação se encontra na base da coluna e para misturas um pouco mais diluídas a posição ótima se encontra no topo da coluna.

Nas simulações para a sequência indireta, nas tabelas a seguir, pode-se observar que a posição da alimentação está em todos os casos na base da coluna, para as duas colunas.

Tabela 3.13 Número de estágios mínimo prático para a coluna 1 da sequência indireta, para misturas diluídas

Alimentação				COLUNA 1			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Refervedor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,05	0,80	0,15	28	28	9,3E+07	6,0E+13
100	0,05	0,15	0,80	27	27	9,4E+06	1,4E+12
100	0,80	0,05	0,15	24	24	1,7E+04	9,9E+09
100	0,80	0,15	0,05	25	25	1,6E+08	1,1E+14

Tabela 3.14 Número de estágios mínimo prático para a coluna 2 da sequência indireta, para misturas diluídas

Alimentação				COLUNA 2			
Vazão kgmol/h	Composição			Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Refervedor [kcal/h]
	n-C6	n-C7	n-C8				
100	0,06	0,94	0,00	21	21	4,7E+07	1,1E+12
100	0,25	0,75	0,00	21	21	8,3E+07	2,9E+12
100	0,94	0,06	0,00	22	21	5,9E+05	3,3E+11
100	0,84	0,16	0,00	23	22	1,8E+08	1,0E+14

Em nenhuma das simulações, tanto para a sequência direta como para a indireta, é fácil perceber uma dependência do número de estágios com a composição para nenhuma das colunas. Porém, não é possível dizer qual dos arranjos é o ótimo em termos do número de estágios ou do consumo de energia, isso dependerá da natureza e da composição da mistura a ser separada. Isto contradiz com alguma bibliografia, que diz que a sequência direta é geralmente mais eficiente devido a que cada componente é vaporizado só uma vez (Treybal, 1981).

3.3.2 CÁLCULO “SHORTCUT” PARA O NÚMERO MÍNIMO DE ESTÁGIOS

Foram feitas algumas simulações “shortcut” para compará-las com os cálculos pelo método rigoroso. Para isto pegamos o caso 33-33-34 % n-hexano, n-heptano e n-octano, e fizemos estas simulações nos dois possíveis arranjos. Na tabela 3.15 se mostram os resultados para a simulação da sequência direta, e na tabela 3.16 se mostram os resultados para a sequência indireta.

Tabela 3.15 Resultados da simulação “shortcut” para o arranjo 1

Coluna 1		Coluna 2	
Composição de Alimentação		Composição de Alimentação	
n-hexano	0,3300	n-hexano	0,0000
n-heptano	0,3300	n-heptano	0,4925
n-octano	0,3400	n-octano	0,5075
Número mínimo de estágios	21,6553	Número mínimo de estágios	25,5070
Razão de Refluxo mínimo	1,7399	Razão de Refluxo mínimo	1,9172
Número de estágios teóricos	21,6553	Número de estágios teóricos	25,5070
Estágio de alimentação	11,6162	Estágio de alimentação	12,8328
Razão de refluxo	8,9E+8	Razão de refluxo	1,2E+6

Obs: Chama-se atenção para o fato dos números decimais. Eles estão assim propositadamente, uma vez que vem de cálculos analíticos “shortcut”.

Tabela 3.16 Resultados da simulação “shortcut” para o arranjo 2

Coluna 1		Coluna 2	
Composição de Alimentação		Composição de Alimentação	
n-hexano	0,3300	n-hexano	0,5001
n-heptano	0,3300	n-heptano	0,4999
n-octano	0,3400	n-octano	0,0000
Número mínimo de estágios	22,8330	Número mínimo de estágios	21,8326
Razão de Refluxo mínimo	0,8877	Razão de Refluxo mínimo	1,5087
Número de estágios teóricos	22,8330	Número de estágios teóricos	21,8327
Estágio de alimentação	10,6725	Estágio de alimentação	10,9157
Razão de refluxo	7,4E+7	Razão de refluxo	6,3E+6

Para a primeira coluna não coincidiram os cálculos “shortcut” e os rigorosos no número de estágios mínimo para nenhum dos arranjos. Para a segunda coluna, estes resultados coincidiram para os dois arranjos. Isto significa que o cálculo “shortcut” é uma boa aproximação do rigoroso só quando de trata de misturas binárias (em termos do número de estágios).

Novamente, pode-se ver que no cálculo “shortcut”, a localização do estágio de alimentação é muito diferente ao encontrado pelo cálculo rigoroso. No cálculo “shortcut”, o prato de alimentação fica próximo do meio da coluna, enquanto que no rigoroso, fica próximo dos extremos da coluna, geralmente a base.

3.4 COLUNA DE DESTILAÇÃO COM SAÍDA LATERAL

Um outro caso estudo para este trabalho foi separar a mesma mistura ternária em uma coluna só, usando uma saída lateral. Para este tipo de arranjo, o produto da saída lateral poderá sair como líquido ou como vapor.

Uma representação deste tipo de coluna é como ilustra a figura 3.5:

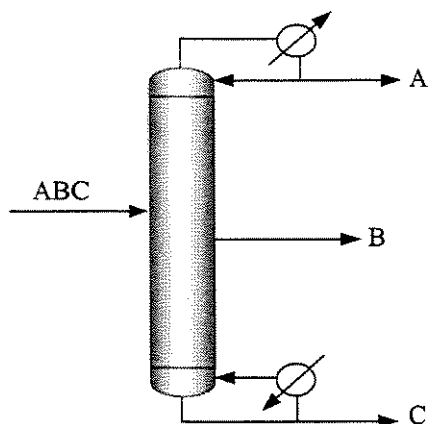


Figura 3.5 Coluna de destilação com saída lateral

Vale ressaltar que o que se quer é obter os três produtos com uma alta pureza. Para isto tem que se procurar na coluna não só o prato ótimo de alimentação mas também o prato ótimo para a saída lateral.

Considerar-se-á como exemplo o caso 33-33-34% n-hexano, n-heptano, n-octano, primeiro com uma saída lateral na fase líquida. As figuras 36 e 37 mostram os gráficos de vazão e de composição do líquido com o número de estágios tomando em conta a corrente lateral líquida.

A figura 3.6 mostra que as vazões molares tanto de líquido como de vapor, diminuem com o número de estágios. Os altos valores das vazões no interior da coluna impedem ver o efeito da saída lateral.

Observando-se a figura 3.7, composição de líquido ao longo da coluna, pode-se notar que a concentração máxima de n-heptano está entre os estágios

11 e 12. Então a posição ótima para colocar a saída lateral estará entre estes dois estágios.

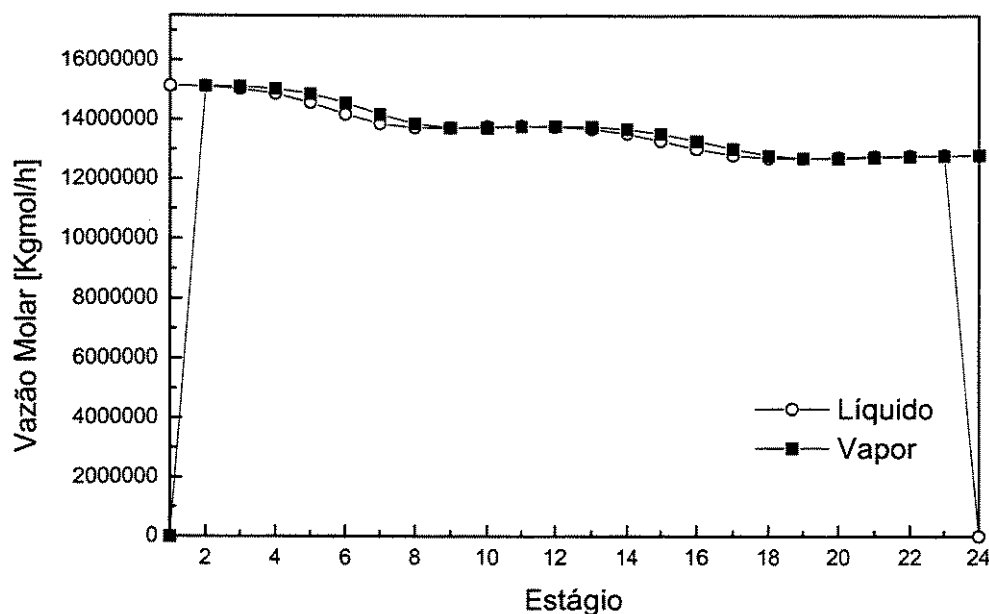


Figura 3.6 Gráfico de vazões molares com o número do estágio

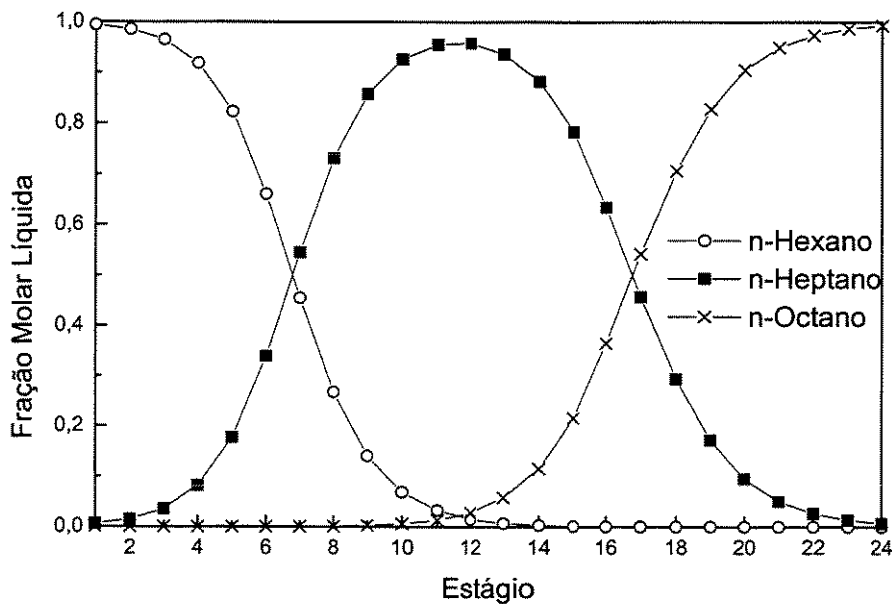


Figura 3.7 Gráfico da composição do líquido com o número do estágio

Para a simulação de uma coluna de destilação com uma saída lateral, o número de especificações aumenta de 3 para 4 devido à saída lateral. Para o caso de nosso exemplo as novas especificações para a coluna foram:

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9940
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio 24 deve ser 0,9930
4. A retirada lateral de líquido no estágio 12 deve ser 34,0 kgmol/h

Com este tipo de arranjo é impossível obter todos os produtos com uma altíssima pureza (0,9999), já que para tal caso seria preciso um número muito maior de estágios. Então para que este arranjo funcione, tem-se que perder um pouco na qualidade dos produtos. Os resultados das simulações realizadas para uma coluna com saída lateral líquida foram:

Tabela 3.17-(a) Composições da alimentação e do topo da coluna

CASO	Alimentação				Topo			
	Vazão kgmol/h	Composição			Vazão kgmol/h	Composição		
		n-C6	n-C7	n-C8		n-C6	n-C7	n-C8
1	100	0,3300	0,3300	0,3400	32,70	0,9940	0,0060	0,0000
2	100	0,5000	0,1000	0,4000	50,22	0,9930	0,0070	0,0000
3	100	0,1000	0,5000	0,4000	9,28	0,9940	0,0060	0,0000
4	100	0,5000	0,4000	0,1000	49,82	0,9950	0,0050	0,0000

Tabela 3.17-(b) Composições da saída lateral e da base da coluna

CASO	Lateral				Base			
	Vazão kgmol/h	Composição			Vazão kgmol/h	Composição		
		n-C6	n-C7	n-C8		n-C6	n-C7	n-C8
1	34,00	0,0147	0,9579	0,0274	33,30	0,0000	0,0070	0,9930
2	9,80	0,0134	0,9642	0,0224	39,98	0,0000	0,0050	0,9950
3	51,00	0,0152	0,9731	0,0118	39,72	0,0000	0,0080	0,9920
4	41,00	0,0104	0,9684	0,0211	9,18	0,0000	0,0050	0,9950

Tabela 3.17-(c) Resultados da simulação da coluna com saída lateral líquida

CASO	Resultados				
	Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Saída Lateral	Razão de Refluxo	Refervedor [kcal/h]
1	24	2	12	4,6E+05	1,1E+11
2	25	10	12	5,1E+02	1,8E+08
3	25	3	12	1,6E+04	1,1E+09
4	26	12	13	1,9E+02	6,7E+07

Como se pode ver nas tabelas 3.17, não é possível recuperar o componente intermediário com a pureza que se obteve usando as sequências de colunas. Para um número mínimo prático de estágios, conseguiu-se correntes laterais com concentrações de 96 e 97% no componente intermediário, e isto pode melhorar aumentando o número de estágios e trabalhando com as vazões de produto. Embora o arranjo com saída lateral não tenha a mesma eficiência que as sequências de colunas, com os casos aqui apresentados a energia requerida no refervedor deste é muito menor comparada com o calor total requerido pelos refervedores nas sequências de colunas.

Para o caso de uma coluna com uma saída lateral de vapor é similar. Voltando ao exemplo de uma mistura de alimentação de 33-33-34%, foram calculados os estágios ótimos de alimentação e da saída lateral. Da figura 3.8 pode-se determinar que a posição ótima para a saída lateral está desta vez entre os estágios 12 e 13.

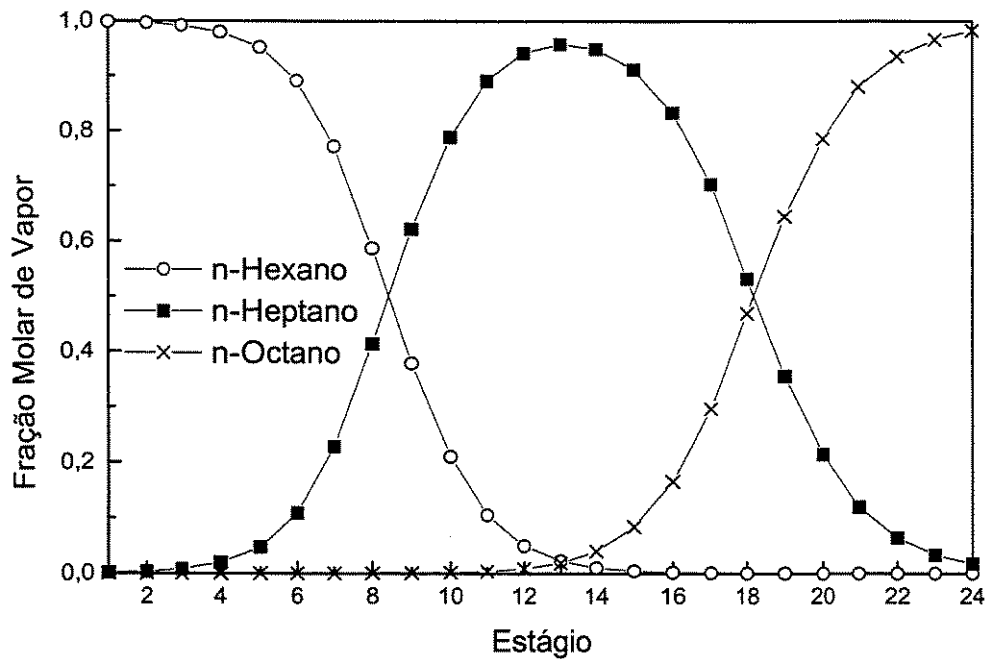


Figura 3.8 Gráfico da composição do vapor com o número do estágio

As especificações são praticamente as mesmas que no caso da coluna com saída lateral líquida, esta vez muda somente a posição e a fase da saída lateral:

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9970
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio 24 deve ser 0,9910
4. A retirada lateral de vapor no estágio 13 deve ser 34,0 kgmol/h

Os resultados das simulações para uma coluna com uma saída lateral de vapor, se encontram resumidos nas seguintes tabelas.

Tabela 3.18-(a) Composições da alimentação e do topo da coluna

CASO	Alimentação				Topo			
	Vazão [kgmol/h]	Composição			Vazão [kgmol/h]	Composição		
		n-C6	n-C7	n-C8		n-C6	n-C7	n-C8
1	100	0,3300	0,3300	0,3400	32,33	0,9967	0,0033	0,0000
2	100	0,5000	0,1000	0,4000	50,07	0,9950	0,0050	0,0000
3	100	0,1000	0,5000	0,4000	9,40	0,9931	0,0069	0,0000
4	100	0,5000	0,4000	0,1000	49,32	0,9960	0,0040	0,0000

Tabela 3.18-(b) Composições da saída lateral e da base da coluna

CASO	Lateral				Base			
	Vazão [kgmol/h]	Composição			Vazão [kgmol/h]	Composição		
		n-C6	n-C7	n-C8		n-C6	n-C7	n-C8
1	34,01	0,0229	0,9584	0,0187	33,67	0,0000	0,0090	0,9910
2	9,80	0,0183	0,9662	0,0155	40,13	0,0000	0,0070	0,9930
3	51,01	0,0131	0,9737	0,0132	39,60	0,0000	0,0069	0,9931
4	41,00	0,0215	0,9696	0,0089	9,68	0,0000	0,0050	1,0050

Tabela 3.18-(c) Resultados da simulação da coluna com saída lateral vapor

CASO	Resultados				
	Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Saída Lateral	Razão de Refluxo	Refervedor [kcal/h]
1	24	2	13	2,5E+06	5,6E+11
2	25	10	13	3,5E+02	1,2E+08
3	25	3	13	9,1E+09	6,0E+14
4	26	12	13	3,4E+03	1,2E+09

Observando-se os resultados das simulações, pode-se verificar que a coluna com saída lateral de vapor requer mais energia que uma coluna com saída lateral líquida, mas menos energia que as sequências de colunas. Como se está trabalhando com o número de estágios mínimo prático, é difícil comparar as posições ótimas para a retirada da corrente lateral, mas tanto para o caso com saída lateral líquida como para o caso com saída lateral de vapor, a posição ótima de alimentação é a mesma.

3.5 PROCESSO DE DESTILAÇÃO EXTRATIVA

No processo de destilação extrativa um agente é adicionado para mudar a volatilidade relativa entre os componentes chaves sem formar um novo azeótropo. A destilação extrativa é geralmente utilizada para realizar as separações entre componentes com pontos de bolha próximos para os quais a separação por destilação convencional seria economicamente inviável e/ou separar misturas que formam azeótropos.

Devido à sua baixa volatilidade, o solvente sempre sai da coluna extrativa como produto da base. Para manter o solvente através da coluna, o solvente deve ser introduzido próximo ao topo da coluna.

