

## MODELAGEM DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO BATELADA PARA IMPLEMENTAÇÃO NO SIMULADOR EMSO

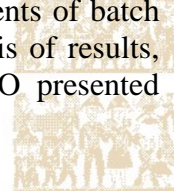
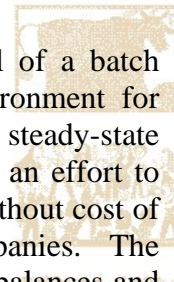
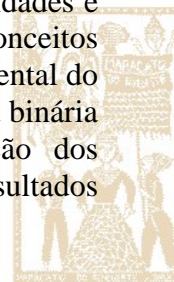
G. S. Straatmann<sup>1</sup>; M. C. Maciel; A. R. Secchi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Engenharia Química – Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Campus Central, 12104 – CEP: 90040-040 – Porto Alegre – RS – Brasil  
Telefone: (51) 3308-4165 – Fax: (51) 3308-3277 – Email: {legaby,arge}@enq.ufrgs.br

**RESUMO** – O presente trabalho tem como objetivo construir e validar experimentalmente um modelo para uma coluna de destilação em batelada para ser implementado na biblioteca de modelos do simulador EMSO (*Environment for Modeling, Simulation, and Optimization*). EMSO é um simulador e otimizador de processos, estacionário e dinâmico, desenvolvido e mantido pelo Projeto ALSOC, que é um esforço de aproximação universidade-indústria através da padronização e distribuição sem custo de especificações e ferramentas de software entre universidades e empresas consorciadas. O modelo fenomenológico foi construído utilizando os conceitos de balanço de massa, energia e equilíbrio termodinâmico. Para validação experimental do modelo, foram realizados experimentos de destilação em batelada de uma mistura binária de etanol e água. Pela análise dos resultados, conclui-se que a simulação dos experimentos utilizando o modelo implementado no EMSO apresentou resultados satisfatórios e condizentes com os dados experimentais.

**PALAVRAS-CHAVE:** EMSO, modelagem, destilação batelada

**ABSTRACT** – This work aims to build and validate experimentally a model of a batch distillation column for implementation in the model library of EMSO (*Environment for Modeling, Simulation, and Optimization*). EMSO is a simulator and optimizer for steady-state and dynamic simulations, developed and kept by the ALSOC Project, which is an effort to bring together university-industry through the standardization and distribution without cost of specifications and software tools among universities and partner companies. The phenomenological model was developed using the concepts of mass and energy balances and thermodynamic equilibrium. For experimental validation of the model, experiments of batch distillation with a binary mixture water/ethanol were carried out. By the analysis of results, the conclusion is that the simulation using the model implemented on EMSO presented satisfactory results in agreement with the experimental data.



## 1. INTRODUÇÃO

A destilação em batelada é muito utilizada na indústria de processos químicos quando há uma pequena quantidade de material a ser processada ou quando uma flexibilidade operacional é necessária. O aparato de destilação batelada consiste em uma coluna, um condensador e um refeedor. Uma vez alimentado o vaso refeedor com a carga inicial, nada mais é adicionado de material. A operação é dividida em duas etapas: (1) *start-up* e (2) produção de destilado. Cada massa diferencial de vapor está em equilíbrio com o líquido restante. A composição da massa líquida modifica-se com o tempo, pois o vapor formado é sempre mais rico no componente mais volátil. A produção em batelada é geralmente realizada em equipamentos relativamente padronizados, que podem ser facilmente adaptados e, se necessário, reconfigurados para produção dos mais diversos produtos. É particularmente apropriada para baixos volumes processados, para bioprocessos e para produtos de elevado valor agregado, como farmacêuticos e polímeros. A flexibilidade dos arranjos de produção pode também lidar com as flutuações ou mudanças rápidas de demanda, que é uma característica frequentemente encontrada nestes tipos de produtos. Onde pequenas quantidades de diferentes produtos devem ser produzidas, é economicamente mais eficiente manufaturá-los em uma planta em batelada de múltiplos propósitos, do que operar uma planta por produto. Outros fatores vantajosos para processos batelada são aumento da competição global no setor químico; necessidade de produzir produtos específicos para os clientes; demandas sazonais de determinados produtos (SHAH apud MUJTABA, 2004).

