

## MODELAGEM GENÉRICA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

P. B. Staudt; R. P. Soares; A. R. Secchi

Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Rua Engenheiro Luiz Englert, s/n° – CEP: 90040-040 – Porto Alegre – RS – Brasil

Telefone: (55-51) 3308-3528 – Email: {paula,rafael,arge}@enq.ufrgs.br

**RESUMO** – A pesquisa a cerca da modelagem de colunas de destilação não é mais uma novidade nos dias de hoje. Os primeiros trabalhos, com metodologias para a solução de sistemas de separação modelados prato a prato, surgiram na década de 30. Nos anos 50, com o advento do computador digital, foram realizados investimentos sólidos no desenvolvimento de novos algoritmos e simuladores. Na década de 70, os primeiros simuladores comerciais começaram a ser introduzidos na indústria e o desenvolvimento de modelos rigorosos não parou mais. Dentro deste contexto, este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um modelo rigoroso de coluna de destilação, genérico, dinâmico e de fácil aplicação nos mais variados tipos de estudos. Os modelos gerados foram implementados na linguagem de modelagem do simulador EMSO e foi utilizada uma coluna industrial com 80 pratos que separa isobutano de uma mistura de 13 componentes para a validação. Este problema resulta em um sistema com mais de 6300 variáveis. A resposta dinâmica do modelo foi comparada com dados reais de operação. Os resultados da validação foram satisfatórios, assim como o desempenho do simulador EMSO quanto à eficiência computacional e à robustez na solução do problema.

**PALAVRAS-CHAVE:** destilação; modelagem; simulação dinâmica; coluna de pratos.

**ABSTRACT** – Nowadays, modeling and simulation of distillation columns are not a new research subject anymore. It was around the 1930's that the first methodologies were proposed to solve staged separation systems. However, it was in 1950's, with the advent of digital computers, that most important investments were made for the development of new algorithms and simulators. In the 1970's, the industry started to use the first commercial simulators and the development of rigorous models for distillation columns has not stopped since then. Inside this context, the main goal of this work is the development of a rigorous, generic, dynamic, and easy-to-use model of distillation column to be applied on different targets. The generated models were implemented in the EMSO simulator environment and an 80 tray column which separates isobutane of a 13 component mixture was used to analyze the model performance. The solution of the problem generates a 6300 variable system. The validation results have been satisfactory as well as the model prediction and the EMSO simulator performance in computational efficiency and robustness.

## 1. INTRODUÇÃO

A simulação de processos de separação, em especial de colunas de destilação, é uma área muito importante na simulação de processos dinâmicos. A destilação é uma das operações que mais demanda energia dentre os processos químicos. Por exemplo, a destilação foi responsável por 11% do gasto de energia em indústrias dos EUA no ano de 1991, conforme Humphrey e Siebert (apud KOEIJER; KJELSTRUP, 2004).

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um modelo genérico, rigoroso, dinâmico e de fácil aplicação nos mais variados tipos de estudos, desde simples simulações de operação até otimizações e previsões de comportamentos de parada e partida de plantas. Ou seja, um modelo projetado para situações onde uma representação fiel do comportamento dinâmico é necessária.

Para a realização de tal objetivo foi utilizado o simulador genérico de processos EMSO (SOARES; SECCHI, 2003) e seu ambiente de desenvolvimento de modelos. Os modelos gerados neste estudo fazem parte da biblioteca EML (*EMSO Model Library*). A EML é distribuída no conceito de *software* livre, disponibilizando todos os modelos via internet e sem custo. O simulador EMSO pode ser utilizado de forma genérica e nos mais variados ramos da engenharia. Esta ferramenta apresenta várias características importantes que auxiliam no desenvolvimento de modelos e na realização de simulações como: análise de consistência de unidades de medida, verificação de singularidades do sistema e consistência das condições iniciais. O simulador EMSO incorpora alguns conceitos importantes da programação orientada a objetos (OOP), tais como composição e herança. A composição permite uma maior facilidade para combinar modelos existentes das maneiras mais variadas possíveis. Modelos que utilizam composição ficam mais enxutos e fáceis de manter. O

conceito de herança permite que modelos mais complexos sejam *derivados* de modelos simplificados já existentes. Isto é, modelos podem herdar as características de outros e ter como informação adicional suas peculiaridades. Estas funcionalidades ficarão melhor ilustradas quando forem apresentados os modelos de coluna.