Para este estudo, trabalhou-se com uma mistura complexa que forma um azeótropo, a mistura etanol-água. A separação se realizou a 1 atm, mediante um processo de destilação extrativa, onde foi usado o etilenoglicol como solvente. Pode-se ver a curva de equilíbrio da mistura e a localização do azeótropo nas figuras 3.9-(a) e (b).

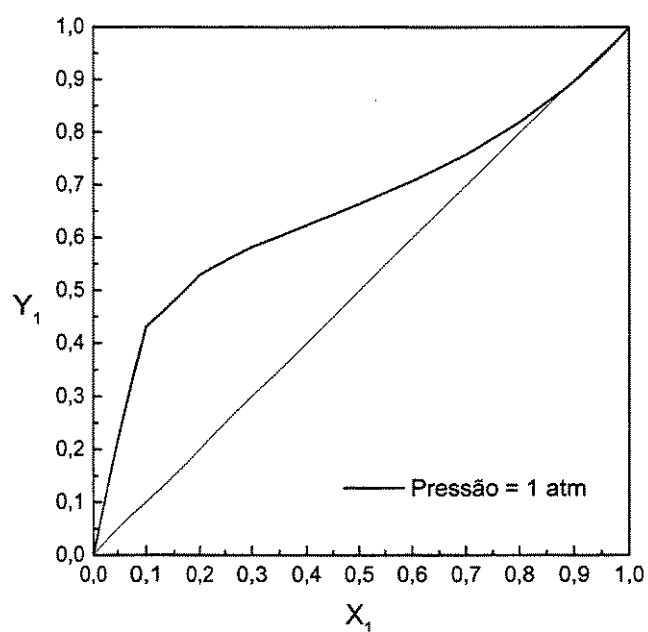


Figura 3.9-(a) Curva de equilíbrio da mistura etanol-água

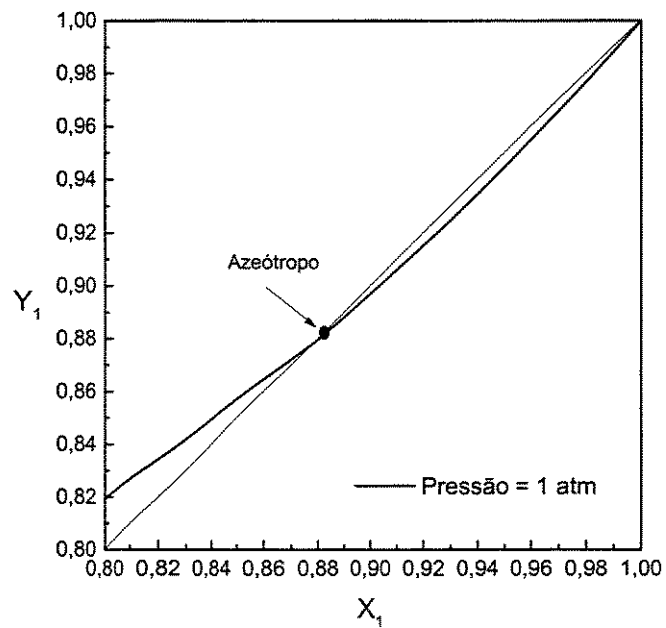


Figura 3.9-(b) Curva de equilíbrio da mistura etanol-água

O arranjo das colunas para este tipo de separação está ilustrado na figura 3.10. A mistura de alimentação, etanol-água, entra na coluna perto da base e a alimentação do solvente, etilenoglicol, entra perto do topo. No topo, o etanol é retirado como produto, e na base, a mistura de solvente e água. Esta mistura entra numa outra coluna onde o solvente é recuperado. O etilenoglicol recuperado é reciclado à primeira coluna para ser usado novamente como solvente. A coluna de interesse para nós é a primeira, já que a segunda é um caso simples de separação binária.

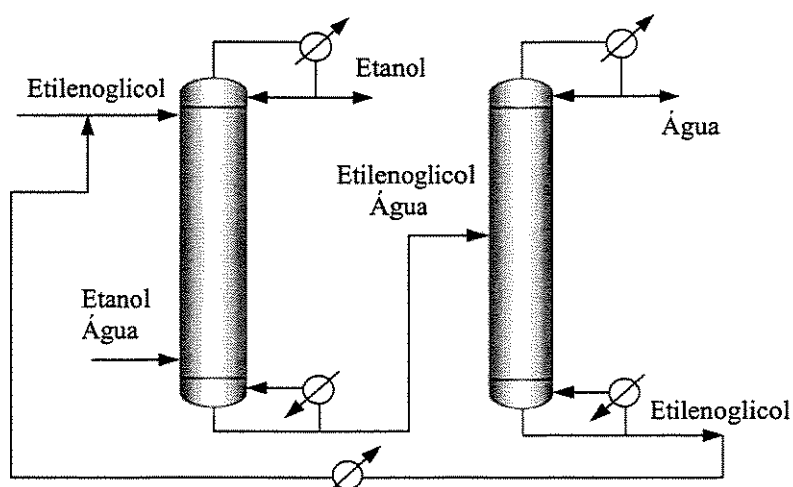


Figura 3.10 Destilação extrativa da mistura etanol-água

Simulações foram realizadas mantendo-se constante a alimentação do solvente para todos os casos. Tomamos como base 100 kgmol/h de solvente e 100 kgmol/h da mistura etanol-água. A composição da mistura foi sendo variada ao redor do ponto azeotrópico.

As especificações para a coluna de destilação extrativa para a recuperação de etanol foram:

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do etanol líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do etanol líquido no estágio 41 deve ser 0,0001

Os resultados para esta coluna de destilação extrativa estão nas tabelas 3.19 a seguir.

Tabela 3.19-(a) Alimentação à coluna

CASO	Solvente Etilenoglicol [kgmol/h]	Alimentação		
		Vazão [kgmol/h]	Composição	
			Etanol	Água
1	100	100	0,8000	0,2000
2	100	100	0,8600	0,1400
3	100	100	0,8700	0,1300
4	100	100	0,8800	0,1200
5	100	100	0,8900	0,1100
6	100	100	0,9000	0,1000
7	100	100	0,9100	0,0900
8	100	100	0,9200	0,0800
9	100	100	0,9300	0,0700
10	100	100	0,9500	0,0500
11	100	100	0,9600	0,0400
12	100	100	0,9800	0,0200

Tabela 3.19-(b) Produto do topo

CASO	Topo			
	Vazão [kgmol/h]	Composição		
		Etanol	Água	Etilenoglicol
1	80	0,9999	0,0001	0,0000
2	86	0,9999	0,0001	0,0000
3	87	0,9999	0,0001	0,0000
4	88	0,9999	0,0001	0,0000
5	89	0,9999	0,0001	0,0000
6	90	0,9999	0,0001	0,0000
7	91	0,9999	0,0001	0,0000
8	92	0,9999	0,0001	0,0000
9	93	0,9999	0,0001	0,0000
10	95	0,9999	0,0001	0,0000
11	96	0,9999	0,0001	0,0000
12	98	0,9999	0,0001	0,0000

Tabela 3.19-(c) Produto da base

CASO	Base			
	Vazão [kgmol/h]	Composição		
		Etanol	Água	Etilenoglicol
1	120	0,0001	0,1666	0,8333
2	114	0,0001	0,1227	0,8772
3	113	0,0001	0,1150	0,8849
4	112	0,0001	0,1071	0,8928
5	111	0,0001	0,0990	0,9009
6	110	0,0001	0,0908	0,9091
7	109	0,0001	0,0825	0,9174
8	108	0,0001	0,0740	0,9259
9	107	0,0001	0,0653	0,9346
10	105	0,0001	0,0475	0,9524
11	104	0,0001	0,0384	0,9615
12	102	0,0001	0,0195	0,9804

Tabela 3.19-(d) Resultados da destilação extrativa

Caso	Número de Estágios Mínimos	Estágio de Alimentação de Solvente	Prato Ótimo de Alimentação	Razão de Refluxo	Energia no Refervedor [kcal/h]
1	40	4	29	4,149	3,49E+06
2	41	4	30	3,492	3,26E+06
3	41	4	29	3,764	3,38E+06
4	41	4	29	3,648	3,52E+06
5	41	4	29	3,585	3,52E+06
6	41	4	29	3,626	3,32E+06
7	41	4	29	3,466	3,50E+06
8	41	4	29	3,337	3,47E+06
9	41	4	30	3,213	3,42E+06
10	41	4	29	3,019	3,37E+06
11	41	4	29	2,896	3,24E+06
12	41	4	27	2,537	3,12E+06

Como pode-se observar nas tabelas de resultados, os valores são similares em todos os casos. A recuperação e a pureza do etanol são de quase 100% e o número de estágios mínimo prático para a separação está entre 40 e 41. A razão de refluxo varia de 4,15, para uma mistura 80-20%, a 2,5, para uma mistura 98-2%.

Na figura 3.11, pode-se notar a distribuição de frações molares dos fluxos de líquido e de vapor, dentro da coluna. O caso representado na figura corresponde à mistura 90-10% de etanol-água. O fluxo de solvente líquido permanece praticamente constante ao longo da coluna e é desprezível na fase vapor.

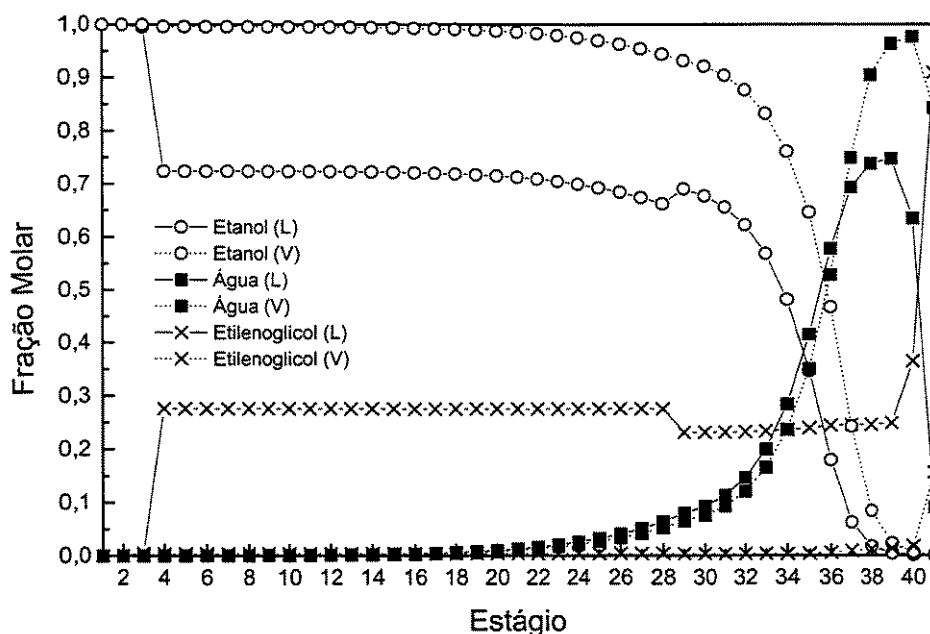


Figura 3.11 Distribuição de frações molares numa coluna de destilação extrativa

Convém salientar que todos os valores se referem à condição limite de mínimo número de estágios.

3.6 DESTILAÇÃO EXTRATIVA NUMA COLUNA COM SAÍDA LATERAL

Considerou-se o caso anterior para uma composição de 90% de etanol, e fez-se a separação utilizando uma coluna só com saída lateral. Neste caso, o etanol sai no topo da coluna, o solvente na base e a água na saída lateral. Esta foi uma nova configuração proposta por Brito et al (1997).

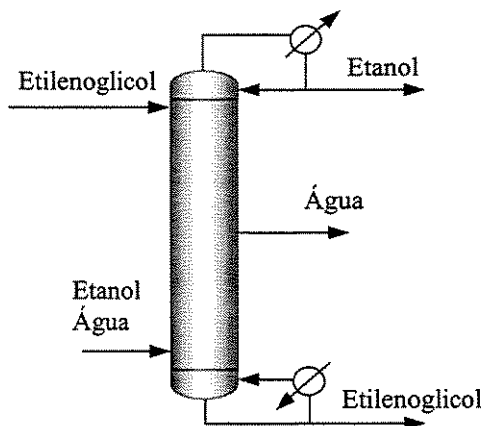


Figura 3.12 Esquema para uma coluna de destilação com saída lateral

As especificações para esta coluna foram: (note-se que nas especificações, tem-se mais uma especificação devido à saída lateral)

1. Vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. Fração molar do etanol líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. Fração molar do etanol líquido no estágio 41 deve ser 0,0001
4. Fração molar do etilenoglicol líquido no estágio 41 deve ser 0,9999

Os resultados das simulações estão nas seguintes tabelas.

Tabela 3.20-(a) Alimentação à coluna

Alimentação			Prato Ótimo de Alimentação	Solvente Etilenoglicol [kgmol/h]	Estágio de Alimentação de Solvente
Vazão [Kgmol/h]	Composição				
	Etanol	Água			
100	0,9000	0,1000	29	100	4

Tabela 3.20-(b) Produto do topo

Topo			
Vazão [kgmol/h]	Composição		
	Etanol	Água	Etilenoglicol
78,8	0,9999	0,0001	0,0000

Tabela 3.20-(c) Produto da saída lateral

Lateral			
Vazão [kgmol/h]	Composição		
	Etanol	Água	Etilenoglicol
30,6	0,3651	0,3260	0,3089

Tabela 3.20-(d) Produto da base

Base			
Vazão [kgmol/h]	Composição		
	Etanol	Água	Etilenoglicol
120,5	0,0000	0,0000	0,9999

Tabela 3.20-(e) Resultados da simulação

Número de Estágios	Saída Lateral	Razão de Refluxo	Energia no Refervedor
41	39	2,80	2,81E+06

Nas tabelas 3.20-(b) e (d) é possível verificar que os produtos da separação têm uma alta pureza que era o que se estava procurando, embora, a tabela 3.20-(c) mostra que na saída lateral não se tem um produto de alta pureza. Isto se deve a que neste caso está-se trabalhando com o número mínimo de estágios, aumentando o número de estágios da coluna, a pureza na saída lateral deve melhorar consideravelmente.

3.7 DESTILAÇÃO INVERTIDA

Estudou-se a possibilidade de separar a mistura quando esta está depois do ponto azeotrópico. Esta separação não precisa de um solvente já que tanto a destilação extrativa como a azeotrópica têm que sobrepor o ponto azeotrópico, e o propósito do solvente é justamente o de quebrar o azeótropo nestas misturas. Conhecendo, então, que o azeótropo desta mistura etanol-água, é um

azeótropo de mínimo, usou-se uma destilação invertida, na qual tem-se a mistura etanol-água, com uma composição perto da azeotrópica, como produto no topo e o etanol, praticamente puro, na base.

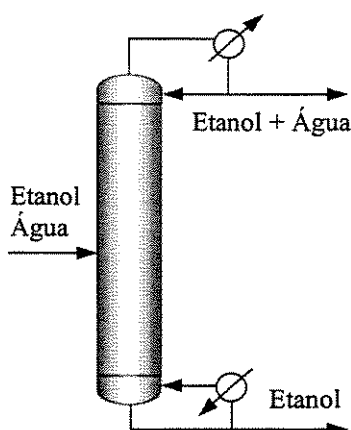


Figura 3.13 Destilação invertida

Para separar uma mistura com uma composição de 95 % de etanol e 5 % de água, usa-se uma coluna com 70 estágios. As especificações para esta coluna foram as seguintes:

1. Vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. Fração molar do etanol líquido no estágio 70 deve ser 0,9995
3. Fração molar de água líquida no estágio 1 deve ser 0,0800

Os resultados obtidos estão resumidos nas seguintes tabelas:

Tabela 3.21-(a) Alimentação à coluna

Alimentação			Prato Ótimo de Alimentação
Vazão [kgmol/h]	Composição		
	Etanol	Água	
100	0,9500	0,0500	14

Tabela 3.21-(b) Produto do topo

Topo		
Vazão [kgmol/h]	Composição	
	Etanol	Água
62,31	0,9201	0,0799

Tabela 3.21-(c) Produto da base

Base		
Vazão [kgmol/h]	Composição	
	Etanol	Água
37,69	0,9995	0,0005

Tabela 3.21-(d) Resultados da simulação

Número de Estágios	Razão de Refluxo	Energia no Refervedor
100	175,40	1,02E+8

Dependendo do caso, esta destilação invertida pode ser uma alternativa ou um complemento à uma destilação extrativa. Uma alternativa quando a mistura se encontrar depois do ponto azeotrópico e um complemento quando se tem pouco solvente ou este seja muito caro. Está claro que não será possível ter uma alta porcentagem de recuperação comparada com o processo de destilação extrativa, mas por exemplo, para o caso da mistura 95-5 % de etanol água, a recuperação de etanol foi do 40 %.

CAPITULO 4

RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA: TEÓRICA E PRÁTICA

4.1 INTRODUÇÃO

No capítulo anterior, trabalhou-se com o tópico do número mínimo de estágios. Neste era preciso trabalhar com um refluxo que tende a infinito e, assim, com altos fluxos no interior da coluna. Neste capítulo, como complemento, serão desenvolvidos os cálculos para alguns dos sistemas do capítulo anterior, desta vez, no entanto, para um refluxo mínimo.

As misturas são as mesmas que foram usadas para o cálculo do número mínimo de estágios, tanto para o sistema binário como para o ternário. Para cada sistema foi calculado o refluxo mínimo prático, o que corresponde a um número de estágios suficiente, de maneira que aumentando o número de estágios não se melhora mais a economia de energia no refeedor. O estágio de alimentação sempre foi otimizado.

4.2 SISTEMA BINÁRIO

Para mostrar o cálculo de refluxo mínimo teórico e prático para uma mistura binária, considerou-se a mistura de 45-55% de n-hexano e n-heptano. Inicialmente, procurou-se a razão de refluxo mínima prática por métodos rigorosos e depois também se fizeram as simulações pelo método “shortcut”.

4.2.1 DETERMINAÇÃO DA RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA PRÁTICA

Este cálculo foi feito pelo método rigoroso, que consiste, como no caso do número de estágios mínimo prático, no cálculo do número de estágios, para o qual a partir daí, não há mais melhora substancial na energia gasta no refeedor.

Partindo do número de estágios mínimo prático, vai-se aumentando o número de estágios à coluna e encontrando o prato ótimo de alimentação. No momento que a energia requerida no refeedor não muda com o aumento do número de estágios, pode-se considerar que essa razão de refluxo é a mínima prática. Na tabela 4.1, mostram-se os resultados de como é que varia a razão de refluxo com o número de estágios para a mistura 45-55% de n-hexano e n-heptano. As especificações para o cálculo são as mesmas que as usadas para o número de estágios mínimo prático.

