

**Unicamp – Universidade Estadual de Campinas
Faculdade de Engenharia Química**

**Área de Concentração
Sistemas de Processos Químicos e Informática**

**Análise Termodinâmica de Colunas de
Destilação Visando à Otimização Energética**

Autora: Luciana Saliba Moussa

Orientador: Prof. Dr. Roger Josef Zemp

**Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia
Química - UNICAMP, como parte dos requisitos
exigidos para a obtenção do título de Mestre em
Engenharia Química.**

**Agosto/2001
Campinas - SP**

**UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE**

**UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL**

NIDADE 32
2 CHAMADA T/UNICAMP
M867a
EX
OMBO BCI 49628
ROC 16-837102
Dx
REÇO R\$ 11,00
DATA 14/06/02
1º CPD _____

CM00169418-7

BIB ID 245757

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

M867a Moussa, Luciana Saliba
Análise termodinâmica de colunas de destilação
visando à otimização energética / Luciana Saliba Moussa
--Campinas, SP: [s.n.], 2001.

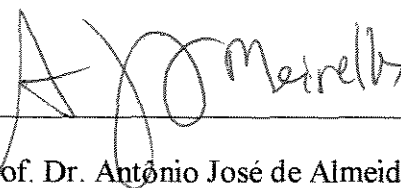
Orientador: Roger Josef Zemp.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
Campinas, Faculdade de Química.

1. Termodinâmica. 2. Destilação. I. Zemp, Roger
Josef. II. Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida e aprovada em 08 de outubro de 2001, pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Roger Josef Zemp
Orientador



Prof. Dr. Antônio José de Almeida Meirelles



Profª. Dra. Teresa Massako Kakuta Ravagnani

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Luciana Saliba Moussa e aprovada pela comissão julgadora em 8 de outubro de 2001.



Prof. Dr. Roger Josef Zemp

Se podes imaginar, podes conseguir!
Albert Einsten

Agradecimentos

Agradeço a estes familiares Boutros, Gilsa, Kássia, Wanda, Maria José, Odilon, Maria Arlete, Gilsa Helena, Boutros Júnior, Ivo e Hasna pelo carinho e compreensão em todos os momentos desta fase.

Aos ensinamentos, as sugestões e dedicação do meu orientador prof. Roger que esteve sempre presente nesta empreitada.

A todos os amigos do DESQ tenho muito a agradecer e que me proporcionaram bons momentos e sempre presentes com alguma dica.

Meu agradecimento especial pela amizade do Marcone, Marta, Joseane, Célia, Luciana Cristina, Andréia, Juliana e Lurdinha.

A FAPESP pelo apoio financeiro durante o desenvolvimento deste trabalho.

Sumário

Resumo	xiii
Abstract	xv
Nomenclatura	xviii
Capítulo 1. Introdução	01
1.1. Otimização de Colunas Isoladas	01
1.1.1. Redução de Refluxo Numa Coluna	02
1.1.2. Métodos Matemáticos	03
1.1.3. Métodos <i>Short-Cut</i>	03
1.1.4. Métodos Heurísticos	06
1.1.5. Métodos Termodinâmicos	06
1.2. Trabalhos Recentes	10
1.3. Conclusões e Proposta de Trabalho	12
1.3.1. Divisão do Trabalho	13
 Capítulo 2. Perfil Reversível de Uma Coluna	 15
2.1. Introdução	15
2.1.1. Uso da Grande Curva Composta em Processos Químicos	15
2.2. Condição Mínima Termodinâmica	20
2.3. Modelagem Matemática do Perfil Reversível	23
2.4. Uso da CGGG na Otimização de Colunas de Destilação	28
2.4.1. Posição da Alimentação	29
2.4.2. Aumento do Numero de Estágios	29
2.4.3. Condição Térmica da Alimentação	30
2.4.4. Alocação de Trocadores Intermediários de Calor	31
2.4.5. Procedimento de Análise Adotado	32
2.5. Sistema Benzeno-Tolueno	33
2.5.1. Sistema Equimolar Benzeno-Tolueno (0,5/0,5)	34
2.5.2. Sistema Não-Equimolar Benzeno-Tolueno (0,25/0,75)	35
2.5.3. Sistema Não-Equimolar Benzeno-Tolueno (0,75/0,25)	37
2.6. Sistema Não-Equimolar Propeno-Propano (0,6/0,4)	38
2.6.1. Coluna Inicial	39
2.6.2. Análise	40
2.7. Sistema Multicomponentes	41
2.7.1. Coluna Inicial	41
2.7.2. Análise	42
2.7.3.. Observação	43
2.8. Comentários e Conclusões	45

Capítulo 3. Perfil de Perdas de Exergia	47
3.1 Introdução	47
3.1.1. Conceito de Exergia	48
3.2. Balanço de Exergia Numa Coluna	49
3.2.1. Modelagem Matemática do Perfil de Perdas de Exergia	50
3.3. Uso do Perfil de Perdas de Exergia na Otimização de Colunas	55
3.3.1. Posição da Alimentação	56
3.3.2. Aumento do Numero de Estágios	57
3.3.3. Condição Térmica da Alimentação	57
3.3.4. Alocação de Trocadores de Calor	58
3.4. Sistema Benzeno-Tolueno	60
3.4.1. Sistema Equimolar Benzeno-Tolueno (0,5/0,5)	62
3.4.2. Sistema Não-Equimolar Benzeno-Tolueno (0,35/0,75)	62
3.3.3. Sistema Não-Equimolar Benzeno-Tolueno (0,75/0,35)	61
3.5. Sistema Não-Equimolar Propeno-Propano (0,6/0,4)	65
3.5.2. Analise	65
3.6. Sistema Multicomponentes	68
3.7. Comentários e Conclusões	71
 Capítulo 4. Análise Comparativa Entre Os Perfis	 73
4.1 Introdução	73
4.2. Comparação Entre o Perfil Reversível e o Perfil de Perdas de Exergia	73
4.2.1. Sistema Benzeno-Tolueno (0,5/0,5)	74
4.2.2. Sistema Benzeno-Tolueno (0,35/0,75)	75
4.2.3. Sistema Benzeno-Tolueno (0,75/0,35)	76
4.2.4. Sistema Propeno-Propano (0,6/0,4)	77
4.2.5. Sistema Multicomponentes	78
4.3. Comentários e Conclusões	80
 Capítulo 5. Nova Metodologia	 81
5.1 Introdução	81
5.2. Sistema Benzeno, Tolueno e Orto-Xileno	81
5.2.1. Analise	81
5.3. Nova Proposta	87
5.3.1. Análise	89
5.1 Comentários e Conclusões	92
 Capítulo 6. Conclusões e Sugestões	 93
6.1. Sugestões Para Trabalhos Futuros	94
 Referências Bibliográficas	 95

Resumo

O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma metodologia utilizando a análise energética e a análise exérgica aplicadas em colunas de destilação e convergindo-as para um procedimento combinado, para uma redução do uso de energia mais prática e viável. A análise energética para colunas utiliza a separação reversível e a partir de um perfil descrevendo consumo/rejeição de energia na coluna. Ela preocupa-se com a eficiência global da coluna e permite propor metas de redução de consumo da coluna. A análise exérgica computa as perdas exérgicas geradas pelas irreversibilidades na coluna, determina a sua eficiência energética com a identificação das seções termodinamicamente ineficientes, direcionando onde as modificações devem ser realizadas. Esta sistemática foi desenvolvida em várias etapas. Implementação dos perfis a aplicação de cada método em sistemas binários e multicomponentes. A análise comparativa entre o perfil reversível e perfil de perdas de exergia, com base nos resultados obtidos com a análise dos sistemas de separação. A proposta de eliminação dos conflitos que surgiram com o estudo de multicomponentes. As modificações como posicionamento da alimentação, condição térmica e viabilidades de utilizar trocadores térmicos foram utilizadas como parâmetros de otimização da coluna e comparação entre os métodos.