## 2. MODELAGEM DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

A pesquisa acerca da modelagem de colunas de destilação não é mais uma novidade nos dias de hoje. Os primeiros trabalhos com metodologias propostas para a solução de sistemas de separação modelados prato a prato surgiram na década de 30. Só a partir da década de 50, com o advento do computador digital, foram realizados investimentos sólidos no desenvolvimento de novos algoritmos e simuladores. Apesar deste investimento, apenas modelos simplificados eram utilizados nas simulações devido à baixa capacidade de processamento. A partir da década de 70, os primeiros simuladores comerciais começaram a ser introduzidos na indústria e o desenvolvimento de modelos rigorosos não parou mais.

Um modelo dinâmico de coluna de destilação pode ser descrito por um conjunto acoplado de equações diferenciais e algébricas (*Differential-Algebraic Equations* - DAE) para cada estágio. As equações diferenciais representam os balanços de energia e os balanços de massa global e por componente. As equações algébricas são compostas por equações constitutivas como relações de equilíbrio líquido-vapor, restrição de composições, cálculo de propriedades físicas, etc. (ELGUE et al., 2004).

Além do modelo de estágio de equilíbrio, para o desenvolvimento de um modelo completo de coluna de destilação, diversos modelos de equipamentos periféricos são necessários. Exemplos destes equipamentos são: bomba, válvula, tanques, condensador e retervedor. Todos estes modelos foram desenvolvidos e

implementados, mas neste trabalho, apenas o modelo de estágio de equilíbrio e de uma configuração de coluna de destilação serão abordados.

### 3. MODELOS DESENVOLVIDOS

#### 3.1. Modelo de Estágio de Equilíbrio - Prato

O modelo de prato representa um estágio de equilíbrio de uma coluna de destilação. Existem diversas linhas de modelagem de um estágio, que são: modelos que consideram o equilíbrio termodinâmico entre a fase líquida e vapor, modelos baseados em taxas de transferência, modelos reduzidos e outros. Dentro da categoria de modelos rigorosos com consideração de equilíbrio termodinâmico entre as fases, o ponto de maior variação entre os modelos está nas equações relacionadas com a hidrodinâmica do prato, isto é, nas correlações para o cálculo das vazões internas dos pratos, perfis de pressão e outros detalhes hidráulicos.

A construção do modelo desenvolvido neste trabalho incluiu a consulta e análise de inúmeras fontes da literatura, utilizando como base o trabalho de Gani et al. (1986). Na Figura 1, pode ser visualizada uma representação esquemática de um prato com suas correntes de calor, alimentação, vapor e líquido.

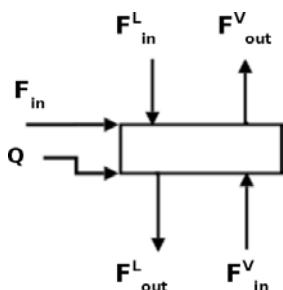


Figura 1 – Modelo esquemático de um prato.

Da Figura 1, pode-se identificar a simbologia utilizada no equacionamento. As vazões são representadas pela letra  $F$ , os sobrescritos  $L$  e  $V$  correspondem às fases líquida e vapor respectivamente e os subscritos

$in$  e  $out$  correspondem às correntes que entram e saem do prato.

Para modelar um prato com as correntes materiais e de energia representadas acima, considerando o equilíbrio termodinâmico entre as fases, o seguinte conjunto de equações foi utilizado:

Balanços e acúmulos:

$$\frac{dM_i}{dt} = F_{in}z_{in} + F_{in}^L x_{in_i} + F_{in}^V y_{in_i} - F_{out}^L x_{out_i} - F_{out}^V y_{out_i} \quad (1)$$

$$M_i = M^L x_{out_i} + M^V y_{out_i} \quad (2)$$

com  $i = 1, 2, \dots, c$ , onde  $c$  é o número de componentes na mistura,  $M$  é o acúmulo molar,  $z$  é a composição da alimentação e  $x$  e  $y$  são as composições do líquido e vapor.