TABELA 4.1 Variação da razão de refluxo com o número de estágios

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Refervedor [kcal/h]
24	12	37,87	1,2E+07
25	13	17,36	5,8E+06
28	14	6,88	2,5E+06
30	15	5,07	1,9E+06
33	16	3,70	1,5E+06
35	17	3,19	1,4E+06
45	22	2,16	1,0E+06
55	27	1,90	9,5E+05
60	29	1,86	9,4E+05
63	30	1,86	9,4E+05
64	31	1,86	9,3E+05
65	31	1,85	9,3E+05
70	33	1,85	9,3E+05
100	35	1,84	9,3E+05

Nesta tabela, dá para notar que a partir do estágio 64, a energia no refervedor se mantém constante em 9,E+05 kcal/h. Além disso, a variação na razão de refluxo é praticamente desprezível a partir desse número de estágios. A esta razão de refluxo chama-se de razão de refluxo mínima prática, que é avaliada com um número finito de estágios em vez de um número infinito, que corresponde a um cálculo de refluxo mínimo, segundo os cálculos “shortcut” (Underwood) (Henley, 1981). Como se mostra na figura 4.1, a razão de refluxo diminui com o aumento do número estágios como é de se esperar.

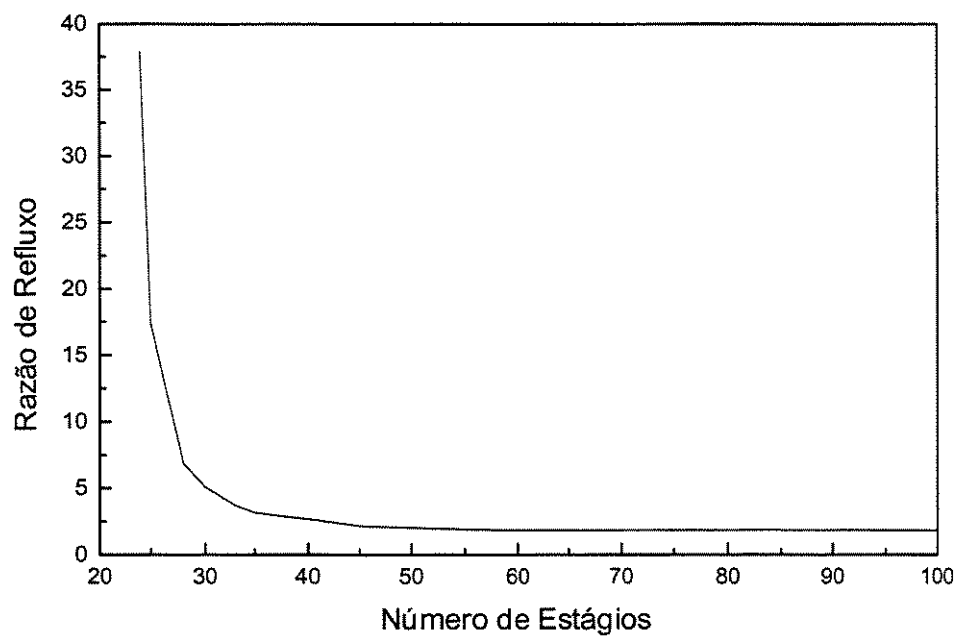


Figura 4.1 Número de estágios vs. razão de refluxo

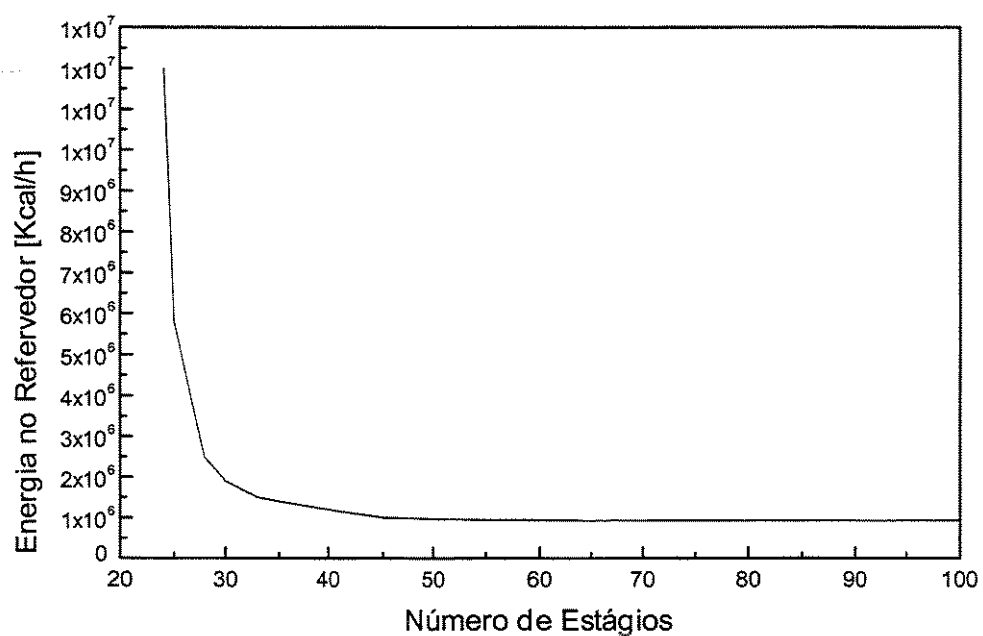


Figura 4.2 Número de estágios vs. energia no refeedor

A figura 4.2 mostra o comportamento da energia no refeedor com o número de estágios e se vê que este é igual ao da razão de refluxo. Tanto a razão de refluxo, na figura 4.1, como a energia no refeedor, na figura 4.2, vão diminuindo conforme aumenta o número de estágios, até permanecerem praticamente constantes. Vendo esta semelhança entre a energia no refeedor e a razão de refluxo, graficamos estes valores e observamos que a razão de refluxo e a energia no refeedor são diretamente proporcionais.

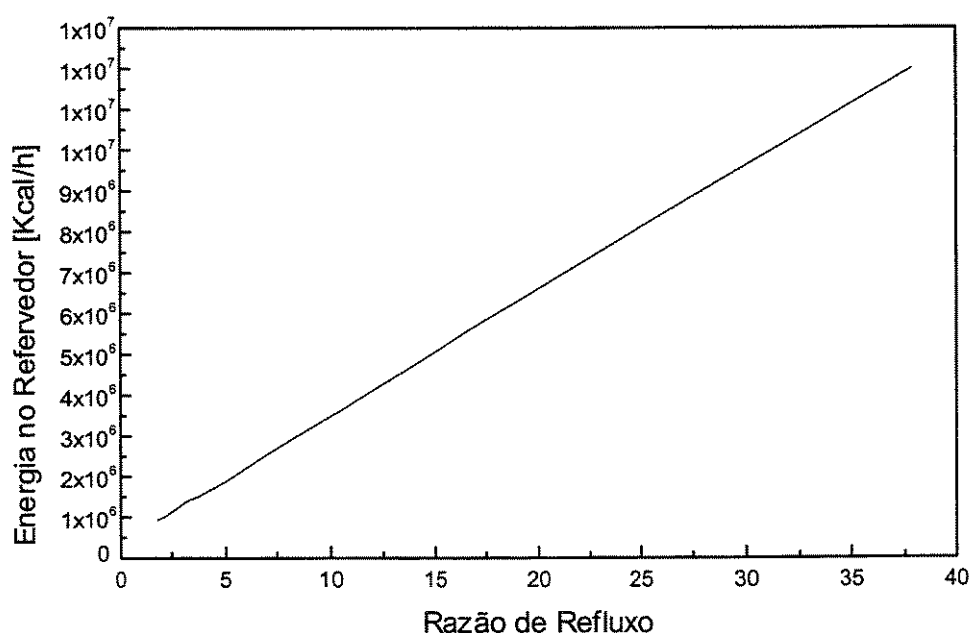


Figura 4.3 Razão de refluxo vs. energia no refeedor

Viu-se também que a razão de refluxo varia com a composição de alimentação. Na seguinte figura podemos ver como é que os perfis de razão de refluxo variam quando simulamos uma mesma mistura com diferentes composições de alimentação. Para isto, considera-se a mistura com composições de 10-90%, 45-55%, e 90-10% de n-hexano e n-heptano, e

plotamos num mesmo gráfico o comportamento da razão de refluxo com o número de estágios. Os resultados obtidos foram que para uma mistura diluída no componente mais volátil, a razão de refluxo será sempre bem maior que para uma mistura concentrada no componente mais volátil.

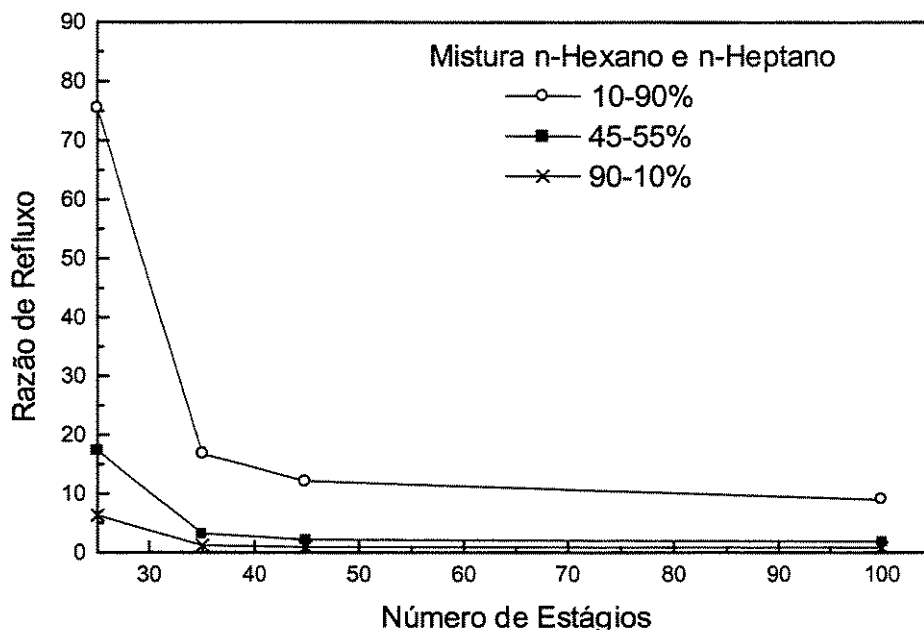


Figura 4.4 Razão de refluxo para distintas composições de alimentação

4.2.2 CÁLCULO “SHORTCUT” PARA A RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA

Para o cálculo da razão de refluxo mínima pelo método “shortcut” são usadas as equações de Underwood, (Coulson, 1991 e Henley, 1981). Estas equações, que são mostradas a seguir, foram usadas por muito tempo, junto com as equações de Fenske e Gilliland para o projeto de colunas de destilação. Hoje em dia, estas equações são só usadas como pontos de partida para métodos rigorosos.

As equações de Underwood são:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_A x_{fA}}{\alpha_A - \theta} + \frac{\alpha_B x_{fB}}{\alpha_B - \theta} + \frac{\alpha_C x_{fC}}{\alpha_C - \theta} + \dots &= 1 - q \\ \frac{\alpha_A x_{dA}}{\alpha_A - \theta} + \frac{\alpha_B x_{dB}}{\alpha_B - \theta} + \frac{\alpha_C x_{dC}}{\alpha_C - \theta} + \dots &= R_m + 1 \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde:

R_m é a razão de refluxo mínima

$x_{fA}, x_{fB}, x_{fC}, x_{dA}, x_{dB}, x_{dC}$, são as frações molares dos componentes A, B, C, na alimentação, F, e o produto destilado, D.

q é a fração líquida

$\alpha_A, \alpha_B, \alpha_C$, são as volatilidades relativas com respeito ao componente menos volátil.

θ é a constante de Underwood

Nas simulações “shortcut”, utilizando-se o simulador de processos HYSIM, encontrou-se o valor da razão de refluxo mínima, baseado no conceito de Underwood. A razão de refluxo mínima é o primeiro resultado do cálculo “shortcut”. No entanto, como o objetivo aqui é não só encontrar a razão de refluxo mínima mas também o número de estágios para esta razão de refluxo, foi preciso usar um valor de razão de refluxo muito próximo à mínima, dado que o simulador não aceita o mesmo valor da razão de refluxo mínima pois o número de estágios para este seria infinito.

Na tabela 4.2 mostram-se os resultados do cálculo “shortcut” para a razão de refluxo mínima. Fizeram-se simulações para todos os casos da mistura binária do capítulo 3. Nota-se que os valores da razão de refluxo mínima vão diminuindo conforme a concentração do componente mais volátil

aumenta. Os altos valores para o número de estágios são devido ao fato de que, como se está trabalhando perto do refluxo mínimo, o número de estágios tende a infinito (Henley, 1981).

TABELA 4.2 Cálculo “shortcut” para a razão de refluxo mínima

Alimentação			Número Mínimo de Estágios	Refluxo Mínimo Teórico	Número de Pratos Teóricos	Estágio Ótimo de Alimentação	Proporção da Alimentação com Pratos Teóricos
Vazão kgmol/h	Composição						
	n-C6	n-C7					
100	0,05	0,95	22,33	15,60	4,9E+11	3,7E+11	0,76
100	0,10	0,90	22,27	7,77	1,7E+12	1,2E+12	0,71
100	0,15	0,85	22,20	5,16	2,6E+09	1,7E+09	0,65
100	0,20	0,80	22,14	3,85	1,4E+10	8,9E+09	0,64
100	0,25	0,75	22,08	3,07	8,2E+09	5,0E+09	0,61
100	0,30	0,70	22,03	2,55	2,7E+10	1,6E+10	0,59
100	0,35	0,65	21,98	2,18	4,0E+10	2,2E+10	0,55
100	0,40	0,60	21,93	1,90	3,5E+07	1,9E+07	0,54
100	0,45	0,55	21,88	1,68	1,1E+07	6,0E+06	0,54
100	0,50	0,50	21,83	1,51	1,2E+10	6,0E+09	0,50
100	0,55	0,45	21,79	1,37	3,6E+07	1,7E+07	0,47
100	0,60	0,40	21,75	1,25	7,7E+06	3,5E+06	0,45
100	0,65	0,35	21,71	1,15	2,7E+06	1,2E+06	0,44
100	0,70	0,30	21,67	1,07	1,2E+07	5,0E+06	0,41
100	0,75	0,25	21,63	0,99	1,9E+06	7,4E+05	0,39
100	0,80	0,20	21,60	0,93	3,8E+07	1,3E+07	0,34
100	0,85	0,15	21,56	0,87	1,0E+06	3,4E+05	0,34
100	0,90	0,10	21,53	0,82	7,4E+05	2,1E+05	0,28
100	0,95	0,05	21,50	0,77	8,9E+05	2,0E+05	0,22

No exemplo do cálculo rigoroso (tabela 4.1), para uma alimentação de 45-55% de n-hexano e n-heptano, foi encontrado que o valor prático da razão de refluxo é de 1,86, sendo este um valor muito próximo ao teórico de 1,68, calculado pelo método “shortcut”.

Note-se a diferença dos resultados relativa ao número de estágios, entre os métodos rigoroso e “shortcut”. No caso do método “shortcut”, pode-se ver que o número de estágios para uma razão de refluxo próxima à mínima tende a

infinito. Já no método rigoroso, o número de estágios para a razão de refluxo mínima prática é um valor finito e aceitável para fins práticos.

4.2.3 DETERMINAÇÃO DA RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA A BAIXA PRESSÃO

Realizaram-se também as simulações tanto rigorosas como “shortcut”, para um sistema binário a baixa pressão, 100 mmHg, para uma mistura 50-50% de n-hexano, n-heptano. No capítulo anterior, o sistema a baixa pressão precisava de um número mínimo de estágios menor do que o mesmo sistema à pressão atmosférica.

No caso da razão de refluxo mínima prática, esta também é menor no sistema a baixa pressão. Os resultados se encontram nas tabelas 4.3 e 4.4.

TABELA 4.3 Razão de refluxo mínima para o sistema a baixa pressão

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
17	17	8,34E+6	3,18E+12
18	9	47,41	1,85E+7
19	10	11,68	4,87E+6
20	10	6,74	2,99E+6
30	15	1,48	9,88E+6
40	21	1,10	8,46E+5
50	26	1,06	8,28E+5
70	34	1,05	8,26E+5
80	31	1,05	8,24E+5
81	31	1,04	8,23E+5
100	40	1,04	8,23E+5

TABELA 4.4 Cálculo “shortcut” para sistema a baixa pressão

	P = 760 mmHg	P = 100 mmHg
Número de estágios :	1,2E+10	2,4E+7
Prato de alimentação:	6,0E+9	1,2E+7
Razão de refluxo :	1,51	0,96
Número mínimo de estágios:	21,8	16,3
Refluxo mínimo :	1,51	0,96

4.3 SISTEMA TERNÁRIO

Estendeu-se o estudo de uma mistura binária para uma mistura ternária. Fizemos os cálculos da razão de refluxo mínima prática e teórico para uma sequência de duas colunas. A metodologia usada é a mesma que no caso da mistura binária.

4.3.1 RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA PRÁTICA NO SISTEMA TERNÁRIO

Como no caso anterior, para a destilação binária, nesta seção, estudou-se como varia a razão de refluxo com o número de estágios quando trabalhamos com uma mistura ternária. No caso se ter duas ou mais colunas, o procedimento é o mesmo. Faz-se o cálculo do número de estágios até chegar a um número de estágios para cada coluna onde a energia requerida no refeedor se mantenha constante. As especificações para ambas as colunas são as mesmas que para o cálculo do número mínimo de estágios. A única coisa que muda é o número de estágios, e claro, a posição de alimentação, que para cada caso tem que ser a ótima.

TABELA 4.5 Razão de refluxo mínima prática para a primeira coluna

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Refrervedor [kcal/h]
24	2	8,9E+8	2,0E+14
25	3	1,9E+6	4,4E+11
27	13	21,3	5,2E+6
30	14	8,1	2,2E+6
35	15	4,3	1,3E+6
40	17	3,1	1,0E+6
45	19	2,5	8,8E+5
50	21	2,2	8,1E+5
60	26	2,0	7,6E+5
65	28	2,0	7,6E+5
66	29	2,0	7,6E+5
67	29	2,0	7,5E+5
70	30	2,0	7,5E+5
100	34	2,0	7,5E+5

Trabalhou-se com a mistura, 33-33-34% n-hexano, n-heptano, n-octano. Na tabela 4.5 mostramos os resultados das simulações para a primeira coluna quando se varia o número de estágios de 24, que é o mínimo prático, até 100. Dá para ver, nesta tabela e na figura 4.5, que a razão de refluxo mínima prática é de 2.0 e que se dá a partir de 67 estágios.