Os estudos mostraram que a análise proposta por cada ferramenta para sistemas binários é similar, exceto para binários não-equimolares, onde o perfil de perdas de exergia direciona as modificações para a alocação de trocador intermediário de calor. Entretanto, para sistemas multicomponentes o perfil reversível apresenta varias configurações de *temperatura-entalpia* para serem analisadas, devido à simplificação em agrupar os componentes do sistema formando um pseudobinário. Contudo, dependendo do pseudobinário escolhido a proposta de modificação para coluna muda completamente. A escolha do pseudobinário adequado é dependente da comparação com o perfil quase-reversível rigoroso, que computa a distribuição dos componentes não-chave ao longo da coluna, eliminando assim os conflitos gerados, conforme os estudos realizados com um estudo com um sistema ternário de separação. Portanto, para realizar uma avaliação exérgica faz-se necessária inicialmente, a análise energética, com base no primeiro princípio. Deste modo, as análises da primeira e segunda lei são sim complementares,

Abstract

The aim of this work was to develop a procedure for reduction of energy requirement of distillation columns, by a combined energy-exergy analysis approach.

In the energy analysis method, the reversible column profile is used to describe heat requirement/rejection along the column. Scope for the use of intermediate heat sources/sinks and reflux reduction can then be identified. In the exergy analysis method, the exergy losses due to stage irreversibilities are computed along the column, so that inefficient column sections can be readily identified. Both methods were implemented and applied to a set of binary and multicomponents systems. The comparison of the results obtained for each case showed that for binary close-to-equimolar systems, both methods indicate the same column modifications. However, for systems with non-equimolar feed compositions, or more than two components, the profiles can easily indicate conflicting modifications, and the best option can be difficult to be identified.

Both methods showed to be an interesting and efficient tool to analyze energy efficiency of distillation column. However, while the exergy approach uses a real column for analysis, the reversible profile approach is based on the ideal column concept, and for multicomponents systems the additional consideration of a binary component pair is required. This turns this method very sensitive to the choice of key-components. A method for choice of optimal key-components is proposed, but it requires the calculation of a full rigorous near-reversible profile.

Nomenclatura

		unidades
B	vazão total do produto de fundo	(Kmol/h)
D	vazão total do destilado	(Kmol/h)
<i>Ex</i>	exergia	(J/h)
F	vazão total da alimentação	(Kmol/h)
H	entalpia	(J)
ic	estágio do condensador intermediário na coluna	
iq	estágio do trocador intermediário na coluna	
ir	estágio do refeedor intermediário na coluna	
L	vazão de líquido	(kmol/h)
Mp	média perdida	(J/h)
nf	estágio da alimentação na coluna	
N	número de pratos	
P	pressão	(bar)
Q	carga térmica	(J/h)
q	condição térmica da alimentação	
R	refluxo	
T	temperatura	(K)
UF	utilidade fria	
UI	utilidade intermediária	
UQ	utilidade quente	
V	vazão de vapor	(kmol/h)
x	composição de líquido	

W	trabalho	(kJ)
y	composição de vapor	
z	composição da alimentação	

Simbolos

Δ	variação
σ	desvio padrão
α	volatilidade relativa

Subscritos

0	condição ambiente
1	estágio 1
2	estágio 2
$alim$	alimentação
B	produto de fundo
$GCCC$	construção da grande curva composta da coluna
$comp$	composição
$cond$	condensador
$corr$	correntes
cl	chave leve
cp	chave pesada
def	deficitário
D	destilado
i	estágio
int	intermediário
irr	irreversível
j	número de componentes
l	número de correntes
L	líquido
LM	média logarítmica

<i>mim</i>	mínimo
<i>perd</i>	perdida
<i>Q</i>	fonte quente
<i>ref</i>	refervedor
<i>ter</i>	térmica
<i>V</i>	vapor
<i>util</i>	utilidades

Capítulo 1. Introdução

1.1.Otimização de Colunas Isoladas

A destilação é uma técnica de separação que consiste na ebulição preferencial dos componentes voláteis de uma mistura, separando-a em dois ou mais produtos de diferentes pontos de ebulição. Entretanto, o consumo de energia que este tipo de processo exige é extremamente alto. Industrialmente, apesar de novos métodos de separação estarem continuamente sendo explorados, a destilação foi e continua sendo o principal etapa de separação utilizada nas indústrias químicas, pois permite obter altas taxas de produtos, além de ampla faixa de aplicação.

Consequentemente, a importância deste processo tem despertado o interesse da comunidade científica em propor métodos para otimização. Numa análise para otimização de uma coluna isolada ou de um processo químico, pode-se recorrer a vários métodos. Existem na literatura os métodos de otimização de processos que se classificam em *heurísticos*, *matemáticos* e *termodinâmicos*.

Os métodos *heurísticos* são baseados na experiência dos engenheiros de processo; *matemáticos*, para o qual é necessário um simulador que busca minimizar um função objetiva específica para cada processo; e *termodinâmicos*, baseados na descrição fenomenológica do processo objetivando a eficiência termodinâmica deste. Em alguns métodos existentes na literatura (DHOLE, 1991; DE FARIA,1996) é definido basicamente a melhor combinação ótima, entre os seguintes parâmetros de otimização:

- Número de estágios da coluna,
- Posição da alimentação na coluna,
- Tipo de condição térmica da alimentação,
- Viabilidade da alocação de trocadores de calor intermediários.

Estes parâmetros quando estudados isolados ou conjuntamente levam a diferentes consumos de energia e diferentes custos operacionais para uma determinada coluna, tornando-se necessário o uso de metodologias desenvolvidas para o estudo de colunas de destilação alcançando uma configuração que minimize o consumo final de energia.

1.1.1. Redução de Refluxo numa Coluna

A maneira mais simplificada de se reduzir o consumo de energia numa coluna consiste em reduzir o seu refluxo. Uma coluna de destilação operando com uma razão de refluxo (R) e com respectivas cargas térmicas Q_{cond} e Q_{ref} é ilustrada na Figura 1-1. A Figura 1-1 (a), representa uma coluna operando em condições reais possuindo poucos estágios. A Figura 1-1 (b) representa uma coluna operando em condições de refluxo mínimo operando com um número infinito de estágios. A Figura 1-1 (c) representa uma coluna operando com recheio.

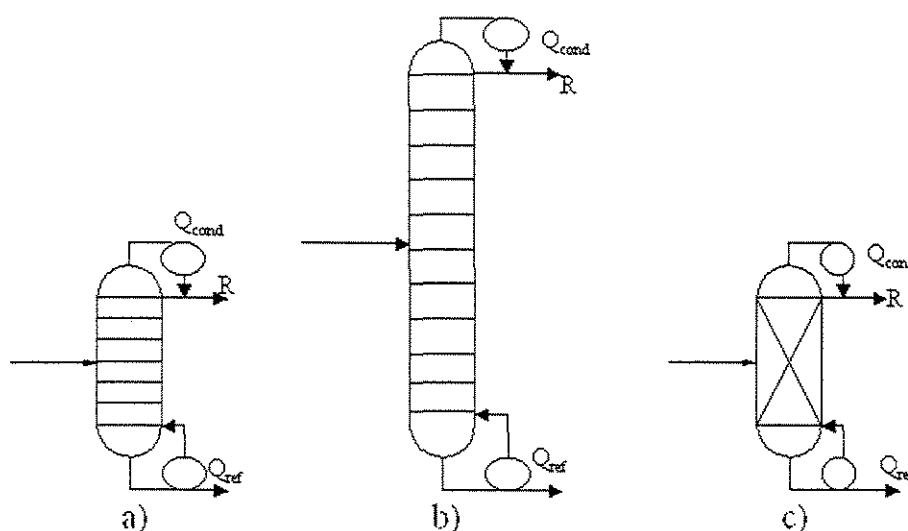


Figura 1-1: Opções de redução de refluxo em colunas.

A taxa de refluxo é reduzida numa coluna pela diminuição de suas vazões internas causando a redução das cargas térmicas do condensador e do reboiler e conseqüentemente do consumo global da coluna. Reduzindo suas vazões internas ter-se-á um aumento das impurezas nas correntes de saída da coluna. Sendo assim para que os produtos mantenham o mesmo teor de pureza nas composições, são utilizados os seguintes recursos:

- Aumenta-se o número de estágios na coluna, Figura 1-1 (b). Conseqüentemente, será mantida a separação inicial, a mesma composição e recuperação da simulação anterior (coluna com poucos estágios), obtendo assim a redução do consumo de energia da coluna.