$$\frac{dE}{dt} = F_{in}h_{in} + F_{in}^L h_{in}^L + F_{in}^V h_{in}^V - F_{out}^L h_{out}^L - F_{out}^V h_{out}^V + Q \quad (3)$$

$$E = M^L h_{out}^L + M^V h_{out}^V - P_{out}^L V_{prato} \quad (4)$$

Onde  $P$  é a pressão,  $V_{prato}$  é o volume do prato,  $h$  a entalpia da corrente e  $E$  a energia interna do sistema.

Equilíbrio químico, mecânico e térmico:

$$\hat{\phi}_i^L x_{out_i} = \hat{\phi}_i^V y_{eq_i} \quad (5)$$

$$P_{out}^L = P_{out}^V \quad (6)$$

$$T_{out}^L = T_{out}^V \quad (7)$$

Onde na Equação 5 a igualdade das fugacidades entre as fases líquida e vapor foi expressa em termos dos coeficientes de fugacidade  $\hat{\phi}_i^L$  e  $\hat{\phi}_i^V$  da espécie  $i$  na mistura, respectivamente.  $T$  representa a temperatura do prato e  $y_{eq_i}$  a composição do vapor determinada pelo equilíbrio químico.

É importante notar que, embora a Equação 5 envolva o coeficiente de fugacidade,

ela é geral o suficiente para tratar os casos onde modelos de atividade são utilizados (STAUDT, 2007). Para tratar a não idealidade do equilíbrio das fases, é inserida a Eficiência de Murphree  $E_{MV}$ :

$$E_{MV_i} = \frac{y_{out_i} - y_{in_i}}{y_{eq_i} - y_{in_i}} \quad (8)$$

Restrição geométrica e nível de líquido:

$$V_{prato} = M^L v^L + M^V v^V \quad (9)$$

$$Level = \frac{M^L v^L}{A_p} \quad (10)$$

Com  $v$  representando o volume molar das fases,  $Level$  o nível de líquido no prato e  $A_p$  a área do prato.

Vazões de líquido e vapor:

$$F^V = \frac{A_h}{v^V} \sqrt{\frac{(P_{in}^V - P_{out}^V)}{\alpha \rho^V}} \quad (11)$$

Onde  $\alpha$  é o coeficiente de queda de pressão no prato seco, utilizado como parâmetro de ajuste do modelo.  $A_h$  corresponde à área dos furos do prato e  $\rho^V$  à densidade do vapor.

$$F^L = \alpha_w l_w \frac{\left( \frac{(Level - \beta h_w)}{\beta} \right)^{3/2}}{v^L} \quad (12)$$

Onde  $l_w$  e  $h_w$  são o comprimento e a altura do vertedouro, respectivamente e  $\alpha_w$  e  $\beta$  são parâmetros de ajuste do modelo.

### 3.2. Modelo de Coluna de Destilação

Com os modelos dos acessórios e do estágio de equilíbrio, várias configurações de colunas podem ser montadas, de acordo com o equipamento real a ser modelado. Por exemplo, pode-se representar desde uma simples seção de coluna (Figura 2(a)) até uma coluna completa com condensador e refeedor

dinâmicos (Figura 2(b)) ou colunas com múltiplas alimentações e retiradas laterais.

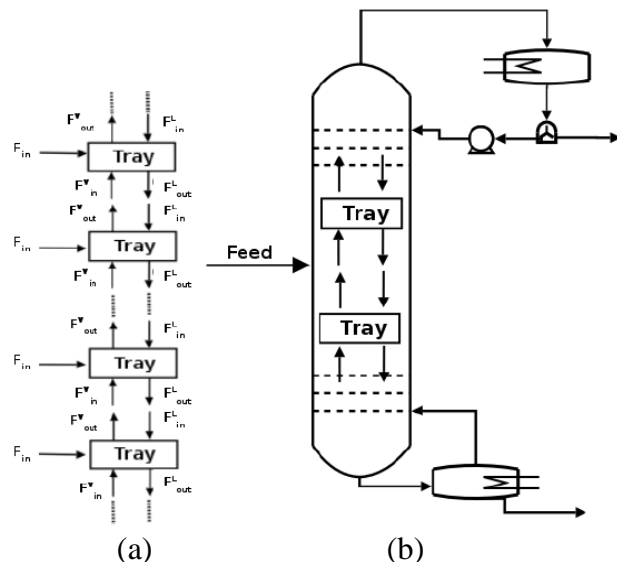


Figura 2 – Diferentes configurações de colunas de destilação. (a) Seção de coluna, (b) Coluna com condensador e refeedor dinâmicos.