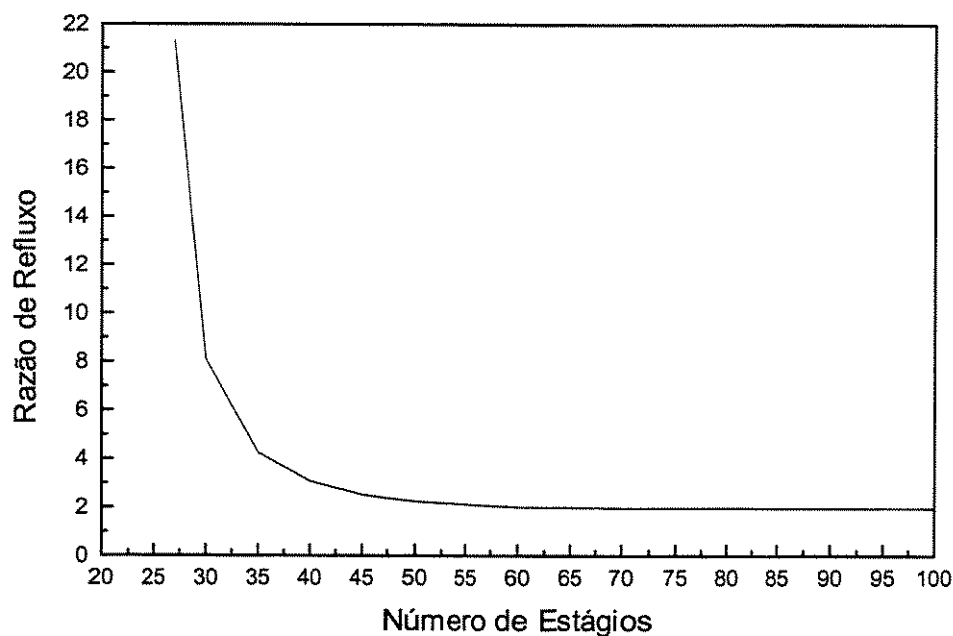


Figura 4.5 Número de estágios vs. Razão de Refluxo para a primeira coluna
Destilação ternária 33-33-34%

Para a segunda coluna o procedimento é o mesmo. Neste caso, iniciou-se com 25 estágios, que é o número mínimo prático, e foi-se variando o número de estágios até 100. Nota-se como a razão de refluxo vai mudando de $3,2E+11$ com 25 estágios até permanecer praticamente constante, com um valor de 2.1, a partir de 69 estágios.

Na tabela 4.6, se mostra como varia a razão de refluxo com o número de estágios e na figura 4.6 se mostra também estes resultados de forma gráfica.

TABELA 4.6 Razão de refluxo mínima prática para a segunda coluna

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
25	2	1,3E+6	3,2E+11
28	14	34,5	9,0E+6
30	15	12,8	3,5E+6
35	17	5,4	1,6E+6
40	20	3,6	1,2E+6
45	22	2,9	9,8E+5
55	28	2,3	8,4E+5
65	32	2,1	7,9E+5
68	34	2,1	7,9E+5
69	34	2,1	7,8E+5
70	35	2,1	7,8E+5
75	37	2,1	7,8E+5
100	41	2,1	7,8E+5

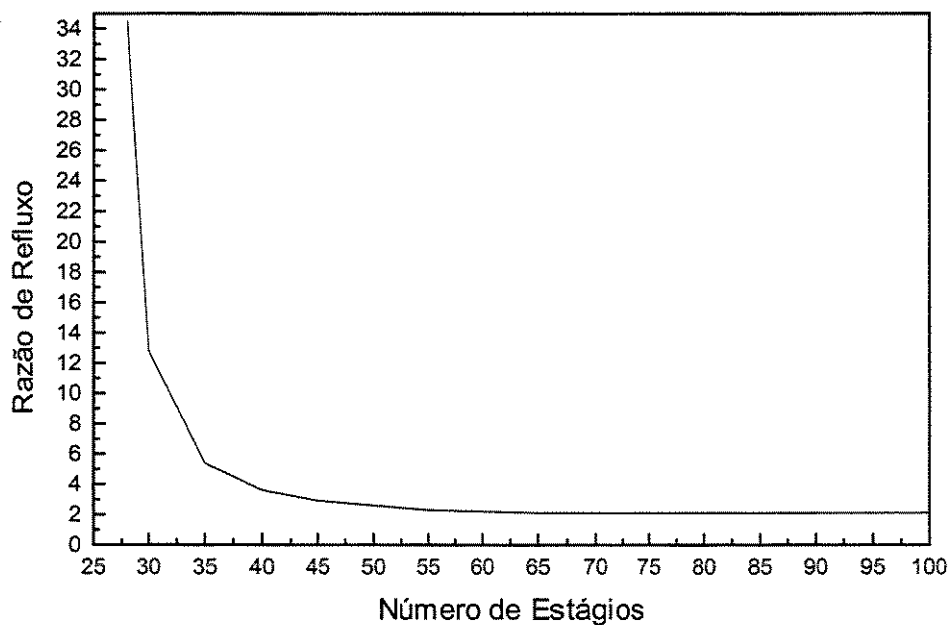


Figura 4.6 Número de estágios vs. Razão de Refluxo para a segunda coluna

Destilação ternária 33-33-34%

Também para misturas diluídas se fizeram as mesmas simulações para encontrar a razão de refluxo mínima prática. Para isto, considerou-se a mistura 5-15-80% de n-hexano, n-heptano, e n-octano. Os resultados das simulações para a primeira coluna se encontram na tabela 4.7 e na forma gráfica na figura 4.7.

Pode-se ver na tabela 4.7, que para a primeira coluna no caso de uma mistura diluída, o número de estágios, para uma razão de refluxo mínima, é maior que para misturas com uma composição de alimentação mais concentrada no componente mais volátil. A razão de refluxo e a energia no refeedor são também maiores que para misturas não diluídas

**TABELA 4.7 Razão de refluxo mínima prática
para a primeira coluna para misturas diluídas**

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Refeedor [kcal/h]
24	4	3,37E+5	1,3E+10
30	15	26,50	1,0E+6
35	15	17,99	7,2E+5
40	16	14,77	6,1E+5
50	17	12,02	5,2E+5
70	19	10,22	4,5E+5
80	20	9,89	4,4E+5
85	20	9,79	4,4E+5
87	21	9,76	4,4E+5
89	22	9,73	4,4E+5
91	22	9,71	4,4E+5
92	22	9,70	4,3E+5
100	24	9,64	4,3E+5

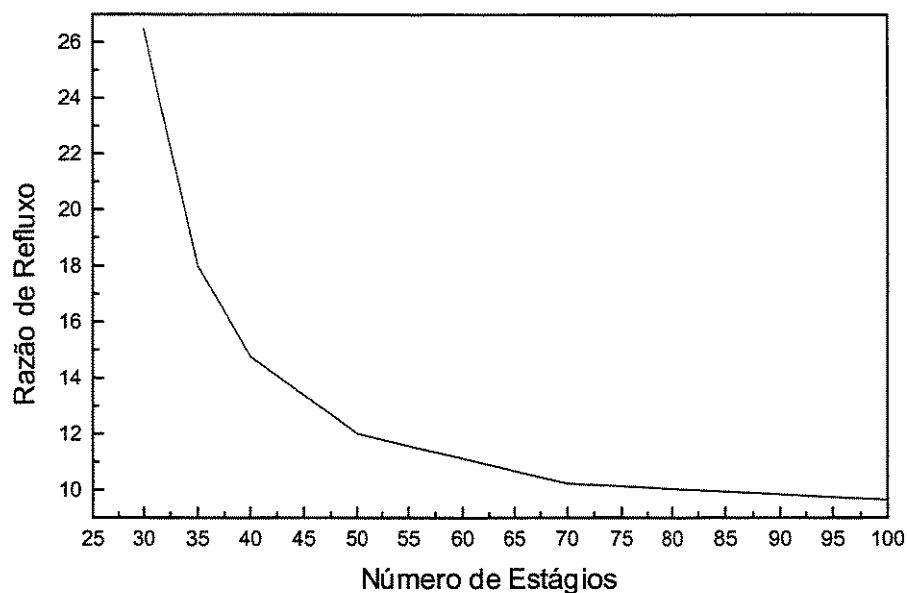


Figura 4.7 Número de estágios vs. Razão de Refluxo para a primeira coluna
Destilação ternária 5-15-80%

TABELA 4.8 Razão de refluxo mínima prática
para a segunda coluna para misturas diluídas

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
26	2	2,4E+4	2,6E+10
30	18	57,2	6,7E+6
35	19	20,1	2,4E+6
40	20	13,7	1,7E+6
50	21	9,7	1,2E+6
60	23	8,3	1,0E+6
80	26	7,3	9,6E+5
90	27	7,1	9,4E+5
91	27	7,1	9,3E+5
100	35	7,1	9,3E+5

Para a segunda coluna também se pode ver, na tabela 4.8 e na figura 4.8, que o número de estágios para a separação da mistura diluída, a razão de refluxo mínima prática e a energia requerida no refeedor são maiores que para a mistura 33-33-34%.

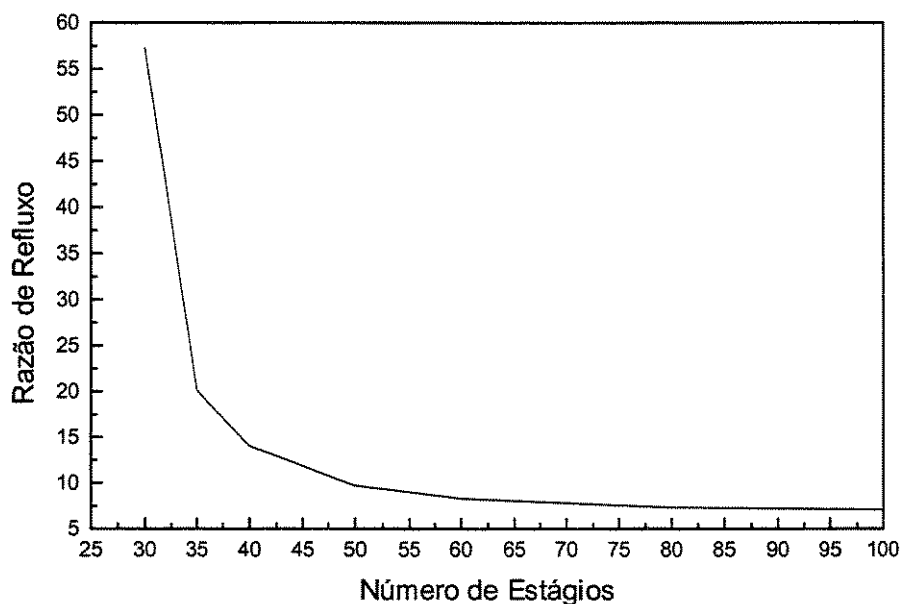


Figura 4.8 Número de estágios vs. Razão de Refluxo para a segunda coluna
Destilação ternária 5-15-80%

4.3.2 CÁLCULO “SHORTCUT” PARA O SISTEMA TERNÁRIO

Para sistemas ternários, também fizemos simulações “shortcut”. Como no caso da destilação binária, pegamos um valor muito próximo à razão de refluxo mínima e usamos esse dado como razão de refluxo. Isso para obter o número de estágios para essa razão de refluxo e assim poder comparar os dois métodos.

Os resultados dos cálculos “shortcut” para uma mistura 33-33-34% de n-hexano, n-heptano e n-octano, encontram-se na tabela 4.9. Nota-se que a diferença na razão de refluxo entre ambos os métodos é muito pequena.

Para uma coluna com uma razão de refluxo de 2,0, são necessários 67 estágios (ver tabela 4.5), no método rigoroso, e no método “shortcut” para uma razão de refluxo de 1,74, que é a mínima, necessita-se de um número de estágios que tende ao infinito.

Para a segunda coluna acontece a mesma coisa, segundo o método rigoroso, para uma razão de refluxo de 2,1 se precisam 69 estágios, enquanto que segundo o método “shortcut” para uma razão de refluxo de 1,92 se precisam um número de estágios que tende a infinito.

TABELA 4.9 Cálculo “shortcut” para a razão de refluxo mínima

	Coluna 1	Coluna 2
Número de estágios :	6,6E+6	3,5E+7
Prato de alimentação:	3,2E+6	1,7E+7
Razão de refluxo proposta:	1,74	1,92
Número mínimo de estágios:	21,66	25,51
Refluxo mínimo :	1,74	1,92

4.4 REFLUXO MÍNIMO NA DESTILAÇÃO EXTRATIVA

Uma outra aplicação, muito útil, para o cálculo da razão de refluxo mínima prática é para a separação de misturas complexas, como no caso da mistura azeotrópica etanol-água. Para este tipo de misturas ou para sistemas de colunas não convencionais, que tenham múltiplas alimentações ou saídas

laterais, não é possível calcular nem o número mínimo de estágios, nem a razão de refluxo mínima pelo método “shortcut”.

Por exemplo, pegamos a mistura 90-10% de etanol-água e achamos que a razão de refluxo mínima prática é de 1,97 e que para essa razão de refluxo são necessários 83 estágios (ver tabela 4.10). O resultado é muito importante, considerando-se a otimização da coluna de destilação extrativa em termos de consumo de energia.

TABELA 4.10 Razão de refluxo mínima prática para destilação extrativa

Número de Estágios	Posição Ótima de Alimentação	Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
41	29	3,63	3,3E+6
45	34	2,74	2,6E+6
50	38	2,43	2,3E+6
60	47	2,17	2,1E+6
70	56	2,05	2,0E+6
80	65	1,99	2,0E+6
82	67	1,98	2,0E+6
83	68	1,97	1,9E+6
85	70	1,96	1,9E+6
90	75	1,94	1,9E+6
100	85	1,91	1,9E+6

4.5 CONCLUSÃO

Neste capítulo conseguiu-se encontrar as razões de refluxo mínima, teórica e prática, para diferentes casos. Também se mostrou a conveniência da razão de refluxo mínima prática sob a teórica calculada pelo método “shortcut”, já que, a razão de refluxo mínima prática requer um número finito de estágios e uma energia no refeedor mínima, enquanto que no método “shortcut”, o número de estágios para a razão de refluxo mínima tende a infinito. Além disso, a razão de refluxo mínima prática pode ser encontrada para sistemas complexos, como colunas de destilação extrativa ou colunas com correntes laterais.

CAPITULO 5

OUTROS CASOS ESTUDO

5.1 INTRODUÇÃO

Nos capítulos anteriores viu-se o estudo das condições limites de operação para colunas de destilação de distintos tipos. Estas condições limites, número mínimo de estágios e razão de refluxo mínima, foram calculadas tanto por métodos rigorosos como por métodos “shortcut”, mas sempre considerando uma alimentação de líquido saturado.

Na primeira parte deste capítulo será apresentado um caso estudo, onde se verá o efeito da condição térmica de alimentação no número de estágios, na razão de refluxo e no requerimento de energia no refeedor, variando as condições de alimentação. A seguir, e considerando uma coluna de destilação com saída lateral, será analisada a posição ótima da saída para fluxos de líquido e vapor. Por último, serão comparados alguns dos arranjos mais conhecidos para a separação de uma mistura quaternária, em termos do consumo de energia no refeedor.

5.2 CONDIÇÃO TÉRMICA DE ALIMENTAÇÃO

Desde que nosso objetivo é procurar sempre as condições que forneçam a menor quantidade de energia no refeedor, compararemos o consumo de energia para uma mesma mistura variando só as condições de alimentação.

A figura 5.1 mostra a fração líquida, q , para as distintas condições de alimentação em um diagrama de equilíbrio. No caso do simulador, este usa a fração de vapor ($1-q$), como uma variável que pode ser especificada. Esta fração de vapor é a fração da mistura de alimentação que se encontra vaporizada. No caso de líquido saturado é 0 e no caso de vapor saturado é 1.

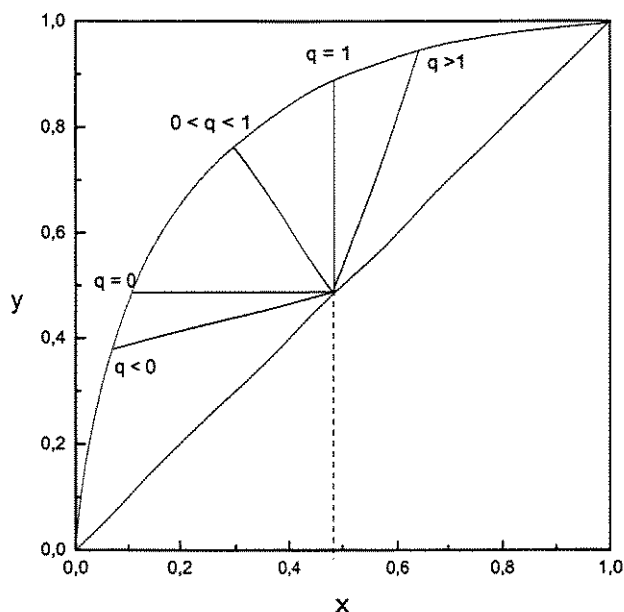


Figura 5.1 Condições de alimentação

O caso estudo foi a mistura n-hexano, n-heptano. Foram sendo alteradas as especificações da fração de vapor sendo: 0 para líquido saturado, 1 para vapor saturado e 0,5 para uma mistura 50-50% líquido-vapor. Para líquido subresfriado e vapor superaquecido alterou-se a temperatura, usando uma temperatura menor que a do ponto de bolha para líquido subresfriado e uma maior que a do ponto de orvalho para vapor superaquecido.

As especificações para as simulações das colunas operando nas diferentes condições de alimentação foram :

Para alimentação de líquido subresfriado e líquido saturado

1. Vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-heptano líquido no estágio n deve ser 0,9999

Para alimentação de uma mistura líquido-vapor

1. Vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-heptano líquido no estágio n deve ser 0,9999

Para alimentação de vapor saturado e vapor superaquecido

1. Vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-heptano líquido no estágio n deve ser 0,9999

Na tabela 5.1-(a), mostra-se a caracterização das correntes de alimentação. Pode-se ver que para o caso de líquido subresfriado a temperatura especificada foi de 60 °C, sendo menor que a temperatura para líquido saturado (82,31 °C). Para o caso de vapor superaquecido, a temperatura especificada foi de 100 °C, sendo maior que a de vapor saturado

(88,28 °C). Nesta tabela também se mostra os valores da entalpia da mistura para cada condição de alimentação.