- Numa eventual impossibilidade de aumentar o número de estágios, pode-se trocar os estágios da coluna por recheio, Figura 1-1 (c).

Entretanto, para tais alternativas existe um custo econômico que só uma análise mais detalhada do processo pode determinar.

1.1.2. Métodos Matemáticos

Os métodos de otimização matemáticos em colunas de destilação são baseados em minimização de uma função objetiva. São cálculos desenvolvidos simulados exaustivamente para diversas combinações de todos os parâmetros da coluna, testando valores de funções que necessitam ser minimizadas (VISWANATHAN e GROSSMANN, 1993). Apesar de precisos em seus objetivos, estes métodos apresentam algumas desvantagens, pois são métodos que possuem uma grande complexidade devido às restrições inerentes utilizadas no procedimento de otimização, os modelos matemáticos utilizados. Além disso, a experiência do engenheiro não é aproveitada neste tipo de otimização.

1.1.3. Métodos *Short-Cut*

Estes métodos de otimização (ROSE, 1985) são muito utilizados para processos de separação por destilação com multicomponentes. Estes métodos provêm uma relação com uma estimativa inicial do número de estágios, razão de refluxo além de indicar uma proporção dos componentes nas correntes de saída da coluna, uma vez determinada os componentes-chaves do sistema. Estes métodos são baseados nos trabalhos realizados por UNDERWOOD, FENSKE e GILLILAND. A seguir, cada procedimento será detalhado, com a apresentação das equações/algoritmos utilizados.

1.1.3.1. Número de mínimo de estágios

FENSKE (1932) mostrou que se pode obter o número mínimo de pratos pode ser determinado através:

$$\alpha^{N_{\min}} = \frac{\left(\frac{x_{cl}}{x_{cp}} \right)_D}{\left(\frac{x_{cl}}{x_{cp}} \right)_B} \quad \text{eq. (1-1)}$$

- em que:

- α : - volatilidade relativa
 x_{cl} : - componente chave-leve (mais volátil)
 x_{cp} : - componente chave-pesado (menos volátil)
 $N_{\min}$: - número mínimo de pratos

1.1.3.1.1. Observação

A determinação dos componentes chave-leve e chave-pesado pode ser mostrada através do seguinte exemplo: numa coluna, com uma única corrente de carga, uma corrente de produto destilado e outra de produto de cauda, uma mistura multicomponente é fracionada em duas frações. O produto de cauda contém os constituintes mais “pesados” e, portanto, menos voláteis, contidos na carga; o produto de topo contém os componentes mais “leves”, menos voláteis. Os componentes com volatilidade intermediária aparecem tanto no topo como no fundo, em frações desprezíveis. Os dois componentes entre os quais se define a separação são os componentes-chave, ou simplesmente as chaves da destilação. O componente mais volátil dos dois é denominado “chave-leve” e o componente menos volátil, “chave-pesado”. Em alguns procedimentos de cálculo, admite-se serem nulas as concentrações dos componentes não distribuídos, com volatilidade intermediária, nas extremidades apropriadas da coluna, FOUST, WENZEL, CLUMP, MAUS E ANDERSEN (1982). O uso do componente chave-leve e chave-pesado é também utilizado na solução de sistemas multicomponentes (DHOLE, 1991), onde os componentes mais voláteis são agrupados estágio a estágio, recebendo a denominação de “chave-leve”. Sucessivamente, o mesmo ocorre com os componentes menos voláteis, agrupando-os e recebendo a denominação de “chave-pesado”. Assim é formado um conjunto pseudobinário.

1.1.3.2. Refluxo mínimo

UNDERWOOD (1948) desenvolveu uma relação que expressa o refluxo mínimo:

$$\left(\frac{L}{V}\right)_{\min} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_{D_i}}{\frac{\alpha_i - \theta}{\alpha_i}} \right) - 1 \quad \text{eq. (1-2)}$$

- em que θ satisfazer a equação:

$$1-q = \sum_{i=1}^n \frac{\alpha_i x_{alim,i}}{\alpha_i - \theta}, \quad \alpha_{cl} \leq \theta \leq \alpha_{cp} \quad \text{eq. (1-3)}$$

O q na equação denota a condição térmica da alimentação, ou seja, a quantidade de moles na vazão líquida na seção de esgotamento resultante da introdução na alimentação. Portanto:

- $q = 0$ para vapor saturado,
- $q = 1$ para líquido saturado,
- $0 < q < 1$ para duas fases,
- $q > 1$ para líquido subresfriado e
- $q < 0$ para vapor superaquecido.

1.1.3.3. Número de estágios

GILLILAND (equação de Eduljee):

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 0,75 - 0,75 \left(\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D} \right)_{\min}}{\left(\frac{L}{D} + 1 \right)} \right)^{0,5688} \quad \text{eq.(1-4)}$$

O número de estágios a refluxo total pode ser estimado pela equação de FENSKE, expressa por:

$$\frac{\left(\frac{x_{D_i}}{x_{D,cl}} \right)}{\left(\frac{x_{B_i}}{x_{B,cp}} \right)} = \left(\frac{\alpha}{\alpha_{cl}} \right)^N \quad \text{eq.(1-5)}$$

Porém estes métodos fornecem uma relação rigorosa somente em duas condições:

- Para um sistema considerado ideal,
- Para sistemas onde não existe nenhum componente com volatilidade relativa entre as volatilidades relativas dos componentes chave.

Apesar de não fornecer resultados precisos para sistemas de multicomponentes, estes métodos fornecem uma estimativa inicial para o início dos estudos.

1.1.4. Métodos Heurísticos

Até o início da década de oitenta, dificilmente encontrava-se a melhor configuração para uma planta de processos. Eram necessários vários anos e várias instalações consecutivas, até que o processo químico evoluísse para o “melhor”. Os processos eram sintetizados através da intuição e experiência do engenheiro, seguidas de evolução estrutural, novamente por intuição e experiência e finalmente, otimizados em termos de custo e topologia fixa. Este procedimento exigia tempo e esforço computacional. As curvas de aprendizagem revelavam que os custos de produção podem ser reduzidos com o passar dos anos, através de tentativas sucessivas, à medida que se adquire experiência com os processos, (DE FREITAS, 1996).

Os métodos de otimização heurísticos são métodos que necessitam do conhecimento prático e experiência da observação de vários procedimentos diferentes. Sua desvantagem se baseia no fato que, no caso de colunas de destilação, o procedimento de otimização não é realizado de forma sistemática, onde existe uma avaliação comparando os pontos positivos e negativos de cada modificação a ser realizada na coluna (posição da alimentação, condição térmica, alocação de trocadores de calor intermediário e número de estágios da coluna).

1.1.5. Métodos Termodinâmicos

A eficiência energética de um processo pode ser medida em termos da Primeira ou da Segunda Lei. Pela Primeira Lei, a eficiência é a razão entre a energia útil que sai do processo e a energia necessária que entra nele. Já pela Segunda Lei, a eficiência pode ser definida como a razão entre a energia mínima teoricamente necessária para a realização de um processo e a energia efetivamente usada no processo.

A aplicação de conceitos termodinâmicos para a avaliação e otimização de sistemas de destilação fornece parâmetros para avaliação de eficiência energética. Na abordagem termodinâmica tradicional para análise de colunas de destilação, são utilizadas filosofias diferentes e conflitantes: separação reversível, separação irreversível e quase-reversível.

1.1.5.1. Separação Reversível

No caso da *separação reversível*, a coluna é considerada como um separador reversível livre portanto, de quaisquer irreversibilidades como, por exemplo, a existência de forças motrizes para transferência de calor e massa. Para esta classe de separadores, é possível calcular o consumo mínimo de trabalho para efetuar a separação de l correntes com j componentes em k correntes com i componentes, dado através da equação 1-6:

$$-W_{min,T_0} = RT_0 \left(\sum_k^{alim} n_k \sum_i^{comp.} x_i \ln x_i - \sum_l^{produto} n_l \sum_j^{comp.} x_j \ln x_j \right) \quad eq.(1-6)$$

Uma dedução rigorosa desta equação pode ser encontrada em KING (1980). A relação acima expressa que o consumo mínimo de trabalho para uma dada separação é função somente da variação de composição (x) entre a mistura inicial e as correntes de produto, sem considerar a dificuldade de separação. Esta relação não pode ser aplicada a processos reais, uma vez que nenhum processo é reversível na prática. Entretanto, o conceito de trabalho mínimo foi extensivamente utilizado para demonstrar a eficiência de processos de separação. Uma das críticas mais fortes a esta análise é o fato da eq.(1-6) somente considerar as composições das correntes de entrada e saída do processo, e não com a dificuldade da separação.