O Código 1 corresponde a uma forma simplificada da implementação de uma seção de coluna, como a apresentada na Figura 2(a), na linguagem de modelagem do EMSO. O Código 2 corresponde à implementação de uma coluna de destilação como a apresentada na Figura 2(b).

Model Section\_Column

PARAMETERS

NTrays as Integer(Brief="Number of trays", Default=2);

VARIABLES

trays(NTrays) as tray;

CONNECTIONS

trays([2:NTrays]).OutletV to  
trays([1:NTrays-1]).InletV;

trays([1:NTrays-1]).OutletL to  
trays([2:NTrays]).InletL;

end

Código 1 – Modelo de seção de coluna de destilação implementado no EMSO.

Como pode ser visualizado no Código 1, a conexão entre os NTrays pratos da torre é realizada na seção CONNECTIONS. A vazão de vapor que deixa o prato inferior é conectada à

vazão de vapor que entra no prato superior, assim como a vazão de líquido que escoar do prato superior é ligada à vazão de líquido que entra no prato inferior. Com estas conexões, as vazões internas de uma seção de coluna ficam determinadas e o modelo representado pela Figura 2(a) é construído.

```
Model Distillation_kettle_cond

PARAMETERS
NTrays as Integer(Brief="Number of
    trays",Default=2);

VARIABLES
trays(NTrays) as tray;
cond as condenser;
reb as reboiler;
sptop as splitter;
pump1 as pump;

CONNECTIONS
#vapor
reb.OutletV to trays(NTrays).InletV;
trays([2: NTrays]).OutletV to
    trays([1: NTrays-1]).InletV;
trays(1).OutletV to cond.InletV;

#liquid
cond.OutletL to sptop.Inlet;
sptop.Outlet2 to pump1.Inlet;
pump1.Outlet to trays(1).InletL;
trays([1: NTrays-1]).OutletL to
    trays([2: NTrays]).InletL;
trays(bot).OutletL to reb.InletL;
end
```

Código 2 – Modelo de coluna de destilação com condensador e refeedor dinâmicos.

Para construir o modelo completo de uma coluna, isto é, com os demais acessórios, basta conectar as correntes da extremidade de uma seção aos equipamentos adicionais, como pode ser observado no Código 2.

Vale ressaltar que os modelos de coluna acima apresentados foram construídos com base no conceito de composição da programação orientada a objetos. Esta característica da linguagem fica evidente quando são declaradas como variáveis do modelo da coluna outros modelos básicos já existentes, como por exemplo, mostrado no Código 3.

```
VARIABLES
trays(NTrays) as tray;
cond as condenser;
reb as reboiler;
sptop as splitter;
pump1 as pump;
```

Código 3 – Exemplo de modelagem baseada em composição.

Utilizando esta técnica, podem ser construídas colunas de destilação de diversas configurações. Basta declarar, na seção de variáveis, diferentes tipos de condensadores, refeedores e tanques de acúmulo, que correspondem a modelos previamente implementados. Por exemplo, com os modelos básicos disponíveis na biblioteca do EMSO, pode-se montar facilmente uma torre com condensador e refeedor estacionários e tanques de acúmulo no topo e fundo. Basta descrever os equipamentos como no Código 4 e fazer as conexões adicionais requeridas.

```
VARIABLES
trays(NTrays) as tray;
cond as condenserSteady;
reb as reboilerSteady;
tbottom as tank;
ttop as tank_cylindrical;
spbottom as splitter;
sptop as splitter;
pump1 as pump;
```

Código 4 – Outro exemplo de modelagem baseada em composição.