Inserido neste contexto, este trabalho visa à implementação de um modelo fenomenológico de uma coluna de destilação em batelada no simulador EMSO (SOARES e SECCHI, 2003). O EMSO é um simulador e otimizador estacionário e dinâmico de

processos e o modelo fenomenológico foi implementado utilizando ferramentas de modelagem orientada a objetos, disponíveis no simulador.

## 2. MODELAGEM

Na destilação batelada, há dois modos de operação: (1) refluxo constante e composição do produto variável, e (2) refluxo variável e composição do produto constante. O comportamento destas colunas pode ser analisado ou por métodos de cálculos rigorosos estágio por estágio ou por métodos simplificados considerando *holdups* negligenciáveis e fluxos molares constantes (KIM, 2003).

Neste trabalho foi construído um modelo fenomenológico utilizando os conceitos de balanço de massa, energia e equilíbrio termodinâmico. As principais considerações do modelo são: (i) mistura perfeita entre as fases e (ii) fluxos molares constantes.

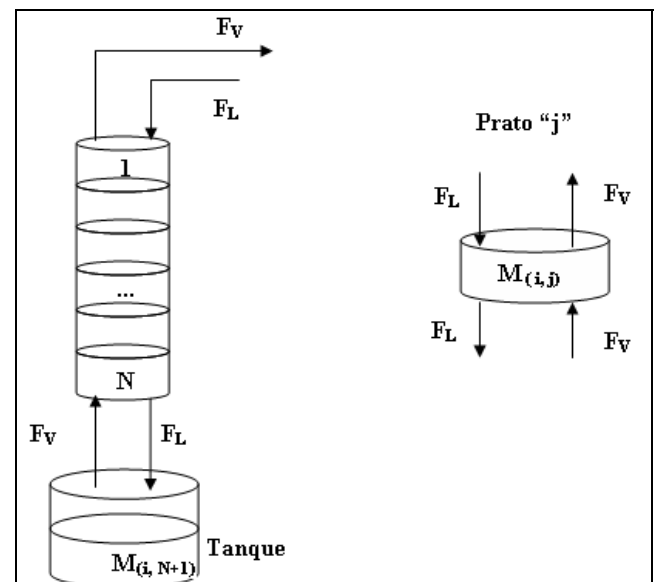


Figura 1 – Representação esquemática da coluna de destilação batelada.

A Figura 1 apresenta uma representação esquemática de uma coluna de destilação batelada, onde:

$M_{(i,j)}$  – Número de moles remanescentes do componente  $i$  no estágio  $j$

$F_V$  – Vazão molar de vapor

$F_L$  – Vazão molar de líquido

Sub-índices:

$L$  – corrente líquida

$V$  – corrente vapor

$i = 1, 2, \dots, NComp$   
onde  $NComp$  = Número de Componentes

$j = 1, 2, \dots, N$   
onde  $N$  = Número de Pratos

$j = 0$  (corrente de entrada de líquido no estágio 1)

$j = N + 1$  (tanque de fundo)

## 2.1 Modelagem do Processo

Vazões Molares constantes:

$$F_{L(0)} = F_{L(j)} = F_L \quad (1)$$

$$F_{V(N+1)} = F_{V(j)} = F_V \quad (2)$$

Balço de Massa por Componente:

Tanque:

$$\frac{dM_{(i,N+1)}}{dt} = F_L z_{L(i,N)} - F_V z_{V(i,N+1)} \quad (3)$$

Pratos:

$$\frac{dM_{(i,j)}}{dt} = F_L z_{L(i,j-1)} + F_V z_{V(i,j+1)} - F_L z_{L(i,j)} - F_V z_{V(i,j)} \quad (4)$$

Balço de Energia:

Tanque:

$$\frac{dE_{(N+1)}}{dt} = F_L h_{L(N)} - F_V h_{V(N+1)} + Q_{(N+1)} \quad (5)$$

Pratos:

$$\frac{dE_{(j)}}{dt} = F_L h_{L(j-1)} + F_V h_{V(j+1)} - F_L h_{L(j)} - F_V h_{V(j)} + Q_{(j)} \quad (6)$$

Acúmulo de Massa por Componente:

Tanque:

$$M_{(i,N+1)} = M_{L(N+1)} z_{L(i,N+1)} + M_{V(N+1)} z_{V(i,N+1)} \quad (7)$$

onde  $z_{(i,N+1)}$  é a fração molar do componente  $i$  no líquido e no vapor.