Outro problema relacionado com a coluna reversível, é que, em teoria, uma coluna só pode operar reversivelmente para uma mistura binária. Para sistemas multicomponentes, a reversibilidade só é possível se os componentes forem distribuídos em ambas as correntes de produtos. Este caso não tem interesse industrial. Uma proposta para o cálculo de uma coluna reversível foi desenvolvida por KAIBEL (1987), para sistemas binários e multicomponentes obedecendo à distribuição reversível dos componentes entre os produtos, Figura 1-2.

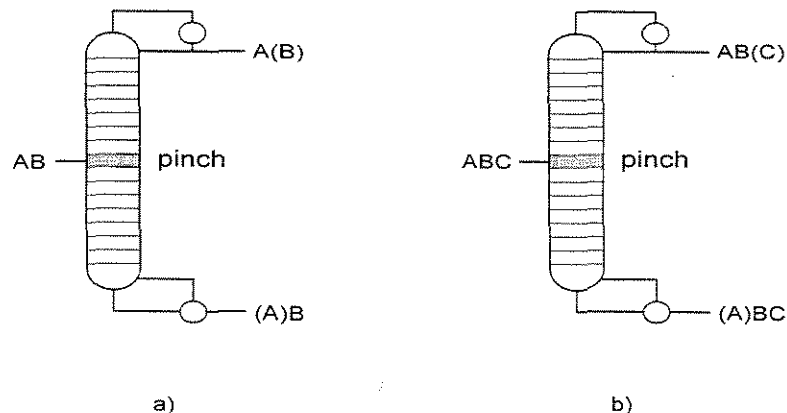


Figura 1-2: Localização do *pinch* em colunas reversíveis: sistema binário (a), e sistema multicomponente (b).

Entretanto, devido à inaplicabilidade do método a sistemas de interesse prático (multicomponentes, sem distribuição dos componentes entre produtos), este procedimento não é utilizado para análise energética de colunas. Para colunas multicomponentes operando com a distribuição irreversível de componentes nos produtos, a localização dos *pinch* (região onde a linha de operação encontra com a linha de equilíbrio) ocorre afastado do estágio de alimentação. Neste caso somente as regiões acima do *pinch* superior e abaixo do *pinch* inferior podem operar de forma reversível. A região contida entre os dois *pinch* necessariamente é uma seção irreversível, e é a fonte das irreversibilidades em uma coluna quase-reversível. Esta irreversibilidade é devida a impossibilidade de igualar a composição e temperatura da corrente de alimentação, com a composição e temperatura das correntes no estágio de alimentação, levando à existência de forças motrizes, e portanto, a uma perda de exergia.

1.1.5.2. Separação Irreversível

Os métodos baseados em *separação irreversível* (HENLEY e SEADER, 1981) consideram a existência de forças motrizes para transferência de calor e massa no interior da coluna, assim como no condensador e refeedor. O balanço de trabalho resultante relaciona o consumo real de trabalho com as respectivas cargas térmicas e temperaturas das utilidades que operam a coluna (no caso mais usual, vapor d'água e água de refrigeração), e leva a uma das definições de eficiência termodinâmica da coluna, na qual o trabalho real

(baseado na análise termodinâmica das cargas do refeedor e condensador) é comparado ao trabalho mínimo eq.(1-6).

1.1.5.3. Separação Quase-reversível

No desenvolvimento da relação para o consumo mínimo de trabalho eq.(1-7), o processo de separação foi considerado como isotérmico. Entretanto, colunas de destilação não operam de forma isotérmica, e é necessário considerar a variação da temperatura durante o processo de separação. O balanço de trabalho para um processo de separação sob estas condições foi apresentado por DENBIGH (1956), e estendido por HENLEY e SEADER (1981) com a introdução da grandeza *exergia* (definida como o conteúdo de trabalho útil de um sistema):

$$\Delta Ex = \Delta H - T_0 \Delta S = \sum_i Q_i \left(1 - \frac{T_0}{T_i} \right) - T_0 \Delta S_{irr} \quad \text{eq.(1-7)}$$

onde:

ΔEx	- variação de exergia do processo de separação
ΔH	- variação de entalpia do processo
ΔS	- variação de entropia do processo
ΔS_{irr}	- entropia gerada devido às irreversibilidades
Q_i	- fluxo de calor de e para reservatórios de calor à temperatura T_i
T_i	- temperatura do reservatório i
T_0	- temperatura ambiente (298,2 K)

Para processos reversíveis, isotérmicos e com misturas apresentando comportamento de equilíbrio de fases ideal, a eq.(1-7) se transforma na eq. (1-6), (ZEMP, 1994). A expressão do balanço de exergia mostra que para um processo de separação reversível, existe um conjunto de fluxos de calor (nas respectivas temperaturas), de forma a anular a entropia gerada devido a irreversibilidades. Para uma coluna de destilação, isto ocorre quando a linha de equilíbrio toca na linha de operação em toda a sua extensão (FRANKLIN e WILKINSON, 1982). Este processo foi analisado extensivamente por KAIBEL (1987), que identificou as seguintes condições para a coluna reversível:

- operação sob refluxo mínimo.
- número infinito de estágios e trocadores laterais de calor.
- mistura binária.

Para sistemas multicomponentes, a coluna reversível só é possível para uma determinada distribuição de todos os componentes entre os correntes de produtos. Na prática, nenhuma destas restrições é satisfeita: colunas separando sistemas binários são raras, e para colunas multicomponentes, a distribuição necessária dos componentes nos produtos para operação reversível não apresenta interesse econômico.

A conclusão é que teoricamente não é possível operar uma coluna de destilação multicomponente como reversível para uma separação de interesse econômico, mesmo que fossem satisfeitas as exigências de um número infinito de estágios. Isso significa que existe uma irreversibilidade mínima para cada separação. A condição de uma coluna operando sob esta irreversibilidade mínima é denominada de *separação quase-reversível*. Este ponto é uma falha muito grande nos métodos propostos por outros autores, que consideram qualquer processo de destilação como potencialmente reversível.

Já um processo em condições reais opera de maneira irreversível devido à presença das forças motrizes de transferência de massa e energia ao longo da coluna, sendo assim apresentando uma eficiência termodinâmica do ponto de vista operacional menor.

1.2.Trabalhos Recentes

Nos trabalhos recentes, apesar das inúmeras tentativas de aplicar conceitos termodinâmicos para a análise e otimização energética de colunas de destilação, poucos métodos conseguem satisfazer as necessidades práticas nesta área. Por um lado, o separador reversível é um conceito teórico, inexistente na prática, e que não leva em consideração a dificuldade de separação, mas fornece um limite para a eficiência de separação.

O conceito de separador irreversível leva em consideração todas as características da coluna (dificuldade de separação, composição das correntes), mas exige detalhes sobre condições de operação e utilidades. Entretanto, apesar das possíveis vantagens de cada abordagem, nenhum dos métodos indica o caminho a ser seguido para melhorar o desempenho do processo de separação.

A termodinâmica é capaz de fornecer parâmetros para a avaliação de eficiência energética de um processo químico ou de partes dele. Um processo que ocorre de maneira reversível possui a maior eficiência termodinâmica possível. Já um processo em condições reais opera de maneira irreversível devido à presença das forças motrizes de transferência

de massa e energia ao longo da coluna, sendo assim apresentando uma eficiência termodinâmica do ponto de vista operacional menor.

Utilizando uma metodologia de análise de colunas baseada em conceitos da termodinâmica pode-se obter dados a respeito das condições operacionais, detalhando se o processo está ineficiente ou não. Uma vez determinado este critério, o próximo passo é determinar o que pode ser modificado no processo, pois se este está desperdiçando energia ele está termodinamicamente ineficiente.

Nesta linha, alguns autores têm proposto configurações alternativas para colunas de destilação e demonstrando configurações vantajosas através do uso de conceitos termodinâmicos.