A diferença entre os modelos está apenas nos tipos de acessórios das colunas e nas conexões entre as correntes internas da mesma.

#### 4. VALIDAÇÃO DO MODELO: COLUNA DEISOBUTANIZADORA

Depois do estudo teórico e da implementação dos modelos necessários, foi montado um modelo de coluna para representar uma unidade industrial real. Foi escolhida uma coluna deisobutanizadora que faz parte da unidade produtora de gasolina de aviação (UGAV) da Refinaria Presidente Bernardes de Cubatão (RPBC) da PETROBRAS.

A coluna em questão foi montada com a seguinte estrutura:

- 80 estágios de equilíbrio (igual ao número de pratos reais);
- 1 condensador com dinâmica;
- 1 refeedor estacionário;

- 1 tanque de armazenamento no fundo da torre;
- 2 separadores de corrente (*splitter*), para a corrente de produto de fundo e topo;
- 1 bomba na corrente de refluxo.

Também foram implementadas as seguintes estruturas de controle:

- Controle de nível do vaso de fundo da coluna através da manipulação da vazão do produto de fundo;
- Controle da temperatura do prato 68 da coluna manipulando a carga térmica do refeedor;
- Controle de pressão do condensador através da manipulação da carga térmica do condensador;
- Controle de nível do condensador pela manipulação da vazão do produto de topo.

Cabe lembrar que cada controlador presente no modelo também é apenas mais uma variável construída com base no conceito de composição.

Para a predição de propriedades termo-físicas da mistura simulada utilizou-se o pacote termodinâmico VRTherm (VRTECH, 2005). Foi selecionada a equação cúbica de estado de Peng-Robinson com regra de mistura clássica.

## 5. RESULTADOS

As simulações realizadas foram comparadas com a resposta de outros simuladores comerciais e também com dados reais de operação da coluna. Tanto o comportamento dinâmico como a resposta estacionária foram analisados, porém apenas os resultados da resposta dinâmica são apresentados a seguir.

### 5.1 Comparação com Simuladores Comerciais

Os resultados apresentados nas simulações com o simulador EMSO foram comparados com

resultados obtidos no simulador comercial Aspen Dynamics. Em ambos os simuladores realizou-se um teste onde foi imposto um degrau de 20% na vazão de alimentação da coluna e foram simulados 600 minutos de operação. Os resultados das predições obtidos com as duas ferramentas foram muito similares, com diferenças menores que 1%. Entretanto, o simulador EMSO foi muito mais eficiente na geração dos resultados. Enquanto o EMSO realizou a simulação em 106 segundos, o simulador da Aspen levou 4500 segundos (ambos os testes em um Pentium IV 2.8 GHz). Ou seja, o Aspen Dynamics foi 42 vezes mais lento na resolução do mesmo problema.

### 5.2 Validação do Modelo

Com o modelo e seus parâmetros ajustados, foram realizadas várias simulações para averiguar se o comportamento dinâmico do modelo se assemelha ao comportamento da planta. Para esta verificação foram utilizados dados de um experimento com mais de 8 dias de duração. Neste experimento, variações simultâneas na vazão de alimentação, sua composição e na vazão de refluxo foram executadas. Além destas perturbações, a temperatura do prato 68, que é controlada pelo calor fornecido no refeedor, sofreu variações no seu set-point. As perturbações na vazão de refluxo são apresentadas na Figura 3, onde se observa um elevado ruído na medida desta variável, principalmente para vazões mais baixas. Nas simulações foram considerados seus valores médios.

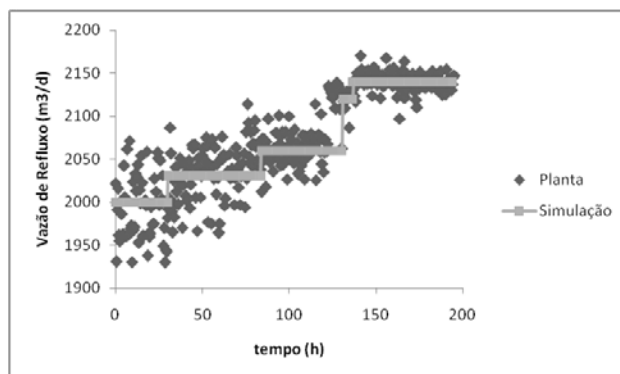


Figura 3 – Perturbações na vazão de refluxo.