Pratos:

$$M_{(i,j)} = M_{L(j)} z_{L(i,j)} + M_{V(j)} z_{V(i,j)} \quad (8)$$

Acúmulo de Energia:

Tanque:

$$E_{(N+1)} = M_{L(N+1)} h_{L(N+1)} + M_{V(N+1)} h_{V(N+1)} - P_{L(N+1)} V_{(N+1)} \quad (9)$$

onde  $h_{(N+1)}$  é a entalpia molar do líquido acumulado.

Pratos:

$$E_{(j)} = M_{L(j)} h_{L(j)} + M_{V(j)} h_{V(j)} - P_{L(j)} V_{(j)} \quad (10)$$

Restrição de fração molar:

Tanque:

$$\sum_{i=1}^{NComp} z_{L(i,N+1)} = 1 \quad (11)$$

$$\sum_{i=1}^{NComp} z_{L(i,N+1)} = \sum_{i=1}^{NComp} z_{V(i,N+1)} \quad (12)$$

Pratos:

$$\sum_{i=1}^{NComp} z_{L(i,j)} = 1 \quad (13)$$

$$\sum_{i=1}^{NComp} z_{L(i,j)} = \sum_{i=1}^{NComp} z_{V(i,j)} \quad (14)$$

Volume de Líquido:

Tanque:

$$vol_{L(N+1)} = f(T_{L(N+1)}, P_{L(N+1)}, z_{L(N+1)}) \quad (15)$$

Pratos:

$$vol_{L(j)} = f(T_{L(j)}, P_{L(j)}, z_{L(j)}) \quad (16)$$

Volume de Vapor:

Tanque:

$$vol_{V(N+1)} = f(T_{V(N+1)}, P_{V(N+1)}, z_{V(N+1)}) \quad (17)$$

Pratos:

$$vol_{V(j)} = f(T_{V(j)}, P_{V(j)}, z_{V(j)}) \quad (18)$$

Equilíbrio Químico:

Tanque:

$$\hat{\Phi}_{L(i,N+1)} z_{L(i,N+1)} = \hat{\Phi}_{V(i,N+1)} z_{V(i,N+1)} \quad (19)$$

onde  $\hat{\Phi}_{L(i,N+1)}$  é o coeficiente de fugacidade do componente  $i$  no líquido acumulado.

$$\hat{\Phi}_{L(i,N+1)} = f(T_{L(N+1)}, P_{L(N+1)}, z_{L(i,N+1)}) \quad (20)$$

$$\hat{\Phi}_{V(i,N+1)} = f(T_{V(N+1)}, P_{V(N+1)}, z_{V(i,N+1)}) \quad (21)$$

Pratos:

$$\hat{\Phi}_{L(i,j)} z_{L(i,j)} = \hat{\Phi}_{V(i,j)} z_{V(i,j)} \quad (22)$$

$$\hat{\Phi}_{L(i,j)} = f(T_{L(j)}, P_{L(j)}, z_{L(i,j)}) \quad (23)$$

$$\hat{\Phi}_{V(i,j)} = f(T_{V(j)}, P_{V(j)}, z_{V(i,j)}) \quad (24)$$

Eficiência de Murphree:

$$E_{MV(i,j)} = \frac{z_{V(i,j)} - z_{V(i,j+1)}}{z_{V(i,j)}^* - z_{V(i,j+1)}} \quad (25)$$

onde  $z_{V(i,j)}^*$  é a concentração da fase vapor em equilíbrio com a fase líquida.

Equilíbrio Mecânico:

Tanque:

$$P_{L(N+1)} = P_{V(N+1)} \quad (26)$$

Pratos:

$$P_{L(j)} = P_{V(j)} \quad (27)$$

Equilíbrio Térmico:

Tanque:

$$T_{L(N+1)} = T_{V(N+1)} \quad (28)$$

Pratos:

$$T_{L(j)} = T_{V(j)} \quad (29)$$

Volumes:

Tanque:

$$V_{(N+1)} = M_{L(N+1)} vol_{L(N+1)} + M_{V(N+1)} vol_{V(N+1)} \quad (30)$$

Pratos:

$$V_{(j)} = M_{L(j)} \text{vol}_{L(j)} + M_{V(j)} \text{vol}_{V(j)} \quad (31)$$

Níveis de líquido:

Tanque:

$$\text{Level}_{(N+1)} = \frac{M_{L(N+1)} \text{vol}_{L(N+1)}}{A_{\text{cross}(N+1)}} \quad (32)$$

Pratos:

$$\text{Level}_{(j)} = \frac{M_{L(j)} \text{vol}_{L(j)}}{A_{\text{cross}(j)}} \quad (33)$$

Entalpias:

Tanque:

$$h_{L(N+1)} = f(T_{L(N+1)}, P_{L(N+1)}, z_{L(N+1)}) \quad (34)$$

$$h_{V(N+1)} = f(T_{V(N+1)}, P_{V(N+1)}, z_{V(N+1)}) \quad (35)$$

Pratos:

$$h_{L(j)} = f(T_{L(j)}, P_{L(j)}, z_{L(j)}) \quad (36)$$

$$h_{V(j)} = f(T_{V(j)}, P_{V(j)}, z_{V(j)}) \quad (37)$$

As equações (15), (16), (17), (18), (20), (21), (23), (24), (34), (35), (36) e (37) utilizam rotinas externas do pacote termodinâmico selecionado pelo usuário do modelo.

### 3. UTILIZAÇÃO DO MODELO E VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL

Foi realizado um experimento de destilação batelada com coluna recheada segundo a Figura 2.

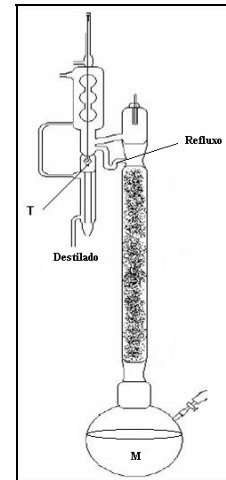


Figura 2 – Aparato experimental de destilação batelada com coluna recheada (Salomone, 1998).

A coluna utilizada possui um diâmetro nominal de 4 cm com jaqueta externa à vácuo  $10^{-6}$  torr com recheio randômico de anéis de Raschig de vidro com tamanho de 4x4 mm e nas camadas de fundo e topo de 6x6 mm e 8x8 mm, respectivamente.

Existem dois enfoques básicos para modelagem das torres recheadas. No primeiro, que foi utilizado neste trabalho, se faz uma analogia com equipamentos em estágios. Este enfoque foi utilizado por Holland et alii (HOLLAND apud CALDAS et al., 2003) e, mais tarde, estendido e aplicado por Krishnamurty e Taylor (KRISHMAMURTY apud CALDAS et al, 2003). No outro enfoque, o desempenho do equipamento de contato contínuo é simulado através de balanços de massa e energia no elemento diferencial de volume da torre (CALDAS et al., 2003).

Foram destiladas soluções binárias de etanol (A) e água (B), onde a composição do destilado e as temperaturas do refeedor e do condensador foram acompanhadas ao longo do tempo. Foram feitos dois experimentos para cada mistura. A composição das misturas foi analisada por índice de refração.

Tabela 1 – Parâmetros utilizados nos experimentos.

Volume de solução	3,5 L
Razão de Refluxo	3
Queda de Pressão	4 mm H <sub>2</sub> O
Fração Molar de Etanol na Mistura 1 (4% v/v)	0,0127
Fração Molar de Etanol na Mistura 2 (6% v/v)	0,0193

### 3.1 Utilização do modelo

Utilizou-se taxa de aquecimento (Q) constante no tanque e nula nos pratos. Visando manter a pressão constante, um controlador PID foi introduzido para controlar a pressão manipulando o fluxo molar de saída de vapor do primeiro estágio (taxa de vaporização).

Para comparar os resultados de simulação com os dados experimentais, partiu-se das seguintes condições iniciais: (i) tanque e coluna frios (28°C), (ii) alta concentração de etanol nos pratos (fração molar de etanol de 0,90) e (iii) quantidade inicial de líquido muito pequena.

A maior dificuldade em reproduzir as condições experimentais está no ajuste do número de estágios e na taxa de vaporização. Desta forma, foi feito um ajuste simultâneo destes parâmetros. A taxa de vaporização é calculada pelo controlador PID que visa manter a pressão próxima das condições reais de destilação de 1 atm. As variáveis do destilado (composição e pressão de saída de 1 atm) foram atingidas pelo ajuste do número de estágios de equilíbrio, considerando eficiência de Murphree igual a um. O melhor ajuste atingido foi: 4 estágios de equilíbrio, taxa de aquecimento de 215 W e taxa de vaporização de 60 mol/h.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As Figuras 3 e 4, a seguir, ilustram o comportamento da temperatura no condensador

ao longo dos experimentos 1 e 2 para a mistura 1 (etanol 4% em volume) e para a mistura 2 (etanol 6% em volume), respectivamente e, também, os resultados obtidos pela simulação.