DHOLE (1991) desenvolveu um estudo de integração energética de colunas em processos operando a baixas temperaturas. Através do uso de um perfil *entalpia-temperatura*, que representa a mínima condição termodinâmica da coluna, a integração é realizada a partir da inclusão do gráfico no perfil de *entalpia-temperatura* que representa o processo. Este perfil calculado provê metas de redução do consumo de energia como identificação de escopo para redução de refluxo e a viabilidade da alocação de trocadores intermediários de calor.

FONYO e MIZSEY (1994) propuseram uma sistemática onde abordaram o estudo de colunas com recompressão de vapor. No caso o destilado é comprimido por uma turbina sendo utilizado para fornecer parte do calor necessário para o refulvador. Através dos estudos eles concluíram que a recompressão do vapor pode ser vantajosa para colunas convencionais se somente se a diferença de temperatura entre o topo e o fundo da coluna for pequena. Um estudo realizado por LINNHOFF e SMITH (1988), utilizando a tecnologia *pinch* tem imposto restrições ao uso da recompressão de vapor (LINNHOFF e SMITH, 1988).

Uma linha de trabalhos como os de MANLEY, CHAN e CRAWFORD (1992) e de OGNISTY (1993 e 1995) tem sido desenvolvida ao longo da década de 90, permitindo o estudo de uma coluna de destilação visando sua otimização. Nestes estudos são aplicados conceitos termodinâmicos como *exergia* e *irreversibilidade*. Estes conceitos permitem a identificação de regiões termodinamicamente ineficientes na coluna e identificam que no caso do processo de destilação, quanto maior forem as irreversibilidades ao longo da coluna

neste processo, maiores serão as quantidades de exergia consumida pela coluna. A minimização do consumo exergético na coluna seria o passo certo para sua otimização.

Foi mostrado por ZEMP (1994) e depois por DE FARIA (1996) que para otimização de uma coluna é importante o conhecimento do balanço de exergia global, mas também o de cada estágio. Através do balanço de exergia estágio a estágio se pode obter um perfil de exergia da coluna, que permite identificar as seções termodinamicamente ineficientes e propor modificações que melhor distribua as perdas ao longo da coluna.

BONDYOPADHYAY, MALIK e SHENOY, (1998) estendem a resolução de obtenção do perfil reversível mas eliminando algumas ineficiências de cálculo do estágio da alimentação.

Para uma publicação mais recente, MAIA (2001) utilizou a análise exergética para integração energética entre as colunas de destilação em seqüência, de forma a permitir a otimização de cada coluna da seqüência com relação à condição térmica da alimentação. Esta aplicação foi estudada para sistemas ternários e com cinco componentes.

1.3. Conclusões e Proposta de Trabalho

O trabalho propõe o desenvolvimento de uma nova metodologia de análise de colunas de destilação, sendo utilizado como objeto de estudo de um procedimento sistemático convencionado em fundamentos termodinâmicos. Dentre estes conceitos, existem metodologias que até então não tinham sido estudadas de forma conjunta.

A análise energética para colunas utiliza a separação reversível e a partir de um perfil descrevendo consumo/rejeição de energia na coluna são aplicados conceitos utilizados em integração energética de processos. Ela preocupa-se com a eficiência global da coluna e permite propostas de modificações interessantes na coluna.

A análise exergética utiliza a propriedade *exergia* e computa as perdas exergéticas geradas pelas irreversibilidades na coluna. A partir de balanço de exergia prato-a-prato aplicado a colunas pode-se determinar a sua eficiência energética com a identificação das seções termodinamicamente ineficientes e posteriormente propor modificações para otimiza-la.

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma sistemática onde será utilizada a análise energética e a análise exergética de colunas de destilação. Os estudos serão

desenvolvidos a partir de uma análise crítica de ambas as ferramentas adotadas, onde inicialmente estes conceitos serão aplicados de forma separada a sistemas de separação. Os resultados encontrados servirão também para demonstrar a obtenção de uma ferramenta para otimização do ponto de vista termodinâmico para sistemas de separação, bem como embasamento para a realização de um estudo comparativo com as respectivas metodologias.

As modificações de aspectos operacionais da coluna como posicionamento da alimentação, condição térmica e viabilidades de utilizar trocadores térmicos serão utilizadas como parâmetros de otimização das colunas e comparação entre os métodos. A eliminação dos possíveis conflitos que podem ser gerados neste estudo também será estudada, obtendo assim o desenvolvimento de uma metodologia utilizando a análise energética e a análise exergética para análise e otimização de colunas de destilação convergindo-as para um procedimento combinado, obtendo assim uma redução do uso de energia mais prática e viável.

Neste estudo serão enfatizadas também propostas de modificação em processos existentes, onde os aspectos térmicos, operacionais e estruturais do processo químico escolhido serão considerados. Estas modificações são realizadas visando uma análise mais adequada da eficiência termodinâmica de uma coluna, e permitindo uma redução do consumo de energia mais prática e viável.

1.3.1. Divisão do Trabalho

No tópico anterior foi apresentada a proposta deste trabalho. A esquematização do desenvolvimento deste trabalho será realizada com os estudos do perfil reversível e o perfil de perdas de exergia aplicados, de forma separada, a sistemas de separação apresentados nos capítulos 2 e 3, respectivamente.

Os resultados obtidos serão comparados no capítulo 4, onde será feita uma análise comparativa entre os métodos e a identificação de conflitos entre as ferramentas de trabalhos escolhidas para este tema. Os conflitos identificados na análise comparativa entre os métodos serão eliminados com uma nova proposta apresentada no capítulo 5, onde o desenvolvimento de um procedimento sistemático combinado será demonstrado na aplicação de ambas as metodologias a um sistema de separação. As conclusões e sugestões para trabalhos futuros serão apresentadas no capítulo 6.

Capítulo 2. Perfil Reversível de uma Coluna

2.1. Introdução

Em 1979, LINNHOFF defendeu sua tese com um conjunto de conceitos termodinâmicos os quais permitiam avançar de modo significativo as decisões de projetos de processos. Estes conceitos tornaram-se os pilares da análise *Pinch*, a qual se convencionou em um procedimento sistemático que avalia um projeto sob um contexto de eficiência energética global de fora para dentro da hierarquia do processo, isto é, a partir das utilidades e da rede de trocadores de calor para o processo (separadores, reatores), favorecendo sua eficiência (LINNHOFF, 1982 e LINNHOFF, 1993).

A análise *Pinch* pode proporcionar benefícios através da integração energética dos diferentes separadores com o processo e o sistema de utilidades (LINNHOFF e SMITH, 1988). Ela permite a aplicação de um procedimento sistemático para a análise e projeto de um sistema de redes de trocadores e do sistema de utilidades. Ela evoluiu para englobar a maioria dos aspectos dos projetos de processos: rede de trocadores de calor, retrofits, reatores, minimização de efluentes, integração entre várias plantas, novos projetos, sistemas de separação.

2.1.1. Uso da Grande Curva Composta em Processos Químicos

Num processo existem as correntes que precisam ser resfriadas e as que precisam ser aquecidas. As correntes quentes são agrupadas em seus respectivos intervalos de temperatura, assim obtendo uma linha única que representa todas as correntes quentes. Elas recebem a denominação de Curva Composta Quente. Analogamente, ocorre com as correntes frias que agrupadas em seus respectivos intervalos de temperatura recebem a denominação de Curva Composta Fria. A partir de um fluxograma de um processo químico, ocorre a identificação das correntes relevantes para a integração térmica, sendo plotadas para um diagrama *temperatura-entalpia*.

2.1.1.1. $\Delta T_{\min}$ e o Conceito *Pinch*

A posição relativa entre as curvas compostas são determinadas através de uma diferença mínima de temperatura ($\Delta T_{\min}$) para a troca de calor. Uma vez determinado o

$\Delta T_{\min}$, as curvas se aproximaram até este limite, determinado de ponto de estrangulamento ou ponto *pinch* (LINHHOFF e FLOWER,1983). Nas curvas compostas o processo é dividido em dois sistemas independentes, ou seja, um sistema localizado acima do ponto de estrangulamento, ou seja, do *pinch* onde a transferência de calor é nula e outro abaixo. O sistema situado acima do *pinch* apresenta um *déficit* de calor, ou seja, necessita de uma quantidade mínima de calor da utilidade quente para satisfazer seu balanço energético. Portanto, é considerado um sorvedouro de calor. Já o sistema localizado abaixo do ponto de estrangulamento, apresenta um *superavit*, ou seja, necessita de uma quantidade mínima de utilidade fria para satisfazer seu balanço térmico. Portanto é considerado uma fonte de calor, Figura 2-1.