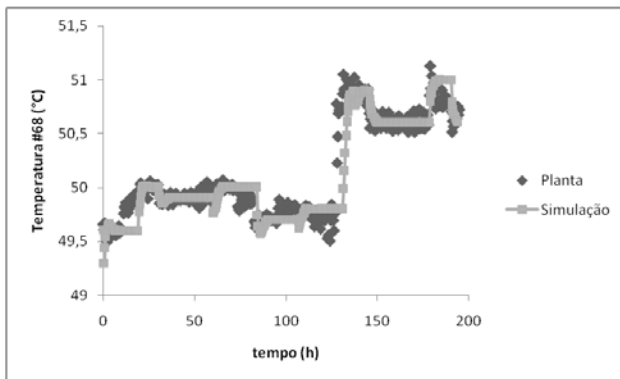


Figura 4 – Temperatura do prato 68 ao longo da simulação.

Na Figura 4 são apresentadas as respostas do controlador de temperatura do prato 68 frente às variações no seu set-point, mostrando que o controlador simulado representou bem a dinâmica do controlador da planta.

Foram observadas as variações e tendências das temperaturas do topo e fundo da coluna, a pressão do topo e a vazão do produto do fundo durante a simulação. Os resultados são apresentados em gráficos das variações destas grandezas ao longo da simulação juntamente com as variações medidas na planta, tomando como referência o valor inicial destas variáveis. Estes resultados estão nas Figuras 5 a 8.



Figura 5 – Vazão de produto de fundo ao longo da simulação.

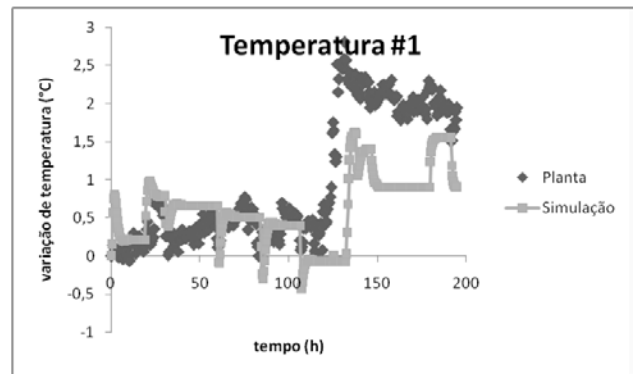


Figura 6 – Temperatura do prato de fundo ao longo da simulação.

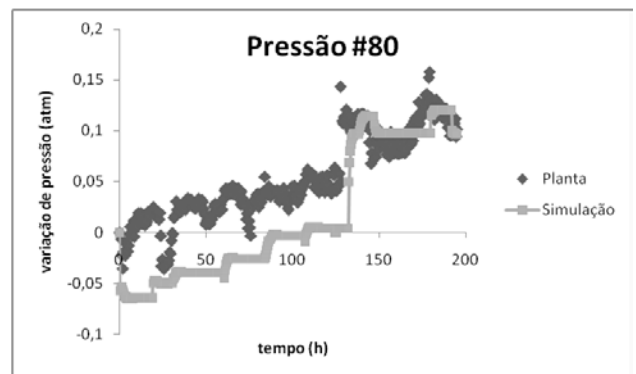


Figura 7 – Pressão no prato do topo ao longo da simulação.

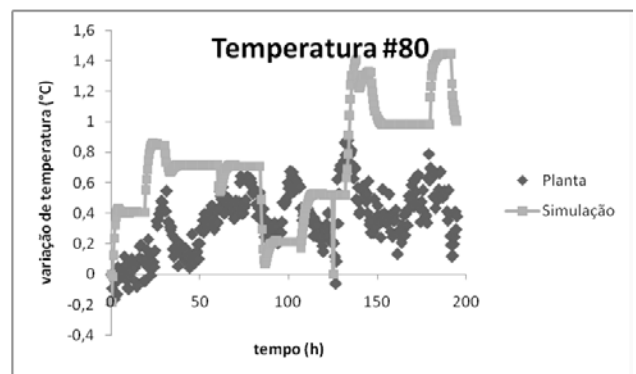


Figura 8 – Temperatura do prato de topo.