Tabela 5.1-(a) Caracterização das correntes de alimentação

	Líquido Subresfriado	Líquido Saturado	Mistura Líqu.-Vapor	Vapor Saturado	Vapor Sup.aquecido
Fração de vapor	0,00	0,00*	0,50*	1,00*	1,00
Temperatura [°C]	60,00*	82,31	85,46	88,28	100,00*
Pressão [atm]	1,00*	1,00*	1,00*	1,00*	1,00*
Fluxo [kgmol/h]	100*	100*	100*	100*	100*
Entalpia [kcal/h]	8,2E+4	2,0E+5	5,8E+5	9,6E+5	1,0E+6

* Propriedades especificadas

Na tabela 5.1-(b), mostram-se os resultados das simulações considerando um número mínimo de estágios. Como era de se esperar, o resultado foi o mesmo para todos os casos. Isto faz sentido se se observar que a razão de refluxo, por ser muito alta, fará com que os fluxos dentro da coluna sejam também muito altos e, portanto, a vazão de alimentação seja desprezível frente a estes valores.

Tabela 5.1-(b) Resultados para o número mínimo prático de estágios

	Líquido Subresfriado	Líquido Saturado	Mistura Líqu.-Vapor	Vapor Saturado	Vapor Sup.aquecido
Núm. Estágios	21	21	21	21	21
Estágio de Alim.	21	21	21	21	21
Razão de Refluxo	5,6E+6	5,6E+6	5,6E+6	5,6E+6	5,6E+6
Referv. [kcal/h]	1,8E+12	1,8E+12	1,8E+12	1,8E+12	1,8E+12

Para o caso de uma coluna com um número de estágios maior que o mínimo, uma alimentação de vapor superaquecido requer o menor consumo de energia no refeedor, mas também a maior razão de refluxo e, portanto, um diâmetro maior de coluna. Na tabela 5.1-(c), mostram-se os resultados para uma coluna com 45 estágios.

Tabela 5.1-(c) Resultados para uma coluna com 45 estágios

	Líquido Subresfriado	Líquido Saturado	Mistura Líq.-Vapor	Vapor Saturado	Vapor Sup.aquecido
NST	45	45	45	45	45
Estágio de Alim.	22	22	20	20	19
Razão de Refluxo	2,00	2,16	2,80	3,69	3,85
Referv. [kcal/h]	11,0E+5	10,3E+5	8,5E+5	7,5E+5	7,4E+5

Na tabela 5.1-(d), mostram-se os resultados para uma coluna operando a uma razão de refluxo que é a mínima prática. Como no caso anterior, uma alimentação de vapor superaquecido requer menor consumo de energia no refeedor. Pode-se ver também que esta coluna requer um número de estágios maior e uma razão de refluxo também maior, comparada com as outras condições de alimentação. Consequentemente, para o caso de vapor superaquecido, requer-se um diâmetro de coluna maior.

Tabela 5.1-(d) Resultados para a razão de refluxo mínima prática

	Líquido Subresfriado	Líquido Saturado	Mistura Líq.-Vapor	Vapor Saturado	Vapor Sup.aquecido
NST	61	64	64	67	69
Estágio de Alim.	30	31	26	24	26
Razão de Refluxo	1,73	1,86	2,46	3,30	3,44
Referv. [kcal/h]	10,1E+5	9,3E+5	7,4E+5	6,2E+5	6,1E+5

Pode-se concluir que uma alimentação de vapor superaquecido consome menos energia no refeedor que uma alimentação líquida, líquido-vapor, ou mesmo uma mistura de vapor saturado.

5.3 POSIÇÃO ÓTIMA DA SAÍDA LATERAL

Um outro caso estudo foi a separação de uma mistura ternária n-hexano, n-heptano e n-octano em uma coluna com saída lateral. Diferentemente do caso estudado no capítulo 3, neste capítulo, calcular-se-á posição ótima da saída lateral para uma coluna com um número de estágios maior que o mínimo e com saídas laterais nas fases líquida e vapor.

A alimentação consistiu de 100 kgmol/h (50% n-C6, 10% n-C7 e 40% n-C8). Na tabela 5.2-(a), mostra-se a composição da alimentação e do produto de topo da coluna, tanto para uma saída lateral em fase líquida como em fase vapor.

As especificações para ambos os casos, considerando uma coluna com 30 estágios, são as seguintes:

Especificações para saída lateral em fase líquida

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9930
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio 30 deve ser 0,9950
4. A retirada lateral de líquido no estágio 14 deve ser 9,8 kgmol/h

Especificações para saída lateral em fase vapor

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9950
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio 30 deve ser 0,9930
4. A retirada lateral de líquido no estágio 16 deve ser 9,8 kgmol/h

Tabela 5.2-(a) Composições da alimentação e do topo da coluna

Estado da S. L.	Alimentação				Topo			
	Vazão kgmol/h	Composição			Vazão kgmol/h	Composição		
		n-C6	n-C7	n-C8		n-C6	n-C7	n-C8
L	100	0,5000	0,1000	0,4000	50,32	0,9930	0,0070	0,0000
V	100	0,5000	0,1000	0,4000	49,95	0,9950	0,0050	0,0000

Na tabela 5.2-(b) são mostradas as composições da saída lateral e do produto de fundo da coluna. Pode-se ver que tanto as composições de topo como as de fundo para os casos de correntes laterais de líquido e vapor tem uma pureza de 99%. Não entanto, a pureza das correntes das saídas laterais só chega até 96% para a líquida e 97% para a vapor.

Tabela 5.2-(b) Composições da saída lateral e da base da coluna

Estado da S. L.	Lateral				Base			
	Vazão kgmol/h	Composição			Vazão kgmol/h	Composição		
		n-C6	n-C7	n-C8		n-C6	n-C7	n-C8
L	9,80	0,0030	0,9641	0,0329	39,88	0,0000	0,0050	0,9950
V	9,80	0,0307	0,9662	0,0031	40,25	0,0000	0,0070	0,9930

Os resultados de requerimento de energia e de razão de refluxo para os dois casos se encontram na tabela 5.2-(c). Note-se que, para uma saída lateral líquida, a posição ótima da saída fica abaixo do prato de alimentação e para o caso de uma saída lateral de vapor, esta saída fica acima do prato de alimentação.

Tabela 5.2-(c) Resultados da simulação

Estado da S. L.	Resultados				
	Número de Estágios	Prato Ótimo de Alimentação	Saída Lateral	Razão de Refluxo	Refrervedor [kcal/h]
L	30	6	14	51,40	1,8E+07
V	30	25	16	68,37	2,4E+07

Para o caso estudado, uma saída lateral na fase líquida requer uma menor quantidade de energia e uma razão de refluxo menor que uma saída lateral na fase vapor.

5.4 SEPARAÇÃO DE UMA MISTURA QUATERNÁRIA

No capítulo 3 discorreu-se sobre as sequências de colunas para uma mistura ternária. Nesse capítulo, as condições limites práticas de operação, o número de estágios mínimo e a razão de refluxo mínimo serão calculadas. Em geral, quando se fala de separação de uma mistura em componentes puros, o número de colunas necessário para a separação é de $C-1$, e o número de possíveis sequências de colunas é de:

$$S = \frac{[2 \cdot (C-1)]!}{C! \cdot (C-1)!} \quad (5.1)$$

Onde C é o número de componentes da mistura de alimentação e S é o número de possíveis sequências.

Se se considerar uma mistura de 4 componentes, o número de colunas necessário para a separação em componentes puros é 3 e o número de sequências possíveis é 5.

Escolheu-se, então, como caso estudo uma mistura de alimentação de 100 kgmol/h (25% n-C5, 25% n-C6, 25% n-C7 e 25% n-C8), que entra à coluna como líquido saturado.

No primeiro arranjo a ser usado, figura 5.2, na primeira coluna, a alimentação é separada em produtos que por sua vez são misturas. O produto de topo da primeira coluna será a mistura n-C5 + n-C6, e o produto de fundo a mistura n-C7 + n-C8. Cada produto entra como alimentação em outra coluna onde as misturas são separadas em componentes puros.

As especificações para a simulação das colunas deste primeiro arranjo são:

Coluna 1

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C5 + n-C6 líquido no estágio 1 deve ser 1,000
3. A fração molar do n-C7 + n-C8 líquido no estágio 30 deve ser 1,000

Coluna 2

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C5 líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-C6 líquido no estágio 30 deve ser 0,9999

Coluna 3

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C7 líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
1. A fração molar do n-C8 líquido no estágio 30 deve ser 0,9999

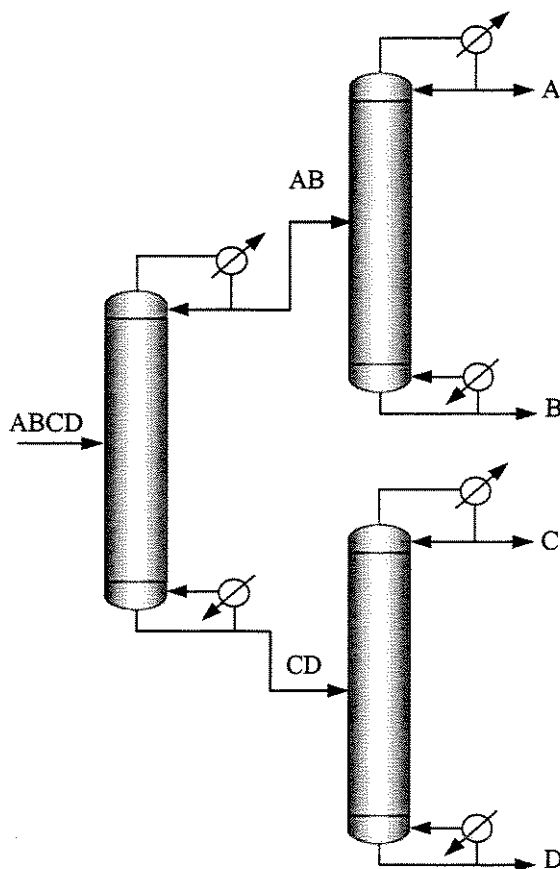


Figura 5.2 Arranjo 1

Os resultados das simulações para este arranjo estão resumidos na tabela 5.3. Para cada coluna, usou-se 30 estágios.

Tabela 5.3 Resultados da simulação do arranjo 1

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Número de Estágios	30	30	30
Posição de Alimentação	15	15	15
Razão de Refluxo	6,05	2,45	12,62
Referredor [kcal/h]	2,54 E+6	5,54 E+5	2,60 E+6
Vazão de Topo [Kmol/h]	50,0	25,0	25,0
Fração de n-C5	0,5000	1,0000	0,0000
Fração de n-C6	0,5000	0,0000	0,0000
Fração de n-C7	0,0000	0,0000	0,9999
Fração de n-C8	0,0000	0,0000	0,0001
Vazão da Base [Kmol/h]	50,0	25,0	25,0
Fração de n-C5	0,0000	0,0001	0,0000
Fração de n-C6	0,0000	0,9999	0,0000
Fração de n-C7	0,5000	0,0000	0,0001
Fração de n-C8	0,5000	0,0000	0,9999

Outro possível arranjo é a conhecida sequência direta, figura 5.3, utilizada nos capítulos anteriores para a separação de misturas ternárias. Este arranjo consiste em uma sequência de colunas onde se vai tirando em cada uma o componente mais leve como produto de topo. A literatura fala que este arranjo é o mais eficiente em termos de requerimento de energia.

Os resultados para a simulação da sequência direta estão resumidos na tabela 5.4. Note-se que em cada caso a pureza dos componentes é de pelo menos 99,99% e que o consumo de energia no referredor vai aumentando conforme a ordem na sequência.

As especificações para a simulação deste arranjo são:

Coluna 1

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C5 líquido no estágio 1 deve ser 1,000
3. A fração molar do n-C6 + n-C7 + n-C8 líquido no estágio 30 deve ser 1,000

Coluna 2

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C6 líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-C7 + n-C8 líquido no estágio 30 deve ser 1,000

Coluna 3

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C7 líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-C8 líquido no estágio 30 deve ser 0,9999

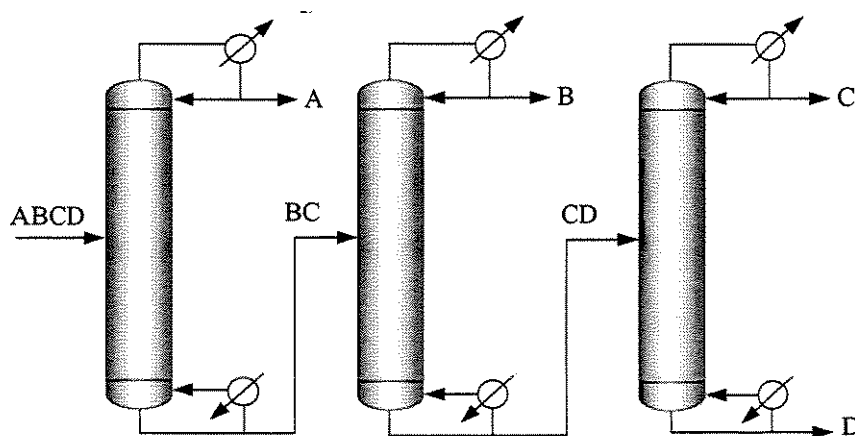


Figura 5.3 Arranjo 2, sequência direta

Tabela 5.4 Resultados da simulação do arranjo 2, sequência direta

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Número de Estágios	30	30	30
Posição de Alimentação	15	14	15
Razão de Refluxo	4,41	8,96	12,66
Refrervedor [kcal/h]	9,36 E+5	1,75 E+6	2,57 E+6
Vazão de Topo [Kmol/h]	25,0	25,0	25,0
Fração de n-C5	1,0000	0,0000	0,0000
Fração de n-C6	0,0000	0,9999	0,0000
Fração de n-C7	0,0000	0,0001	0,9999
Fração de n-C8	0,0000	0,0000	0,0001
Vazão da Base [Kmol/h]	75,0	50,0	25,0
Fração de n-C5	0,0000	0,0000	0,0000
Fração de n-C6	0,3333	0,0000	0,0000
Fração de n-C7	0,3333	0,5000	0,0001
Fração de n-C8	0,3333	0,5000	0,9999

Por último, usamos a sequência indireta, figura 5.4, que viria a ser o arranjo oposto à sequência direta. A diferença é que, neste arranjo, em cada coluna vai se tirando o componente mais pesado como produto de fundo. Este arranjo consome mais energia porque os componentes leves são vaporizados e condensados mais de uma vez.

As especificações para a simulação das colunas deste arranjo são:

Coluna 1

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C5 + n-C6 + n-C7 líquido no estágio 1 deve ser 1,000
3. A fração molar do n-C8 líquido no estágio 30 deve ser 0,9999

Coluna 2

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C5 + n-C6 líquido no estágio 1 deve ser 1,000
3. A fração molar do n-C7 líquido no estágio 30 deve ser 1,000

Coluna 3

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-C5 líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-C6 líquido no estágio 30 deve ser 0,9999

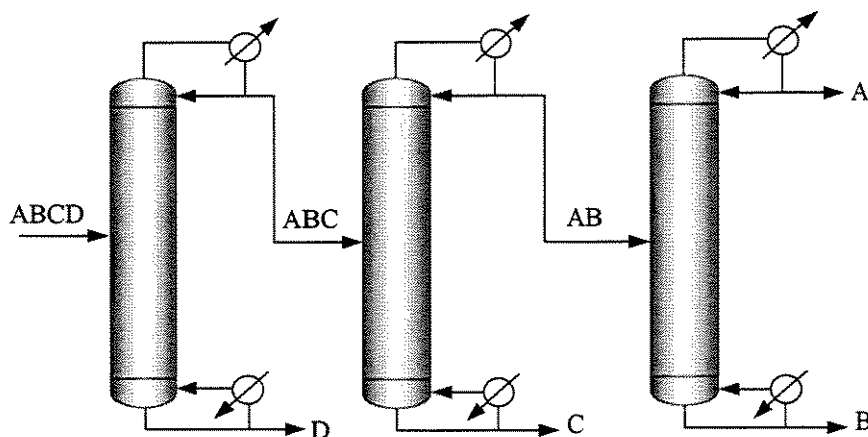


Figura 5.4 Arranjo 3, sequência indireta

Os resultados para a sequência indireta, tabela 5.5, mostram um efeito contrário no consumo de energia, com respeito à sequência direta. Na primeira coluna, o consumo de energia é maior, daí para a frente o consumo de energia vai diminuindo conforme a ordem na sequência.

Tabela 5.5 Resultados da simulação do arranjo 3, sequência indireta

	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 3
Número de Estágios	30	30	30
Posição de Alimentação	16	14	14
Razão de Refluxo	5,59	5,52	2,23
Refrervedor [kcal/h]	3,90 E+6	2,29 E+6	5,20 E+5
Vazão de Topo [Kmol/h]	75,0	50,0	25,0
Fração de n-C5	0,3333	0,5000	0,9999
Fração de n-C6	0,3333	0,5000	0,0001
Fração de n-C7	0,3333	0,0000	0,0000
Fração de n-C8	0,0000	0,0000	0,0000
Vazão da Base [Kmol/h]	25,0	25,0	25,0
Fração de n-C5	0,0000	0,0000	0,0001
Fração de n-C6	0,0000	0,0000	0,9999
Fração de n-C7	0,0001	1,0000	0,0000
Fração de n-C8	0,9999	0,0000	0,0000

Na tabela 5.6, mostra-se um resumo do consumo de energia de cada coluna e o consumo de energia total para cada arranjo. Note-se que, para este caso de estudo, a sequência direta requer de uma menor quantidade de energia no refrervedor que os outros arranjos.

Tabela 5.6 Comparação do requerimento de energia

	Arranjo 1	Seq. Direta	Seq. Indireta
Coluna 1 [kcal/h]	2,54 E+6	9,36 E+5	3,90 E+6
Coluna 2 [kcal/h]	5,54 E+5	1,75 E+6	2,29 E+6
Coluna 3 [kcal/h]	2,60 E+6	2,57 E+6	5,20 E+5
TOTAL [kcal/h]	5,69 E+6	5,26 E+6	6,71 E+6

5.5 CONCLUSÃO

Neste capítulo, foram realizados os cálculos para alguns casos estudos com números de estágios e razões de refluxo maiores que os valores mínimos práticos encontrados nos capítulos anteriores. Verificou-se, primeiramente, que, como é de se esperar, a condição mais favorável de alimentação corresponde a vapor superaquecido, em termos de requerimento de energia no refeedor. Também se verificou que a posição ótima para uma corrente lateral fica acima da alimentação para uma corrente lateral líquida e abaixo da alimentação para uma corrente de vapor. Por último, comparou-se também, diferentes arranjos para a separação de uma mistura quaternária e se encontrou que para o caso estudo, a configuração de sequência direta resultou numa configuração mais eficiente.

CAPITULO 6

COLUNAS PETLYUK

6.1 INTRODUÇÃO

A separação de uma mistura multicomponente em produtos de alta pureza é realizada geralmente em colunas de destilação convencionais arranjadas em série. Porém, devido às exigências cada vez maiores na eficiência do processo, dos custos de operação e de consumo de energia, procuram-se novas alternativas que oferecem menores custos operacionais e de energia. Entre estas, existe a configuração Petlyuk, na qual três ou mais componentes são separados, em uma coluna com um prefracionador ou em uma única coluna, no caso da coluna com parede divisória, usando só um refeedor e um condensador.