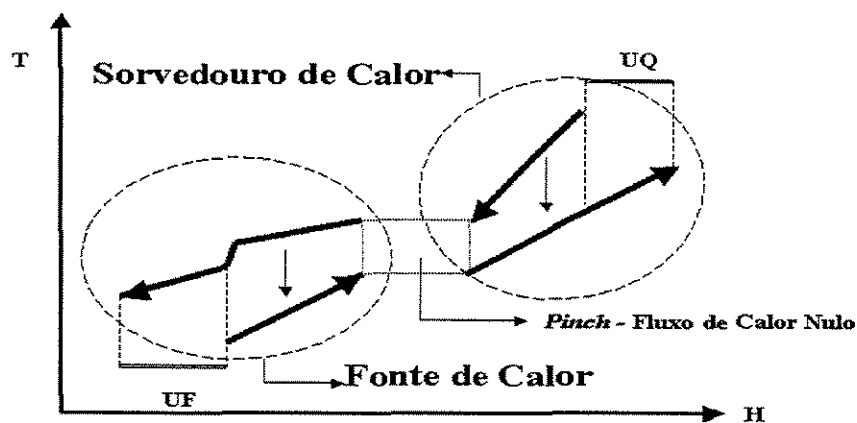


Figura 2-1: Curvas Compostas de um processo.

Uma vez identificadas as metas de energia para o processo através das curvas compostas, devem ser observados três princípios básicos da Análise *Pinch*:

- Não transferir calor através do *pinch*.
- Não utilizar utilidade quente abaixo do *pinch*.
- Não utilizar utilidade fria acima do *pinch*

A violação de qualquer uma dessas regras inviabiliza qualquer tentativa de se obter a máxima eficiência energética do processo utilizado como objeto de estudo, pois são fundamentadas em conceitos termodinâmicos. As curvas podem ser movimentadas ao longo do eixo de temperatura pois representam variações de entalpia entre as várias faixas

de temperatura. O $\Delta T_{\min}$, portanto, tanto pode ser aumentado como diminuído, simplesmente representando o deslocamento relativo de uma ou mais curvas compostas ao longo do eixo horizontal.

Quando $\Delta T_{\min}$ aumenta, ocorre um afastamento entre as curvas compostas. Consequentemente, as metas de energia aumentam (aumento do custo operacional), mas as áreas dos equipamentos necessários às trocas térmicas diminui (diminuição do custo fixo). Analogamente, se o $\Delta T_{\min}$ diminuir as curvas irão se aproximar, acarretando numa diminuição das metas de energia, porém as áreas de trocas necessárias para os equipamentos aumentarão. Portanto, a escolha adequada do $\Delta T_{\min}$ acarreta numa correspondência ótima de *custo x benefício*. As curvas compostas indicam a margem para recuperação de energia e as metas de consumo mínimo de utilidades quentes e frias. As curvas compostas fria e quente, quando plotadas para um único gráfico permitem o fornecimento de dados importantes para síntese de processos.

A Figura 2-2 mostra um exemplo de curvas compostas plotadas mostrando a identificação das necessidades mínimas do processo e a localização do ponto *pinch*. A Grande Curva Composta, doravante denominada GCC, é uma ferramenta utilizada para prover metas para múltiplas utilidades em processos. Ela é obtida a partir das curvas compostas quente e fria, Figura 2-2 (a). A construção da GCC começa pelo ajuste nas temperaturas das curvas compostas. Este ajuste envolve um aumento das temperaturas da curva composta fria através de $\frac{1}{2} \Delta T_{\min}$ e uma diminuição de $\frac{1}{2} \Delta T_{\min}$ das temperaturas da curva composta quente, Figura 2-2 (b) e (c).

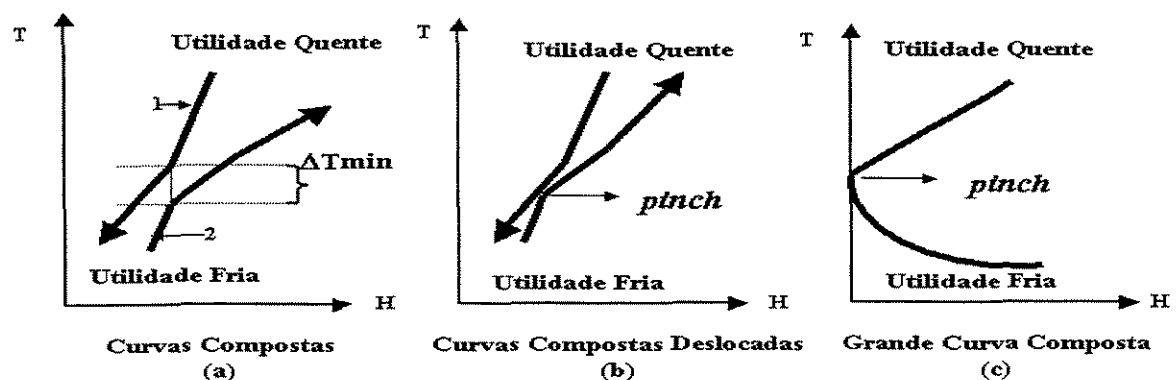


Figura 2-2: Deslocamento das curvas compostas com o aumento ou diminuição do $\Delta T_{\min}$.

Conseqüentemente, a mudança nestas temperaturas acarreta que as curvas compostas fria e quente tocarão uma na outra no ponto *pinch*, mas mantendo o $\Delta T_{\min}$ entre os níveis de utilidades das correntes do processo, Figura 2-3. Resumindo, a construção da GCC consiste em utilizar a mesma escala de temperatura das curvas compostas, porém plotando-se no eixo horizontal os mesmos intervalos de entalpia entre as curvas quente e fria, para cada temperatura específica. Através deste diagrama pode avaliar as quantidades necessárias de utilidades e os níveis de temperatura nos quais estas utilidades podem ser fornecidas. Neste estudo envolve escolha de modificações apropriadas para vários níveis de utilidades pela maximização do uso de utilidades economicamente viáveis (utilidades intermediárias - UI) e minimização do uso de utilidades caras, Figura 2-3 (c). Os conceitos da grande curva composta são aplicados para máquinas térmicas, bombas, colunas de destilação, evaporadores e para alguma outra operação unitária a qual pode ser representada em termos de fonte ou sorvedouro térmico (LINNHOFF,1993).

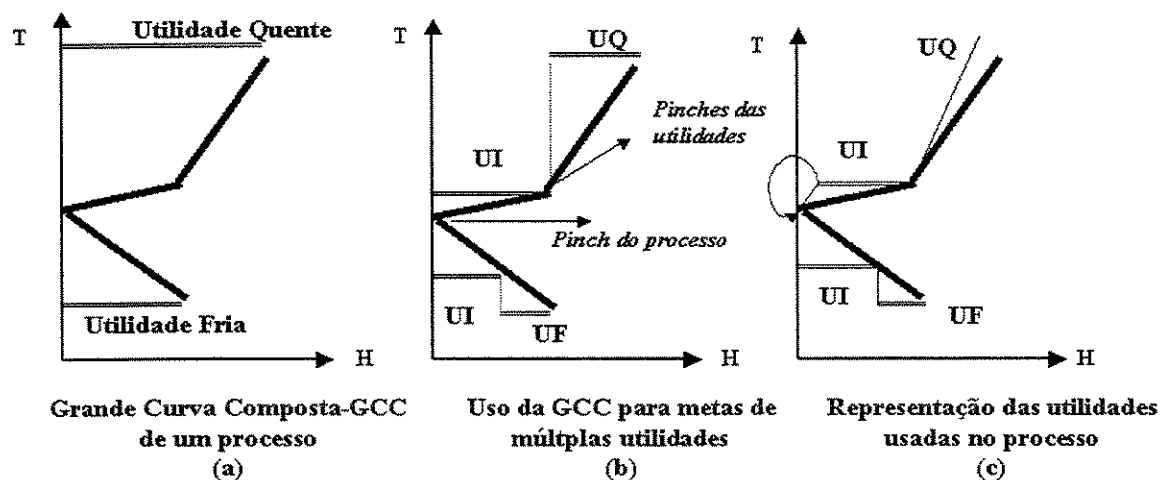


Figura 2-3: Uso da GCC para prover metas para as diferentes utilidades de um processo.