Pode-se perceber que a maior discrepância entre o modelo e a planta ocorreu na temperatura do topo da coluna (Figura 8). Provavelmente, a causa está em alguma perturbação não-medida e na simplificação da modelagem do topo e de sua estrutura de controle que originalmente é realizada através de um *hot bypass* (onde parte do vapor que sai do topo da coluna não passa pelo condensador, indo direto para o vaso de acúmulo, e a quantidade de vapor

injetada diretamente neste vaso controla a sua pressão). Além disso, a condição inicial do experimento foi considerada como sendo um ponto estacionário de operação, o que provavelmente não é verdade. Sendo assim, o modelo e a unidade real não partem com o mesmo histórico de operação, o que atrapalha o desempenho do modelo. Mesmo assim, as diferenças foram pequenas e pode-se dizer que o modelo representa bem o comportamento dinâmico da unidade real.

Estudos de partida de coluna de destilação também foram realizados com os modelos desenvolvidos, mostrando o desempenho de diferentes procedimentos de partida (STAUDT et al., 2007).

## 6. CONCLUSÕES

Na linha da modelagem baseada no equilíbrio termodinâmico entre as fases líquida e vapor, foram desenvolvidos diversos modelos de equipamentos básicos (estágio de equilíbrio, bomba, trocador de calor, etc.). Esses modelos foram implementados no simulador dinâmico de processos EMSO utilizando seu ambiente de modelagem e sua linguagem própria. Utilizando este conjunto básico de modelos e o conceito de composição presente no simulador EMSO foi possível a construção de diversas configurações de colunas de destilação. Para fins de demonstração apenas uma das possíveis configurações foi apresentada neste trabalho.

Para a validação dos modelos desenvolvidos foram utilizados dados de operação de uma coluna deisobutanizadora da PETROBRAS composta de 80 pratos que separa isobutano de uma mistura de 13 componentes. O comportamento dinâmico da unidade foi comparado com dados de planta. O problema gerou um sistema de mais de 6300 equações. Um período de 8 dias de operação com várias perturbações na carga e no refluxo da coluna foi simulado e não levou mais de 19 minutos, utilizando-se um computador Pentium IV 2.8 GHz. Conclui-se com isto, que este modelo pode ser aplicado para os mais diversos

fins, desde simulações de procedimentos de parada e partida de unidades, até estimações, otimizações e treinamento de operação.

## 7. REFERÊNCIAS

- ELGUE, S.; PRAT, L.; CABASSUD, M.; LANN, J. L.; CÉZERAC, J. Dynamic Models for Start-Up Operations of Batch Distillation Columns With Experimental Validation. *Comp. and Chem. Eng.*, v. 28, p. 2735–2747, 2004.
- GANI, R.; RUIZ, C. A.; CAMERON, I. T. A Generalized Model for Distillation Columns - I - Model Description and Applications. *Comp. and Chem. Eng.*, v. 10, n. 3, p. 181–198, 1986.
- KOEIJER, G. M. de; KJELSTRUP, S. Application of Irreversible Thermodynamics to Distillation. *Int. J. of Thermodynamics*, v. 7, n. 3, p. 107–114, September 2004.
- SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Emso: A New Environment for Modelling, Simulation, and Optimisation. *In: ESCAPE 13th. [S.l.]*: Elsevier Science Publishers, 2003. v. 1, p. 947–952.
- STAUDT, P. B. Modelagem e Simulação Dinâmica de Colunas de Destilação. Dissertação de Mestrado, PPGEQ/UFRGS, Porto Alegre, RS, 2007.
- STAUDT, P. B.; SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. Dynamic Simulation of Reactive Distillation Processes to Predict Start-Up Behavior. In Proceedings of the 8th International IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS 2007), Cancún, México, vol. 2, 285-290, 2007.
- VRTECH, VRTherm: A Software to Predict Thermodynamic and Physical Properties of Complex Mixtures and Pure Substances. <http://www.vrtech.com.br>, 2005.