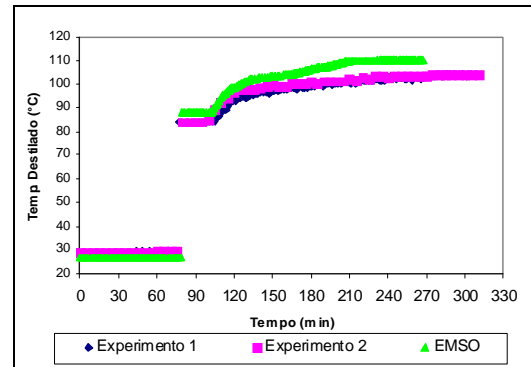


Figura 3 – Dados experimentais e simulados do comportamento da temperatura no condensador para uma mistura 4% (v/v) de etanol.

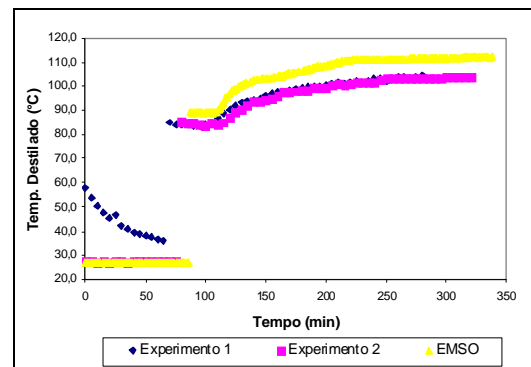


Figura 4 – Dados experimentais e simulados do comportamento da temperatura no condensador para uma mistura 6% (v/v) de etanol.

Assim como para a mistura com concentração inicial de 4%, os dados experimentais da destilação da mistura de 6% e os dados obtidos com o EMSO apresentaram boa concordância de comportamento. A primeira fração de vapor atinge o sensor de temperatura do condensador no tempo de 74 minutos para a solução de 4 % e 78 minutos para a solução a 6 %. Na simulação, a destilação se inicia no tempo de 78 minutos e 81 minutos, respectivamente, mostrando uma boa concordância dos dados experimentais com o modelo.



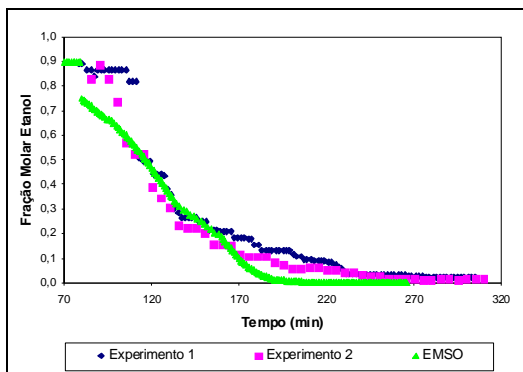


Figura 5 – Dados experimentais e simulados do comportamento da fração molar de etanol no destilado para uma mistura 4% (v/v) de etanol.

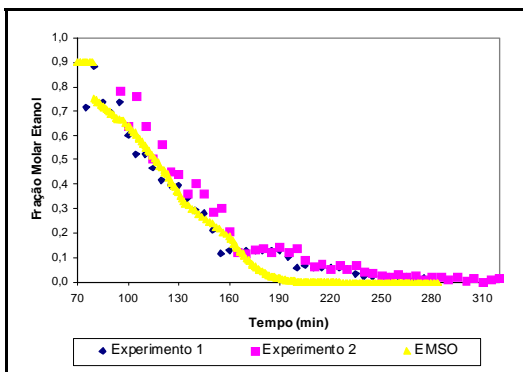


Figura 6 – Dados experimentais e simulados do comportamento da fração molar de etanol no destilado para uma mistura 6% (v/v) de etanol.