O uso da GCC fornece dados importantes para a integração de processos individuais com o restante do processo, Figura 2-4. Em seu trabalho, Dhole pretendia integrar colunas de destilação com o restante do processo operando a baixas temperaturas (etileno e propileno), integrado-as a partir do uso da Grande Curva Composta (GCC). Inicialmente, as colunas dos processos eram representadas por diagramas de *temperatura-entalpia*, denominados de "representação de caixas" Figura 2-4 (a). A integração era realizada a partir da inclusão dos perfis que representam as colunas isoladas na GCC, Figura 2-4 (b).

A inclusão da “representação de caixas” na CCG, em alguns casos, dificultava a integração das colunas com o restante do processo. Então, para integrá-las de forma mais eficiente, surgiu a ideia de obter um diagrama ($T-H$) da coluna que descrevesse o perfil de consumo/rejeição de energia desta. Através deste perfil, estudá-las e otimizá-las, reduzindo o seu consumo de energia. Uma vez otimizadas a integração das colunas com o restante do processo é realizada com uma maior redução do consumo de energia. Entretanto, esta proposta não computa os pontos *pinch* de forma rigorosa, como proposto por ZEMP (1994).

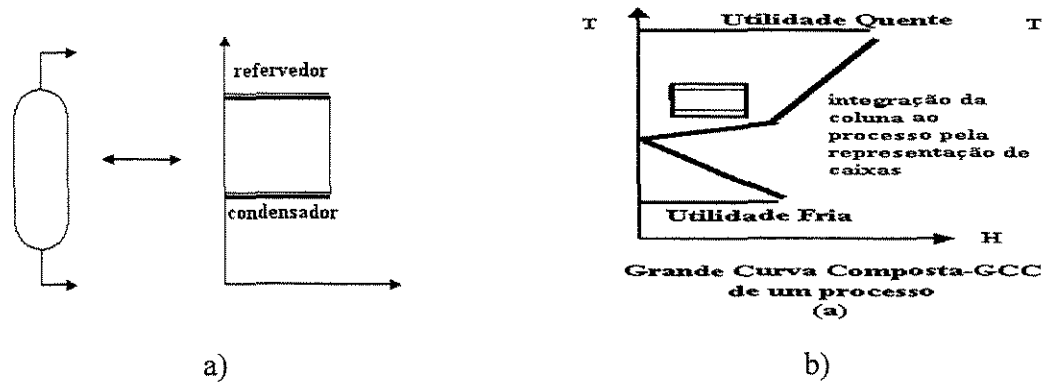


Figura 2-4: Integração de colunas isoladas ao restante do processo.

Os gráficos mostrados na Figura 2-5 (ZEMP, 1994) mostram as cargas térmicas do rebovedor e do condensador e a temperatura de operação deles para:

- Coluna operando com razão de refluxo mínima (representação por “caixas”).
- Coluna com rebovedor intermediário, fornecendo calor a uma temperatura mais baixa.
- Coluna com vários rebovedores e condensadores intermediários.
- Grande Curva Composta da Coluna ou perfil reversível de uma coluna, doravante denominada GCCC.

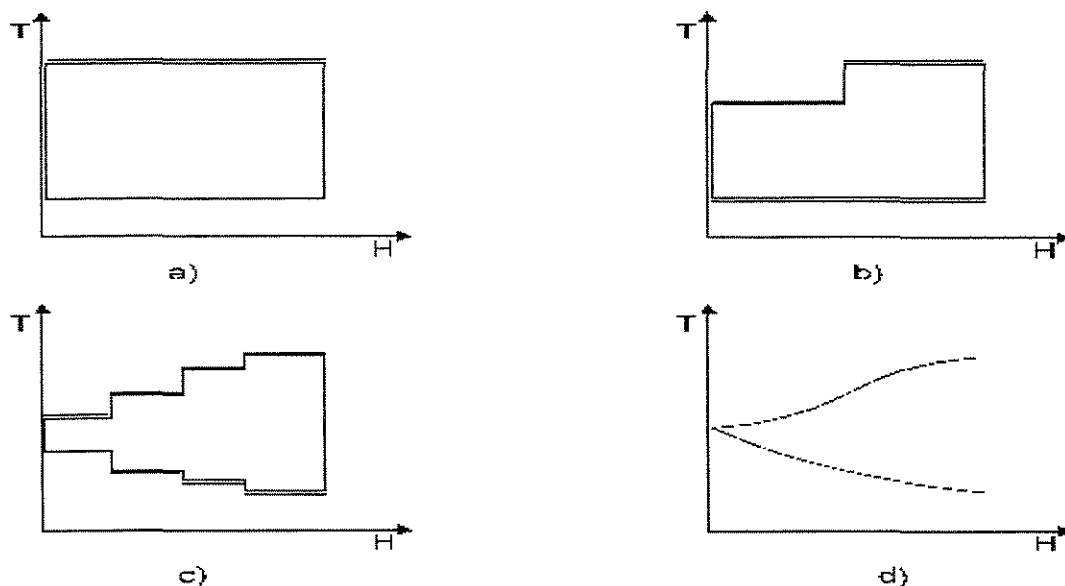


Figura 2-5: Representação gráfica *entalpia-temperatura* de colunas.

A otimização de colunas de destilação está diretamente relacionada com a escolha mais conveniente de parâmetros como condição térmica da alimentação, razão de refluxo, posicionamento da alimentação e trocadores laterais. A metodologia proposta por DHOLE propõe que o estudo de um perfil *entalpia-temperatura* de uma coluna de destilação pode identificar, para os fatores anteriormente citados, qual a configuração da coluna que proporciona maior eficiência termodinâmica. Utilizando a análise *Pinch*, é possível para identificar qual desses parâmetros poderá ser apropriado para um determinado sistema de estudo, otimizando-o quanto ao consumo de energia.