6.2 CONFIGURAÇÃO PETLYUK

Os processos de destilação industriais são conhecidos por serem operações com um alto consumo de energia. É por este motivo que há um interesse particular por desenvolver sistemas de separação tanto econômica como energeticamente mais eficientes.

Comparada com sequências de colunas convencionais, uma configuração, em particular a coluna de destilação termicamente acoplada, pode economizar quantidades significantes de energia reduzindo as perdas termodinâmicas. Em tal configuração, um número de colunas (geralmente

duas) são unidas através de correntes de vapor e líquido sem refeedores ou condensadores entre as colunas (Lestak, 1997). Perdas termodinâmicas referem-se ao gasto de energia não aproveitado, devido à vaporização e condensação do componente intermediário na primeira coluna de uma configuração convencional de sequências de colunas.

Uma aplicação prática da coluna termicamente acoplada é a coluna de parede divisória, ou coluna Petlyuk. O conceito da coluna Petlyuk tem sido conhecido há muito tempo. Foi primeiramente proposto por Wright em 1949 e difundida por Petlyuk em 1965, de quem recebeu o nome devido a seu estudo teórico do esquema. Apesar das vantagens, faltas de estudos no projeto e problemas operacionais e de controle, restringiram seu uso até hoje. Além de economizar energia, as colunas Petlyuk podem economizar custos de capitais, reduzindo o número de colunas, refeedores e condensadores.

Cristiansen e Skogestad (1997), definem a configuração Petlyuk como:

A configuração Petlyuk é um arranjo de colunas que separa três ou mais componentes usando só um refeedor e só um condensador, no qual qualquer grau de separação (pureza) pode ser obtido incrementando o número de estágios (sempre que o refluxo esteja acima de um certo valor mínimo e que a separação seja termodinamicamente viável).

Diagramas esquemáticos da coluna Petlyuk para a separação das misturas ternárias, são ilustrados nas figuras 6.1(a) e (b). Cabe enfatizar que

as duas representações são idênticas sob os pontos de vista computacional e termodinâmico se se negligenciar a transferência de calor através da parede divisória (Christiansen e Skogestad, 1997).

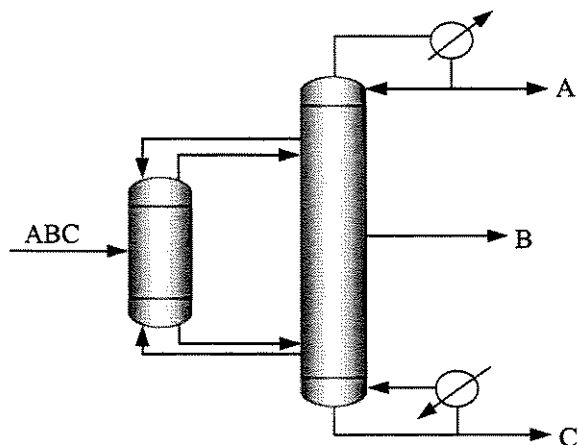


Figura 6.1 (a) Coluna Petlyuk – Prefracionador e Coluna Principal

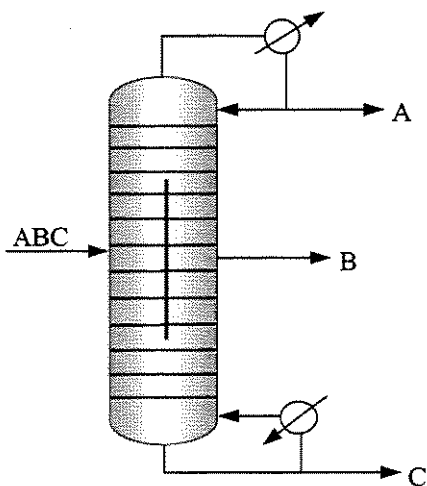


Figura 6.1 (b) Coluna com Parede Divisória

Na figura 6.1-(b), a parede divisória é para dividir a coluna no que seria o prefracionador e a coluna principal, numa mesma estrutura. A seção da coluna que está do lado da alimentação funciona como o prefracionador e o resto da coluna como a coluna principal.

Uma das perdas termodinâmicas mais significativas em separações multicomponentes resultam do remisturamento dos componentes intermediários. Uma sequência convencional para a separação de uma mistura ternária é mostrada na figura 6.2.

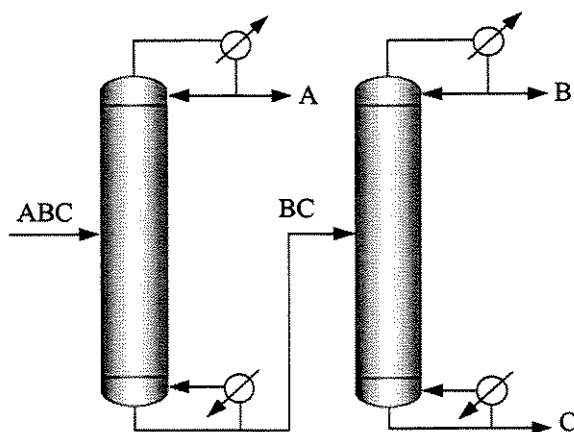


Figura 6.2 Configuração da Sequência Direta

O componente A é o mais volátil, B o intermediário e C o mais pesado (menos volátil). Os componentes são separados individualmente na ordem decrescente de volatilidades relativas para produzir três produtos altamente puros. O componente A é separado da mistura na primeira coluna e os componentes B e C são separados na segunda coluna.

Um perfil típico de composições do componente intermediário é mostrado na figura 6.3. Este é um exemplo de uma mistura de n-hexano, n-heptano e n-octano em concentrações de 80, 5 e 15 %, respectivamente. A fração molar de n-heptano aumenta em direção ao fundo da coluna. Contudo, à medida em que a concentração de n-heptano aumenta, a proporção do menos volátil, n-octano, aumenta também, causando um pico no perfil de composição de n-heptano.

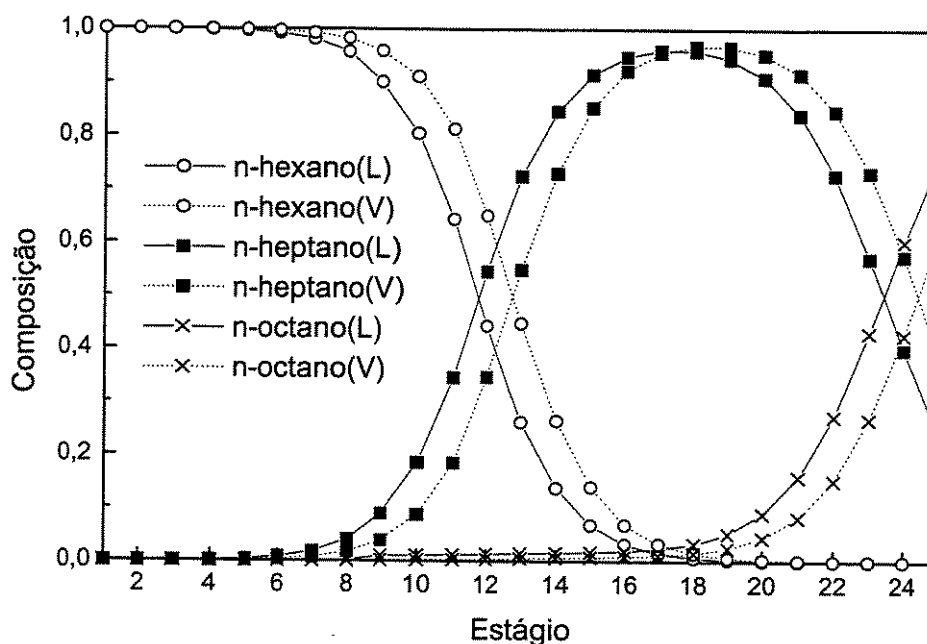


Figura 6.3 Remisturamento do Componente Intermediário

Este remisturamento é termodinamicamente indesejável, já que um grau de concentração do componente intermediário é primeiro alcançado e depois desperdiçado. Tal remisturamento é inevitável quando uma alimentação com mais de dois componentes é destilada em uma coluna convencional que tem uma corrente de alimentação, e produz dois produtos da coluna do topo e do fundo.

A composição da corrente de alimentação é freqüentemente diferente das composições no prato. Esta diferença de composições (também chamado de desfase da alimentação) leva à degradação da pureza da destilação já alcançada, e portanto deve ser minimizada. Como os perfis de composição em colunas de alta pureza são mais definidos, as diferenças de composição entre a alimentação e o estágio de alimentação são maiores.

6.2.1. CORRENTES DA COLUNA PETLYUK

A configuração Petlyuk na figura 6.4 mostra duas colunas distintas: um prefracionador e uma coluna principal. O prefracionador executa uma separação preliminar (“non-sharp”) entre os componentes A e C. O componente A é concentrado no topo do prefracionador e o componente C é acumulado no fundo. O componente intermediário, B, está distribuído entre o topo e o fundo, misturado com A e C.

A mistura dos componentes A e B é depois separada nas duas seções de topo, seções 3 e 4, da coluna principal. A mistura B e C é separada no fundo da coluna principal, seções 5 e 6. As duas colunas estão unidas por duas correntes de líquido e duas correntes de vapor, daí o nome de termicamente acopladas.

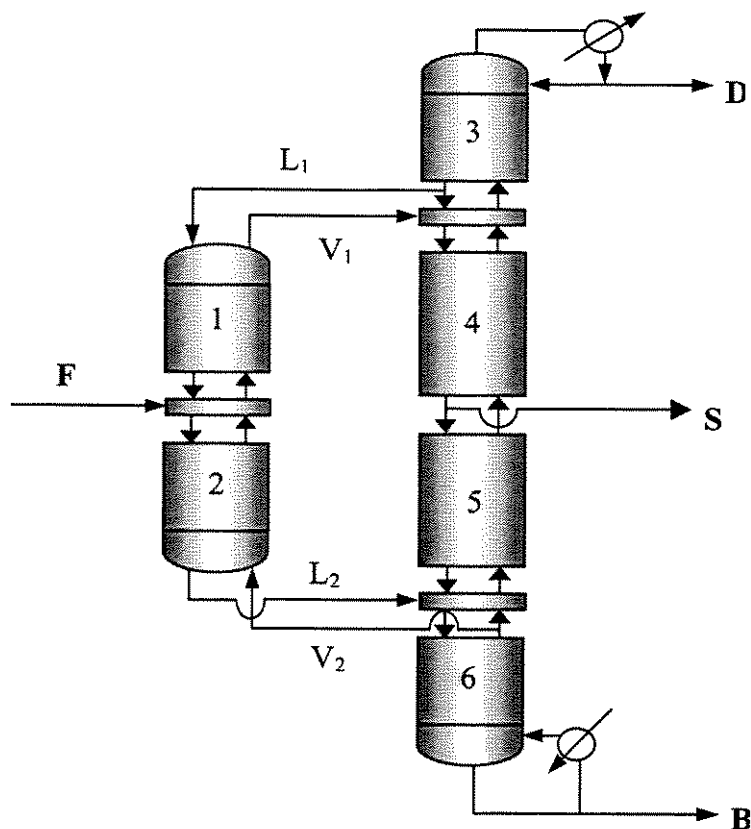


Figura 6.4 Coluna Petlyuk dividida por seções

A corrente líquida L_1 sai da seção 3 da coluna e se divide em duas correntes: uma, que é alimentada ao prefracionador para prover o refluxo necessário, e a outra, que entra na seção 4 e circula na coluna principal. A corrente de vapor V_1 sai do prefracionador e é alimentada à coluna principal, onde se mistura com a corrente de vapor da seção 4 para entrar na seção 3 da coluna principal.

Na parte baixa da coluna principal, a corrente de vapor da seção 6 é dividida em duas correntes. V_2 é alimentada ao prefracionador para prover o “stripping” necessário, em quanto que o remanescente entra à seção 5 da coluna principal. A corrente líquida L_2 abandona o fundo do prefracionador e

se une com a corrente líquida da seção 5 para prover refluxo para a seção 6 da coluna principal.

6.2.2. A COLUNA PETLYUK NA INDÚSTRIA

Vários estudos têm provado que para a separação de misturas de alimentação ternárias ideais em correntes de produtos puros, a configuração Petlyuk tem a menor demanda de energia. Tem-se dito que, na média, a configuração Petlyuk requer 30% menos energia que o arranjo convencional correspondente. A configuração Petlyuk tem também sido descrita como o arranjo mais eficiente para misturas de três componentes (Rudd, 1992). Há escrito, em Triantafyllou e Smith (1992), que “Para a maioria das separações, a coluna de destilação termicamente acoplada é termodinamicamente mais eficiente que os arranjos convencionais, e que como consequência, requer menos energia”. Os requerimentos de energia menores da configuração Petlyuk levam a diâmetros de coluna menores e menor área global de intercâmbio de calor no refeedor e no condensador. O número reduzido de refeedores e condensadores também resulta em um menor capital de investimento. Apesar de todas estas qualidades aparentemente atrativas, a configuração Petlyuk não tem encontrado um amplo uso industrial. Isto é bastante surpreendente porque a configuração Petlyuk é conhecida por quase 50 anos.

A falta de uso da configuração de Petlyuk foi atribuída a seu difícil projeto e controle. Porém, avanços consideráveis foram feitos recentemente nos aspectos de projeto e controle deste configuração (Christiansen e Skogestad, 1997; Halvorsen e Skogestad, 1997, 1998, 1999; Mizey et al

1998). O grupo da BASF opera já doze colunas com parede divisória em seus locais de Ludwigshafen e Schwarzheide, na Alemanha, e de Antuérpia, na Bélgica. Na área de produtos de química fina, o sistema tem a tecnologia padrão já pronta para projetos de investimento novos. A BASF é atualmente a única companhia no mundo que tem o acesso a esta tecnologia (BASF, 1995).

O sistema é não somente mais econômico, mas também mais suave, desde que os produtos são expostos às altas temperaturas de destilação por um tempo mais curto. As únicas alternativas à coluna de parede divisória no presente são uma coluna convencional com uma saída lateral ou a combinação mais cara de duas colunas (BASF, 1995).

6.2.3. QUANDO USAR A COLUNA PETLYUK

Existem contradições a respeito de quando é mais recomendado utilizar a coluna Petlyuk.

Por uma parte, Agrawal e Fidkowski publicaram em 1998 seu estudo da eficiência termodinâmica, comparando cinco configurações de destilação ternária para destilar líquidos saturados ideais em correntes de produtos puros. O resultado deste estudo foi que para a configuração de colunas Petlyuk, a qual é sabida ter a menor demanda de energia para uma destilação ternária, os valores de composição da alimentação para as quais a configuração é mais eficiente são bastante limitados.

Eles explicam que, em geral, a configuração Petlyuk é a mais eficiente somente quando A e C estão presentes em concentrações altas, e com

concentrações muito menores de B. Esta observação contrasta com os estudos, feitos na literatura, que a configuração Petlyuk é freqüentemente atrativa quando há uma quantidade grande de B, com quantidades significativas de A e de C.

Por outro lado, Lestak e Collins em 1997, propõem as seguintes regras sobre quando usar ou não as colunas Petlyuk, em particular as de parede divisória.

Colunas Petlyuk ou de parede divisória devem ser consideradas como substitutas para algumas sequências de colunas convencionais quando:

- O componente intermediário está em excesso na alimentação.
- A pureza desejada da fração do componente intermediário é maior que a que pode alcançar uma coluna simples com saída lateral.
- As especificações dos produtos e as distribuições de volatilidade relativa são uniformes.

Em geral, colunas Petlyuk não devem ser usadas quando:

- A diferença de pressão na sequência convencional é alta.
- A sequência convencional requer utilidades (refrigeração e água de resfriamento) a níveis muito diferentes.

6.3 SIMULAÇÃO DA COLUNA PETLYUK

A simulação de uma configuração Petlyuk, mesmo num simulador comercial como o HYSIM, é uma operação complexa que tem que ser feita por partes devido aos ciclos entre as colunas. Se bem o simulador pode trabalhar com colunas com múltiplas alimentações e saídas, o fato de duas colunas estarem interligadas por correntes de líquido e vapor e ter só um condensador e um refeedor para todo o sistema, fazem com que a dificuldade para se chegar a convergir esta configuração seja muito alta.

Simulou-se, primeiramente, o prefracionador como uma coluna com três alimentações, a alimentação da mistura ternária, e os ciclos de líquido e vapor. Esta coluna tem duas correntes de produtos, mas não tem nem refeedor nem condensador.

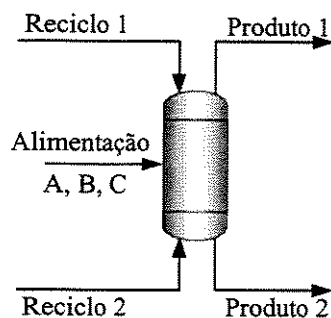


Figura 6.5 Prefracionador

Inicialmente, como as correntes de reciclo que vêm da coluna principal são desconhecidas, assumimos valores arbitrários para elas. Já que o prefracionador não tem nem refeedor nem condensador, o número de especificações é zero, e o prefracionador é considerado como uma coluna de absorção com uma alimentação lateral.

Prosseguiu-se com a coluna principal, a qual tem duas alimentações laterais e cinco correntes de produtos. As alimentações serão os produtos do prefracionador, uma corrente líquida e a outra de vapor. Entre os produtos teremos os do topo, fundo e uma saída lateral, onde obtemos os componentes puros, e mais duas saídas laterais, uma de líquido e a outra de vapor, que retornam ao prefracionador como reciclo.

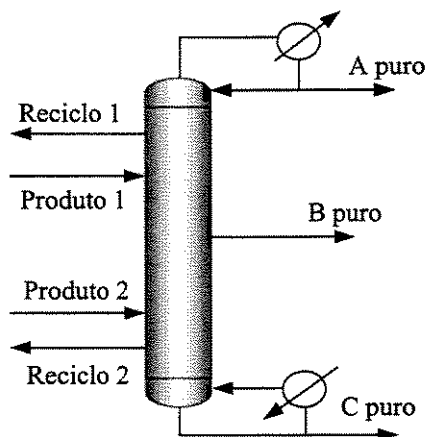


Figura 6.6 Coluna principal

Como esta coluna tem, além de um condensador e um refeedor, cinco correntes de produtos, são necessárias seis especificações para caracterizar a coluna. Uma vez que a coluna converge com estas especificações é preciso mudar as propriedades das correntes de reciclo ao prefracionador, com os valores obtidos como resultado da simulação da coluna principal. Logo, é preciso rodar novamente a coluna principal até que convirja com os novos resultados do prefracionador. Para isto, terá que se modificar as posições de alimentação, retirada dos produtos e número de estágios, até obter os produtos com a pureza desejada.