Como era esperado, nas Figuras 5 e 6 observa-se que inicialmente o destilado está altamente concentrado em etanol e à medida que a destilação prossegue a fração de água no destilado vai aumentando. O aumento da concentração de água no destilado é percebido, também, analisando o comportamento da temperatura ao longo da destilação. Quando a fração de água começa a aumentar, a temperatura acompanha este aumento, já que a temperatura de ebulição da água é maior do que a do etanol. O modelo implementado no EMSO acompanha também esta tendência.

Percebe-se que, comparando as destilações com 4 e 6% de etanol em volume, esta última apresentou uma maior diferença entre o modelo fenomenológico e os dados experimentais. A variação de temperatura inicial do Experimento

1 da mistura a 6%, deve-se ao fato de ela ter sido realizada em seqüência de outra destilação, partindo assim de uma condição de temperatura inicial mais alta. Na simulação decidiu-se partir com a coluna fria, já que o modelo prevê estágios de equilíbrio adiabáticos. Este fato não interfere nos resultados comparativos já que na simulação as quantidades molares presentes em cada estágio são muito pequenas comparadas com os fluxos molares presentes na coluna.

Na Figura 7 pode ser observado o perfil de temperatura da coluna obtido com a simulação no EMSO. O estágio 1 representa o topo da coluna e o estágio 5 representa o tanque de fundo. Percebe-se que o perfil de temperatura está coerente com o que era esperado em colunas de retificação típicas.

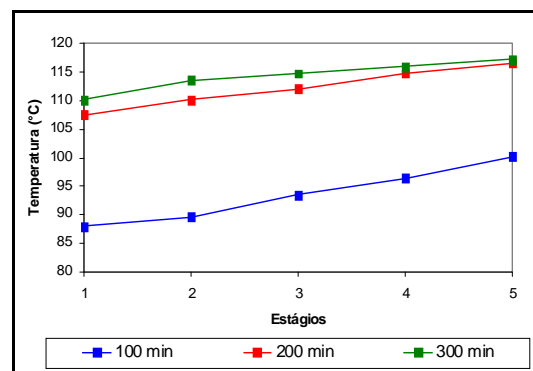


Figura 7 – Perfil de temperatura ao longo da coluna em três tempos diferentes de simulação.

## 5. CONCLUSÕES

O simulador EMSO se mostrou uma ferramenta simples e clara de modelagem de processos. A padronização e distribuição sem custo de ferramentas de software entre universidades e empresas consorciadas, faz do projeto ALSOC um caminho de aproximação entre universidades e empresas, que vem trazendo benefícios para todas as partes envolvidas.

Pela a análise dos resultados, conclui-se que a simulação das condições experimentais utilizando o modelo implementado no EMSO apresentou resultados satisfatórios e condizentes

com os resultados experimentais. Os resultados da simulação, comparados com a destilação em batelada de duas misturas diferentes, validam o modelo como representativo do equipamento utilizado no experimento.

A maior dificuldade em reproduzir na simulação as condições experimentais é o ajuste do número de estágios, da taxa de aquecimento e da taxa de vaporização. Outros ajustes necessários são os parâmetros do controlador de pressão introduzido ao processo para manter a pressão sob condições reais de destilação, ou seja, sem este o ajuste da pressão com a taxa de vaporização é muito difícil, já que se trata de um processo dinâmico onde ocorrem variações de composição e temperatura ao longo do processo.

Como sugestão de continuidade deste trabalho, cita-se a implementação de modelos rigorosos levando em consideração a hidráulica de pratos e a implementação de outros modos de partida da coluna, como a partida com refluxo total até condições estacionárias e posterior fase de produção.

## **6. REFERÊNCIAS**

CALDAS, J. N.; LACERDA, A. I.; Veloso, E.; Paschoal, L. C. M.; Internos de Torres. *Pratos e Recheios*. 1ª edição. Ed. UERJ. Rio de Janeiro, 2003.

MUJTABA, I. M.. Batch Distillation. *Design and Operation*. 1ª edição. Imperial College. 2004.

COSTA Jr, E. F., VIEIRA, R. C. ; SECCHI, A. R.; BISCAIA Jr., E. C.; *Dynamic Simulation of high-index models of batch distillation processes*, Latin American Applied Research, nº 33, 155-160. 2003.

KIM, J. K.; JU, D. P.. Multicomponent Batch Distillation with Distillate Receiver. Korean J. Chem. Eng. N°20(3), 522-527. 2003.

SALOMONE, U. V.; Multicomponent Batch Distillation. Latin American Applied Research, nº 35, 125-131. 2003.