Por exemplo, as especificações, para a coluna principal com 60 estágios, para a separação de uma mistura 80-5-15 % da mistura n-hexano, n-heptano e n-octano, foram:

1. A vazão de vapor no estágio 1 deve ser 0,0 kgmol/h
2. A fração molar do n-hexano líquido no estágio 1 deve ser 0,9999
3. A fração molar do n-octano líquido no estágio 60 deve ser 0,9999
4. O fluxo do estágio 1 Líquido lateral deve ser 80,00 kgmol/h
5. O fluxo do estágio 60 Líquido deve ser 15,00 kgmol/h
6. O fluxo do estágio 25 Líquido lateral deve ser 5,00 kgmol/h

Uma vez que contamos com a simulação das duas colunas, uniram-se as correntes de líquido e de vapor mediante a operação de reciclo, do simulador. Com esta operação, o simulador fará cálculos iterativos até o sistema convergir.

Para a simulação da coluna Petlyuk, foi escolhida a mesma mistura que no capítulo 3, n-hexano, n-heptano e n-octano, e trabalhamos com alimentações de 33-33-34 % e de 80-5-15 %, respectivamente.

Pode-se observar nas figuras 6.7 e 6.8 os perfis de temperatura e de composição tanto do prefracionador como da coluna principal. Estas figuras correspondem à mistura de uma composição de 80-5-15%, um prefracionador com 7 estágios e uma coluna principal com 60 estágios.

Os resultados das simulações se encontram nas tabelas 6.1 a 6.6. Foram estudados cinco casos, três com uma concentração de alimentação de 80-5-15 % de n-hexano, n-heptano e n-octano, e duas com uma concentração de

alimentação de 33-33-34 % da mesma mistura. Nas tabelas 6.1 a 6.5, mostram-se as composições de todas as correntes tanto de alimentação como de produto de cada coluna, e na tabela 6.6, os resultados do número de estágios, razão de refluxo e energia no refeedor.

De acordo com os casos estudados, pode-se ver que a configuração Petlyuk é mais eficiente para misturas diluídas no componente intermediário. Isto pode ser comprovado comparando os resultados dos casos com uma alimentação equimolar e os com uma alimentação diluída, tanto para colunas principais com 42 estágios como para colunas com 70 estágios. Além disso, pode-se ver claramente, na tabela 6.6, que o consumo de energia no refeedor vai diminuindo com o incremento no número de estágios.

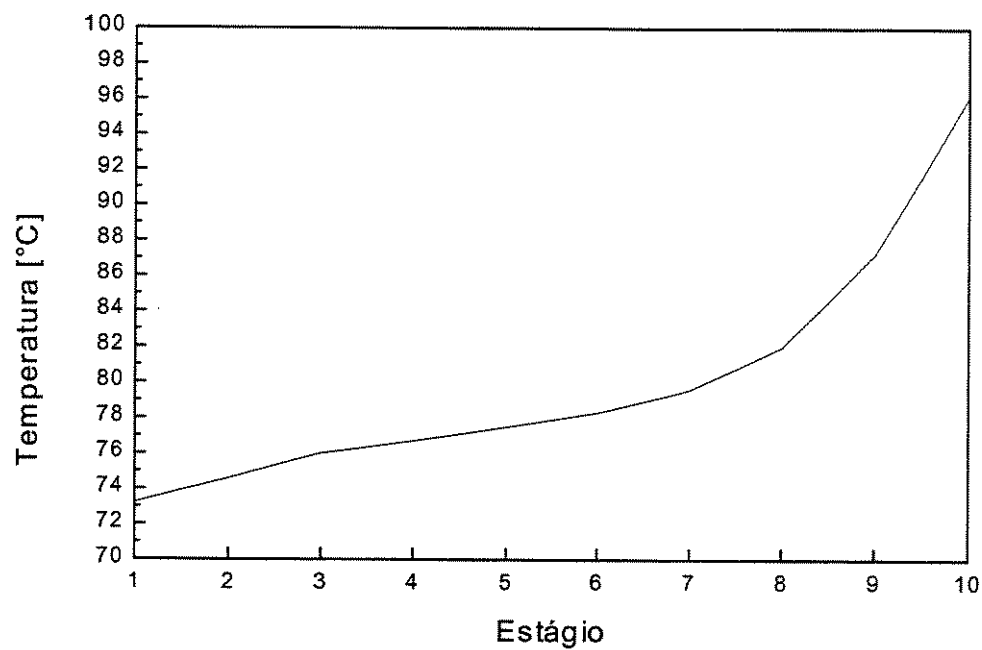


Figura 6.7 (a) Perfil de temperatura do prefracionador

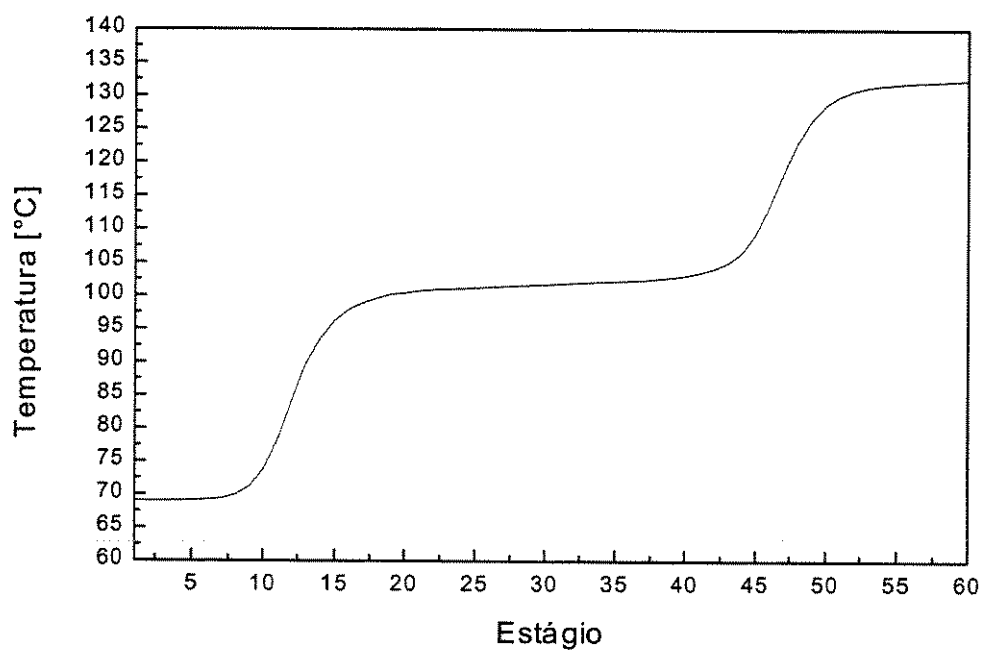


Figura 6.7 (b) Perfil de temperatura da coluna principal

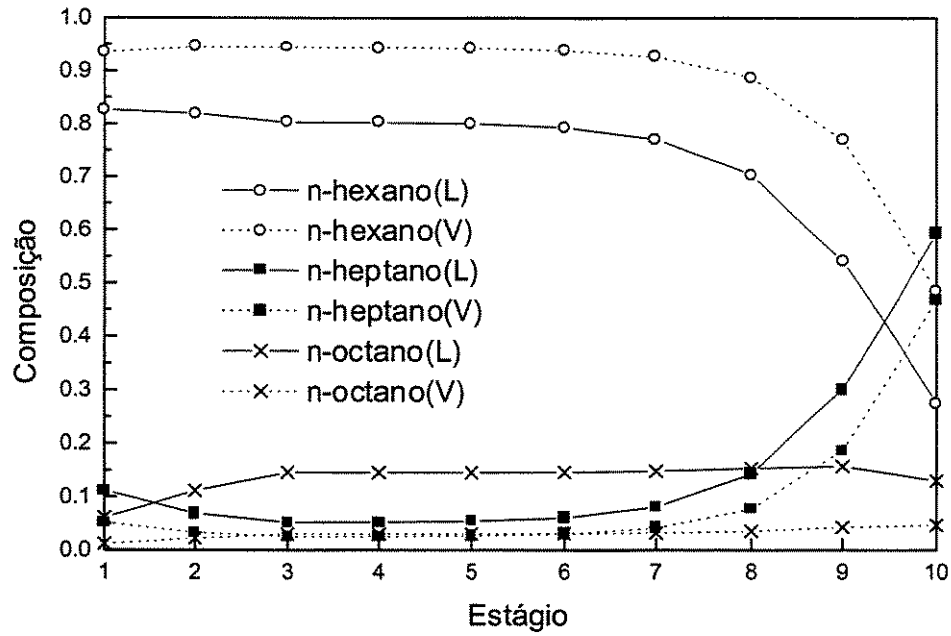


Figura 6.8 (a) Perfil de composições do prefracionador

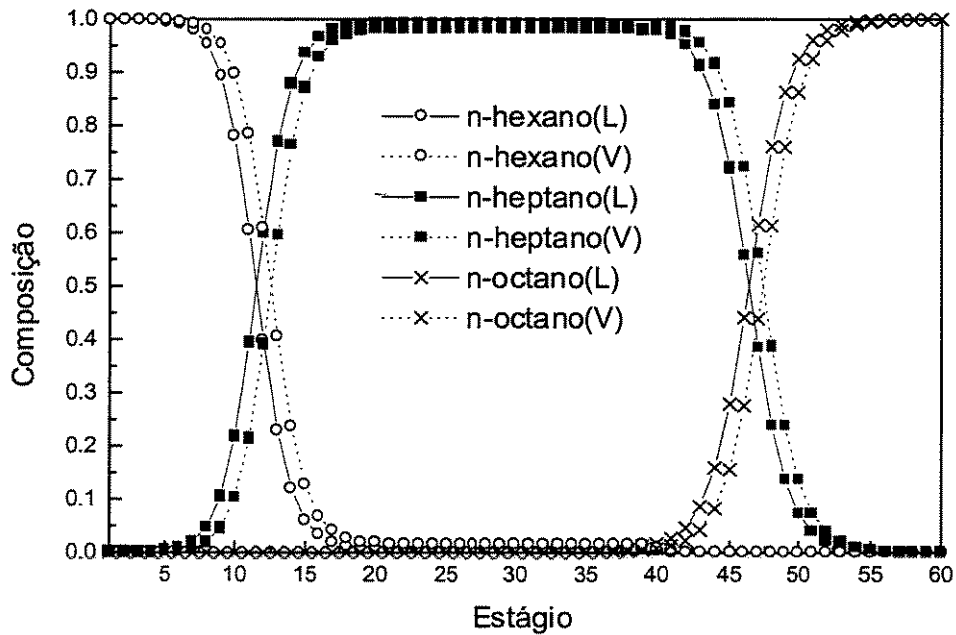


Figura 6.8 (b) Perfil de composições da coluna principal

CASO 1

Tabela 6.1-(a) Composição de Alimentação ao Prefracionador – Caso 1

Corrente	Alimentação	Rec. 1	Rec. 2
Comp. n-C6	0,8000	0,9492	0,0050
Comp. n-C7	0,0500	0,0508	0,9908
Comp. n-C8	0,1500	0,0000	0,0041
Vazão [kgmol/h]	100,00	14,00	60,93

Tabela 6.1-(b) Composição dos Produtos do Prefracionador – Caso 1

Corrente	Topo	Fundo
Comp. n-C6	0,9610	0,2824
Comp. n-C7	0,0314	0,5832
Comp. n-C8	0,0076	0,1344
Vazão [kgmol/h]	65,13	109,80

Tabela 6.1-(c) Composição de Alimentação à Coluna Principal – Caso 1

Corrente	Alim. 1	Alim. 2
Comp. n-C6	0,9610	0,2824
Comp. n-C7	0,0314	0,5832
Comp. n-C8	0,0076	0,1344
Vazão [kgmol/h]	65,13	109,80

Tabela 6.1-(d) Composição dos Produtos da Coluna Principal – Caso 1

Corrente	Topo	Rec. 1	Lateral	Rec. 2	Fundo
Comp. n-C6	0,9999	0,9492	0,0040	0,0044	0,0000
Comp. n-C7	0,0001	0,0508	0,9951	0,9915	0,0001
Comp. n-C8	0,0000	0,0000	0,0009	0,0041	0,9999
Vazão [kgmol/h]	80,00	14,03	5,00	60,90	15,00

CASO 2

Tabela 6.2-(a) Composição de Alimentação ao Prefracionador – Caso 2

Corrente	Alimentação	Rec. 1	Rec. 2
Comp. n-C6	0,8000	0,7815	0,0158
Comp. n-C7	0,0500	0,2184	0,9828
Comp. n-C8	0,1500	0,0001	0,0014
Vazão [kgmol/h]	100,00	11,00	110,13

Tabela 6.2-(b) Composição dos Produtos do Prefracionador – Caso 2

Corrente	Topo	Fundo
Comp. n-C6	0,9361	0,2761
Comp. n-C7	0,0520	0,5937
Comp. n-C8	0,0119	0,1302
Vazão [kgmol/h]	63,22	110,13

Tabela 6.2-(c) Composição de Alimentação à Coluna Principal – Caso 2

Corrente	Alim. 1	Alim. 2
Comp. n-C6	0,9361	0,2761
Comp. n-C7	0,0520	0,5937
Comp. n-C8	0,0119	0,1302
Vazão [kgmol/h]	63,22	110,13

Tabela 6.2-(d) Composição dos Produtos da Coluna Principal – Caso 2

Corrente	Topo	Rec. 1	Lateral	Rec. 2	Fundo
Comp. n-C6	0,9999	0,7809	0,0071	0,0155	0,0000
Comp. n-C7	0,0001	0,2191	0,9925	0,9831	0,0001
Comp. n-C8	0,0000	0,0001	0,0004	0,0014	0,9999
Vazão [kgmol/h]	80,00	11,00	5,00	62,35	15,00

CASO 3

Tabela 6.3-(a) Composição de Alimentação ao Prefracionador – Caso 3

Corrente	Alimentação	Rec. 1	Rec. 2
Comp. n-C6	0,8000	0,8427	0,0099
Comp. n-C7	0,0500	0,1569	0,9871
Comp. n-C8	0,1500	0,0005	0,0030
Vazão [kgmol/h]	100,00	13,72	91,97

Tabela 6.3-(b) Composição dos Produtos do Prefracionador – Caso 3

Corrente	Topo	Fundo
Comp. n-C6	0,9193	0,0502
Comp. n-C7	0,0657	0,8251
Comp. n-C8	0,0150	0,1247
Vazão [kgmol/h]	94,52	111,17

Tabela 6.3-(c) Composição de Alimentação à Coluna Principal – Caso 3

Corrente	Alim. 1	Alim. 2
Comp. n-C6	0,9193	0,0502
Comp. n-C7	0,0657	0,8251
Comp. n-C8	0,0150	0,1247
Vazão [kgmol/h]	94,52	111,17

Tabela 6.3-(d) Composição dos Produtos da Coluna Principal – Caso 3

Corrente	Topo	Rec. 1	Lateral	Rec. 2	Fundo
Comp. n-C6	0,9999	0,8428	0,0048	0,0096	0,0000
Comp. n-C7	0,0001	0,1567	0,9923	0,9875	0,0001
Comp. n-C8	0,0000	0,0005	0,0029	0,0029	0,9999
Vazão [kgmol/h]	80,00	13,73	5,00	91,95	15,00

CASO 4

Tabela 6.4-(a) Composição de Alimentação ao Prefracionador – Caso 4

Corrente	Alimentação	Rec. 1	Rec. 2
Comp. n-C6	0,3300	0,9484	0,0008
Comp. n-C7	0,3300	0,0515	0,9942
Comp. n-C8	0,3400	0,0001	0,0050
Vazão [kgmol/h]	100,00	16,27	58,95

Tabela 6.4-(b) Composição dos Produtos do Prefracionador – Caso 4

Corrente	Topo	Fundo
Comp. n-C6	0,7144	0,0896
Comp. n-C7	0,2403	0,6504
Comp. n-C8	0,0453	0,2600
Vazão [kgmol/h]	52,47	122,76

Tabela 6.4-(c) Composição de Alimentação à Coluna Principal – Caso 4

Corrente	Alim. 1	Alim. 2
Comp. n-C6	0,7144	0,0896
Comp. n-C7	0,2403	0,6504
Comp. n-C8	0,0453	0,2600
Vazão [kgmol/h]	52,47	122,76

Tabela 6.4-(d) Composição dos Produtos da Coluna Principal – Caso 4

Corrente	Topo	Rec. 1	Lateral	Rec. 2	Fundo
Comp. n-C6	0,9999	0,9480	0,0023	0,0007	0,0000
Comp. n-C7	0,0001	0,0520	0,9965	0,9950	0,0001
Comp. n-C8	0,0000	0,0000	0,0012	0,0043	0,9999
Vazão [kgmol/h]	33,00	16,21	33,00	59,01	34,00

CASO 5

Tabela 6.5-(a) Composição de Alimentação ao Prefracionador – Caso 5

Corrente	Alimentação	Rec. 1	Rec. 2
Comp. n-C6	0,3300	0,7659	0,0101
Comp. n-C7	0,3300	0,2341	0,9894
Comp. n-C8	0,3400	0,0000	0,0005
Vazão [kgmol/h]	100,00	15,94	37,27

Tabela 6.5-(b) Composição dos Produtos do Prefracionador – Caso 5

Corrente	Topo	Fundo
Comp. n-C6	0,7826	0,1574
Comp. n-C7	0,2112	0,5582
Comp. n-C8	0,0062	0,2844
Vazão [kgmol/h]	34,35	118,87

Tabela 6.5-(c) Composição de Alimentação à Coluna Principal – Caso 5

Corrente	Alim. 1	Alim. 2
Comp. n-C6	0,7826	0,1574
Comp. n-C7	0,2112	0,5582
Comp. n-C8	0,0062	0,2844
Vazão [kgmol/h]	34,35	118,87

Tabela 6.5-(d) Composição dos Produtos da Coluna Principal – Caso 5

Corrente	Topo	Rec. 1	Lateral	Rec. 2	Fundo
Comp. n-C6	0,9999	0,7658	0,0045	0,0094	0,0000
Comp. n-C7	0,0001	0,2342	0,9954	0,9902	0,0001
Comp. n-C8	0,0000	0,0000	0,0001	0,0005	0,9999
Vazão [kgmol/h]	33,00	15,79	33,00	37,42	34,00

TABELA 6.6 Resultados da simulações da configuração Petlyuk

Caso	Número de Estágios		Razão de Refluxo	Referredor [kcal/h]
	Prefracionador	Col. Principal		
1	7	42	195,40	1,089E+8
2	7	60	47,73	2,707E+7
3	10	70	12,55	7,555E+6
4	7	42	1362	3,120E+8
5	10	70	119,07	2,754E+7

6.4 CONCLUSÃO

Apesar das dificuldades apresentadas pela configuração Petlyuk, foi possível simular este arranjo de colunas utilizando o simulador HYSIM. Os resultados das simulações realizadas, mostram claramente que há uma diminuição da razão de refluxo e também da energia requerida no refervedor, ao se aumentar o número de estágios, como é de se esperar. Em todos os casos se obteve uma pureza de 99,99% nas correntes de topo e fundo, e no caso das correntes laterais a pureza foi acima de 99%.

CAPITULO 7

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

7.1 CONCLUSÕES

Foi realizado um estudo de avaliação das condições limites de operação para diferentes sistemas de destilação, utilizando o simulador comercial HYSIM. Estas avaliações consistiram em calcular o número de estágios mínimo prático e a razão de refluxo mínimo prático e compará-las com os cálculos “shortcut”. Estas condições limites práticas encontradas pelo método rigoroso do simulador representariam as condições mais próximas das reais enquanto que as achadas pelo método “shortcut”, as teóricas.

Inicialmente, trabalhou-se com misturas binárias ideais de n-hexano e n-heptano, para as quais o número de estágios mínimo é similar, tanto prático quanto teórico. Fizeram-se também estudos de destilação a baixa pressão (100 mmHg) onde se comprova que o número de estágios mínimo requerido é menor que o sistema operando à pressão atmosférica. Em todos os casos se encontrou que a localização da alimentação, calculada no método “shortcut”, não corresponde à realidade, pelo menos quando se trabalha com uma coluna com um número de estágios próximo ao mínimo. Segundo o método “shortcut”, a alimentação sempre fica na região do meio da coluna, enquanto que segundo o método rigoroso, para o número de estágios mínimo, a alimentação ótima ocorre primordialmente na base da coluna e, assim que se aumenta o número de estágios, a alimentação ótima muda para acima.

Com estas misturas também achamos, por ambos os métodos, a razão de refluxo mínima. No caso teórico, pelo método “shortcut”, como é de se esperar, o número de estágios tende ao infinito, enquanto que para o prático, pelo método rigoroso, se encontra a razão de refluxo mínima com um número de estágios finito (menor que 100), a partir dos quais a energia no refeedor não sofre alteração com o aumento do número de estágios.

Viu-se, também, que a condição da alimentação é muito importante em termos do consumo de energia. Aparentemente, uma alimentação de vapor superaquecido requer menos energia, mas na realidade, esta conclusão terá que ser comprovada por uma análise econômica do processo.

Trabalhamos também com uma mistura ternária, n-hexano, n-heptano e n-octano, para a qual fizemos o mesmo estudo que no caso da mistura binária: os cálculos dos limites do número mínimo de estágios e da razão de refluxo mínima. Para estes casos, trabalhou-se com arranjos de duas colunas conhecidas como a sequência direta e a sequência indireta. Embora a teoria indique que a sequência direta é a mais eficiente, isto depende das condições da mistura de alimentação.

Nas simulações para estas misturas ternárias, o método “shortcut” não coincide, no número de estágios nem na localização da alimentação, com o método rigoroso, pelo menos para a primeira coluna. O método “shortcut” é uma boa aproximação para se achar o número mínimo de estágios só quando se trata de sistemas binários. Já, quando se tem uma mistura multicomponente, este método não é tão eficiente.

A separação de uma mistura ternária em uma coluna com uma saída lateral resulta uma boa opção quando não se requer que todos os produtos tenham uma alta pureza. Nos casos estudados, pode-se ver que o produto da saída lateral sempre sai contaminado. A eficiência deste tipo de coluna não é tão boa quanto a configuração de duas colunas, nas quais se pode obter produtos praticamente puros. Quando se tem colunas com saída lateral e com um número de estágios maior que o mínimo, a localização ótima da saída lateral fica acima da alimentação no caso de uma corrente de vapor e abaixo da alimentação no caso de uma corrente líquida.

Para a separação de uma mistura quaternária se usaram 3 colunas, em 3 das 5 possíveis sequências. A sequência direta foi a mais eficiente para o caso estudado, mas como foi dito anteriormente, isto dependerá das condições da mistura de alimentação.

Um outro caso estudado foi o de uma mistura azeotrópica, etanol-água. Para a separação desta mistura, foi escolhido o processo de destilação extrativa e foi usado o etilenoglicol como solvente. Avaliou-se também a razão de refluxo e o número de estágios mínimo prático para uma carga fixa de 100 Kgmol/h de solvente, uma alimentação de 100 Kgmol/h e uma composição na região do azeótropo. Estes resultados pelo método rigoroso são muito úteis já que não é possível obtê-los pelo método “shortcut”.

Um ponto particularmente interessante no caso da separação dos componentes da mistura azeotrópica, é que foi possível separá-los por uma destilação invertida quando a composição da mistura se encontra depois do

ponto de azeótropo. Nesta destilação invertida se conseguiu recuperar ao redor de 40% de etanol como produto de fundo.

Por último, fizeram-se simulações de uma configuração complexa de colunas, a configuração Petlyuk, para a separação da mistura ternária, n-hexano, n-heptano e n-octano. Teve-se sucesso nas simulações destes arranjos já que o HYSIM não contempla esta configuração de colunas.

Embora a maioria dos casos estudados neste trabalho sejam misturas simples, pode se extrapolar os resultados de outros sistemas. No campo industrial, de farmácia, alimentos, petroquímico, ambiental, e outros, é de suma importância o grau de pureza de alguns produtos. Além da pureza, outro fator importante é a eficiência do processo em termos de consumo de energia já que este definirá o custo tanto do equipamento como do produto final.

A vantagem de se encontrar os limites práticos do número de estágios e da razão de refluxo mínima é que se reduz a faixa de busca para o projeto ótimo de coluna. Este projeto ótimo estaria entre estes limites e poderia ser calculado pelo mesmo simulador sem precisar de desenvolvimento de novos programas ou equações complexas. Embora o desenvolvimento do estudo dos limites para cada caso demore um certo tempo, tendo em conta o número de simulações que são necessárias para chegar a estes limites de operação, e, ainda, em cada caso com uma alimentação ótima, a vantagem é que eles são calculados de forma rigorosa. Daí, dependendo do sistema a ser estudado e o tipo de especificações que se deseja, há uma flexibilidade maior de uso e um número maior de opções.

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Algumas sugestões são propostas para futuros trabalhos:

- Estudar mais a fundo a destilação invertida como complemento de uma destilação extrativa, para economizar a quantidade de solvente.
- Estudo da simulação dinâmica da coluna Petlyuk com simuladores mais robustos como o HYSYS.
- Avaliar a eficiência da coluna Petlyuk para diferentes tipos de misturas.
- Comparar a configuração Petlyuk com outras configurações da literatura como colunas com “strippers”, ciclos, etc.
- Estudar o controle da configuração Petlyuk

CAPITULO 8

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGRAWAL R., FIDKOWSKI Z., *Are thermally Coupled Distillation Columns Always Thermodynamically More Efficient for Ternary Distillations?*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 37, 1998

AGRAWAL R., FIDKOWSKI Z., *More Operable Arrangements of Fully thermally Coupled Distillation Columns*, **AIChE Journal**, V. 44, N. 11, 1998

AGRAWAL R., HERRON M., *Efficient Use of an Intermediate Reboiler or Condenser in Binary Distillation*, **AIChE Journal**, V. 44, N. 6, 1998

AGRAWAL R., HERRON M., *Intermediate Reboiler and Condenser Arrangement for Binary Distillation Columns*, **AIChE Journal**, V. 44, N. 6, 1998

ASPEN TECH, *Aspen Plus Version 10.1 Reference Guide*, **Aspen Tech**, USA, 1999

BASF, <http://www.basf-ag.basf.de/>, 1995

BAUER M. H., STICHLMAIR J., *Synthesis and Optimization of Distillation Sequences for the Separation of Azeotropic Mixtures*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 19, Suppl. 1995

- BRITO R. P., *Processo de Destilação Extrativa: Modelagem Dinâmica, Simulação e Avaliação de Nova Configuração*, Tese de Doutorado, UNICAMP/FEQ, 1997
- COLLURA M., LUYBEN W., *Energy-Saving Distillation Designs in Ethanol Production*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 27, 1988
- COULSON, J. M., RICHARSON, J. F., *Chemical Engineering, Vol 2. Particle Technology and Separation Processes*, **Butterworth-Heinemann Linacre House**, Jordan Hill Oxford, 1991
- CHRISTTIANSEN A., SKOGESTAD S., LIEN K., *Complex Distillation Arrangements: Extending the Petlyuk Ideas*, **Computers & Chem. Eng.** V. 21, Suppl., 1997
- CHRISTTIANSEN A., SKOGESTAD S., LIEN K., *Partitioned Petlyuk Arrangements for Quaternary Separations*, **Proc. Symposium Distillation and Absorbtion 97**, Netherlands, 1997
- CHRISTTIANSEN A., SKOGESTAD S., *Energy Savings in Complex Distillation Arrangements: Importance of Using the Preferred Separation*, **AIChE Annual Meeting**, Paper 199d, 1997
- EIDEN U., SCHOLL S., *Use of Simulation in Rating and Design of Distillation Units*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 21, Suppl., 1997

ECKERT E., HLAVÁČEK V., *Calculation of Multicomponent Distillation of Non-Ideal Mixtures by a Short-Cut Method*, **Chem. Eng. Science**, V. 33, 1978

FIDKOWSKI Z., KRÓLIKOWSKI L., *Minimum Energy Requirements of Thermally Coupled Distillation Systems*, **AIChE Journal**, V. 33, N. 4, 1987

FIDKOWSKI Z., KRÓLIKOWSKI L., *Thermally Coupled System of Distillation Columns: Optimization Procedure*, **AIChE Journal**, V. 32, N. 4, 1986

HALVORSEN I., SKOGESTAD S., *Optimizing Control of Petlyuk Distillation: Understanding the Steady-State Behavior*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 21, Suppl., 1997

HALVORSEN I., SKOGESTAD S., *Use of Feedback for Indirect Optimizing Control: Application to Petlyuk Distillation*, **IFAC Symposium DYCOPS-5**, Corfu, Greece, 1998

HALVORSEN I., SKOGESTAD S., *Use of Short-cut Methods to Analyse Optimal Operation of Petlyuk Distillation Columns*, **PRES'99**, Hungary, 1999

HALVORSEN I., SKOGESTAD S., *Evaluation of Self-Optimizing Control Structures for an Integrated Petlyuk Distillation Column*, **PRES'99**, Hungary, 1999

- HALVORSEN I., SKOGESTAD S., *Optimal Operation of Petlyuk Distillation: Steady-State Behaviour*, **J. Proc. Control**, V. 9, 1999
- HALVORSEN I., SKOGESTAD S., *Optimizing Control of Petlyuk Distillation: Understanding the Steady-State Behaviour*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 21, Suppl., 1997
- HENLEY E. J., SEADER J. D., *Equilibrium–Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, **John Wiley & Sons, Inc.**, 1981
- HENRY H., CHIEN Y., *A Rigorous Method for Calculating Minimum Reflux Rates in Distillation*, **AIChE Journal**, V. 24, N. 4, 1978
- HOLLAND D. C., *Fundamentals of Multicomponent Distillation*, **McGraw Hill**, 1981
- HUMPHREY J., *Separation Processes: Playing a Critical Role*, **Chem. Eng. Progr.**, October, 1995
- HYPROTECH, *HYSIM User's Guide*, **Hyprotech**, Canada, 1994
- HYPROTECH, *HYSYS User's Guide*, **Hyprotech**, Canada, 1998
- KEHLEN H., RÄTZCH M., *Complex Multicomponent Distillation Calculations by Continuous Thermodynamics*, **Chem. Eng. Science**, V. 42, N. 2, 1987

KING C. J., *Separation Processes*, **McGraw Hill**, 1980

KIRKBRIDE C., *Process Design Procedure for Multi-Component Fractionators*, **Petroleum Refiner**, V. 23, N. 9, 1944

KNAPP J., DOHERTY M., *Thermal Integration of Homogeneous Azeotropic Distillation Sequences*, **AIChE Journal**, V. 36, N. 7, 1990

KOOIJMAN H., TAYLOR R., *A Nonequilibrium Model for Dynamic Simulation of Tray Distillation Columns*, **AIChE Journal**, V. 41, N. 8, 1995

KYRIAKOPOULOU D., KALITVENTZEFF B., *Interior Point Techniques for Constrained Simulation Problem*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 22, Suppl., 1998

LEE F. M., *Extractive Distillation: Close-Boiling-Point*, **Chemical Engineering**, November, 1998

LEE F. M., GENTRY J., *Don't Overlook Extractive Distillation*, **Chem. Eng. Prog.**, October, 1997

LESTAK F., COLLINS C., *Advanced Distillation Saves Energy and Capital*, **Chemical Engineering**, July, 1997

LYND L., GRETHLEIN H., *IHOSR / Extractive Distillation for Ethanol Separation*, **CEP**, November, 1984

MACIEL M. R. W., *PhD Thesis*, Department of Chemical Engineering,
University of Leeds, England, UK, 1989

McKETTA J. J., *Unit Operations Handbook, Vol. 1*, **Marcel Dekker, Inc.**,
1993

MIZSEY P., HAU N. T., BENKO N., FONYO Z., *Process Control for
Energy Integrated Distillation Schemes*, **Computers & Chem. Eng.**, V.
22, Suppl., 1998

MORUD J., SKOGESTAD S., *Allowable Operation Regions of Integrated
Distillation Arrangements*, **AIChE Annual Meeting**, Paper 131d, San
Francisco, 1994

NIKOLAIDES I., MALONE M., *Approximate Design of Multiple-Feed/Side-
Stream Distillation Systems*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 26, 1987

NIKOLAIDES I., MALONE M., *Approximate Design and Optimization of
Thermally Coupled Distillation with Prefractionation*, **Ind. Eng. Chem.
Res.**, V. 27, 1988

OFFERS H., DÜSSEL R., STICHLMAIR J., *Minimum Energy Requirement
of Distillation Processes*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 19, Suppl.
1995

OLSEN I., ENDRESTØL G. O., *A Rigorous and Efficient Distillation Column Model for Engineering and Training Simulators*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 21, Suppl. 1997

RICKER N. GRENS E., *A Calculation Procedure for Design Problems in Multicomponent Distillation*, **AIChE Journal**, V. 20, N. 2, 1974

ROOKS R., MALONE M., DOHERTY M., *A Geometric Design Method for Side-Stream Distillation Columns*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 35, 1996

RUDD H., *Thermal Coupling for Energy Efficiency*, Supplement to **Chemical Engineering**, S14, 1992

SIMULATION SCIENCES INC, *PRO/II – User's Guide Ver. 5.1*, **Simulation Sciences Inc. USA**, 1999

SKOGESTAD S., *Dynamics and Control of Distillation Columns - A Tutorial Introduction*, **Trans IChemE**, V. 75, 1997

STICHLMAIR J., HERGUIJUELA J. R., *Separation Regions and Processes of Zeotropic and Azeotropic Ternary Distillation*, **AIChE Journal**, V. 38, N. 10, 1992

STUPIN W., LOCKHART F. J., *Thermally Coupled Distillation – A Case History*, **Chem. Eng. Prog.**, V. 68, N. 10, 1972

TREYBAL R. E., *Mass-Transfer Operations*, **McGraw Hill**, 1981

TRANTAFYLLOU C., SMITH R., *The Design and Optimization of Fully Thermally Coupled Distillation Columns*, **Trans. Inst. Chem. Eng.**, V. 70, 1992

VON WATZDORF R., BAUSA J., MARQUARDT W., *Shortcut Methods for Non Ideal Multicomponent Distillation: 1. Simple Columns*, **AIChE Journal**, V. 44, N. 10, 1998

VON WATZDORF R., BAUSA J., MARQUARDT W., *Shortcut Methods for Non Ideal Multicomponent Distillation: 2. Complex Columns*, **AIChE Journal**, V. 45, N. 8, 1999

WOLF M. R., BRITO R. P., *Evaluation of the Dynamic Behavior of an Extractive Distillation Column for Dehydration of Aqueous Ethanol Mixtures*, **Computers & Chem. Eng.**, V. 19, Supl. 1995

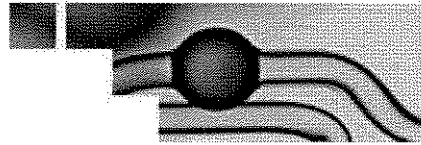
WOLFF E., SKOGESTAD S., *Operation of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation Columns*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 34, N. 6, 1995

WOLFF E., SKOGESTAD S., *Dynamics and Control of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation Columns*, **Symposium ESCAPE'4**, Dublin, 1994

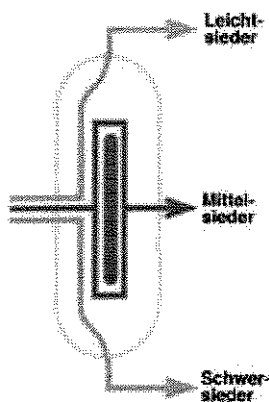
WU D., YANG Z., ZHANG R., LU S., *Evolution of Pinch-Point Zones in Multicomponent Distillation Columns. 2. Stripping Section*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 38, N. 5, 1999

ZHICAI Y., DI W., YANG Z., ZANG R., *Evolution of Pinch-Point Zones in Multicomponent Distillation Columns. 1. Rectifying Section*, **Ind. Eng. Chem. Res.**, V. 35, N.8, 1996

A split wall for the environment



If there were an award for environmental protection, it would go to the split wall column. In distillative separation processes, the column with the hidden secret saves about 30 percent energy.



And it's cheaper to build, with investment cost around 30 percent lower than traditional configurations. A simple metal plate welded vertically down the center of the column enables three products to be obtained in any desired purity using a single column. The system is not only more economical, but also milder, since the products are exposed to high distillation temperatures for a shorter time. The only alternatives to the split wall column at present are a side-stream column without a split wall or the more costly combination of two columns.

Competitive advantage for BASF:

The BASF Group already operates twelve split wall columns at its Ludwigshafen, Schwarzheide and Antwerp sites. In the area of fine chemicals, the system has already become standard technology for new investment projects.

Existing plants can also be retrofitted. The economic potential of the new technology becomes exciting when one considers that around 40 percent of the energy consumed by the chemical industry is expended on distillative separation processes. BASF is currently the only company worldwide which has access to this technology.

Innovation team:

Dipl.Ing. Dr. Gerd Kaibel
Dipl.Math Hans-Horst Mayer
Dipl.Ing. Manfred Stroezel

ZAV/D
ZE/IP
DWX/AV

[Feedback](#) | [Search](#)