2.2. Condição Mínima Termodinâmica

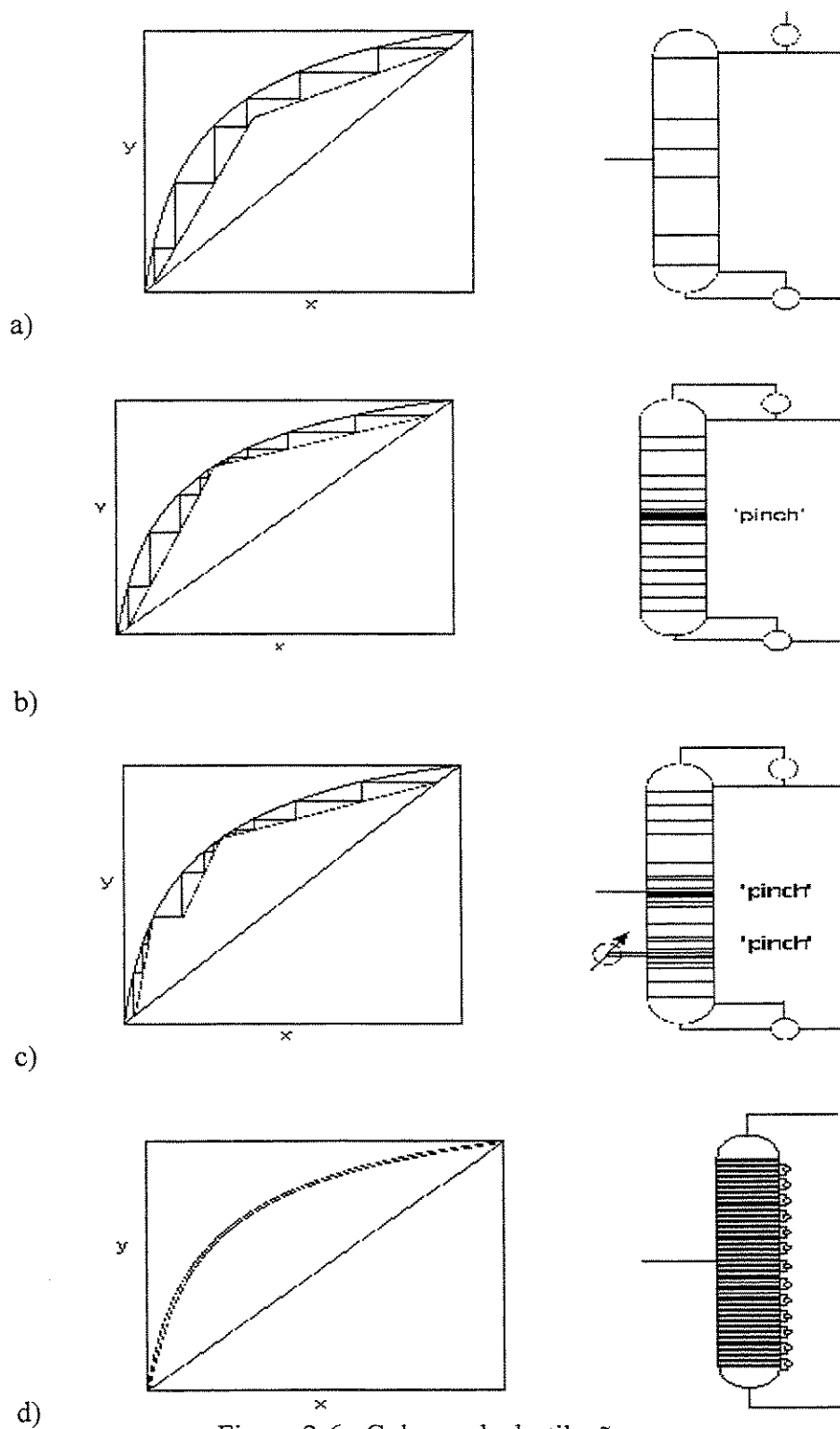
Antes de entrar com a implementação do perfil reversível de uma coluna será revisto neste tópico o conceito de condição mínima termodinâmica bem como a sua obtenção. Nesta condição, a coluna opera em uma maneira completamente reversível, ou seja, a condição de reversibilidade da coluna implica a inexistência de forças motrizes para transferência de massa e energia, que não há queda de pressão ao longo da coluna.

A Figura 2-6 (a) (ZEMP, 1994) ilustra uma coluna normal operando em condições reais, com o refluxo acima do refluxo mínimo; possui uma quantidade de estágios relativamente pequena além de consumir grande quantidade de energia. Através do diagrama de McCabe-Thiele, a linha de operação não toca a linha de equilíbrio devido às

irreversibilidades geradas pelas forças motrizes para transferência de massa e energia.

Aumentando-se os números de estágios obtém-se uma coluna operando sob razão de refluxo mínima. No caso de uma coluna operada sob razão de refluxo mínima, para sistema binário, a linha de operação tocam a linha de equilíbrio. Em consequência, existe um número infinito de estágios de equilíbrio próximos à região da alimentação, ou seja, um *pinch* foi criado. Para a coluna de refluxo mínimo as cargas térmicas do refeedor e condensador são mínimas, Figura 2-6 (b). Se um refeedor intermediário for colocado, uma certa parcela da carga térmica total do refeedor é fornecida a uma temperatura mais baixa, Figura 2-6 (c). Existem agora dois pontos nos quais a linha de operação toca a linha de equilíbrio, dois pontos “*pinch*”. Se mais refeedores ou condensadores intermediários forem colocados na coluna, mais pontos “*pinch*” aparecerão. A coluna de refluxo mínimo com infinitos condensadores e refeedores intermediários e o respectivo diagrama de *estágio-composição* são mostrados na Figura 2-6 (d).

Para um número infinito de trocadores de calor intermediários a coluna opera reversivelmente, ou seja, ela opera sem a existência de forças motrizes para transferência de calor e massa; então a linha de operação coincide com a linha de equilíbrio em todos os pontos. A coluna então, estará operando na condição mínima termodinâmica. A ferramenta que é utilizada para análise termodinâmica de uma coluna é chamada de Grande Curva Composta da Coluna - GCCC, mostrada na Figura 2-5 (d). O procedimento para a obtenção da GCCC começa com os resultados de uma coluna convergida simulada. Dessa simulação, são extraídos perfis de propriedades físicas necessários para os cálculos.



A GCCC provê um perfil termodinâmico para uma coluna e é utilizada para identificar metas apropriadas para modificações de coluna. Resumindo, a GCCC é uma

adaptação da Grande Curva Composta, mas agora utilizada para processo individuais, como o de destilação.

2.3. Modelagem Matemática do Perfil Reversível

O gráfico de $(H-T)$ é uma representação dos cálculos para obtenção da condição mínima termodinâmica de uma coluna operando em condições reais (TERRANOVA e WESTERBERG, 1989; DHOLE e LINNHOFF, 1993; OGNISTY, 1995). Esta representação é a ferramenta que será utilizada para propor metas para redução de energia. A resolução do sistema de equações para obtenção do balanço de massa e energia foi realizada para gerar uma curva $(T-H)$ (BENEDICT, 1947; KING, 1980; FITZMORRIS e MAH, 1980; HO e KELLER, 1987)). A aproximação realizada para resolução do balanço de massa e energia para um sistema de multicomponentes utilizando pseudobinário, agrupando os componentes em chave leve e pesada (FONYO, 1974; DHOLE e LINNHOFF, 1993). Os cálculos solucionando o sistema que gera o resultado do balanço de massa e energia podem ser realizados considerando para base do cálculo, ou topo ou o fundo da coluna (DHOLE e LINNHOFF, 1993). No caso neste trabalho os cálculos serão feito a partir do topo.

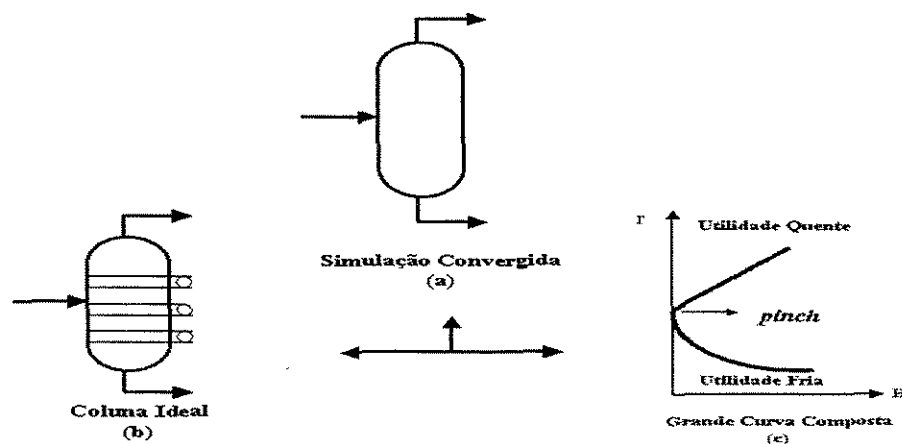


Figura 2-7: Procedimento para obtenção da GCCC.

O perfil reversível de uma coluna é obtido com o cálculo prato-a-prato através de dados como temperatura, vazões mínimas de líquido e vapor, entalpias mínimas de líquido

e vapor, calculando assim a entalpia deficitária. Assim, adotando os parâmetros de otimização, vários casos serão simulados e analisados com o objetivo de obter o melhor perfil do ponto de vista de consumo de energia. A idéia é comparar a condição mínima com a coluna real e através de modificações feitas nesta última, reduzir as perdas de energia.

Considera-se que neste perfil o estágio opera reversivelmente, ou seja, sem a existência de forças motrizes para transferência de calor e massa, onde os valores das correntes de entrada e saída do estágio são iguais. Conforme a Figura 2-8, onde na coluna está ilustrada uma bolha exemplificando que a corrente de vapor que entra nesse estágio está em equilíbrio com o líquido que deixa este estágio representados pela eq. (2-1) e (2-2). Portanto, os dados extraídos das correntes de entrada e saída serão do referentes ao mesmo estágio de temperatura.

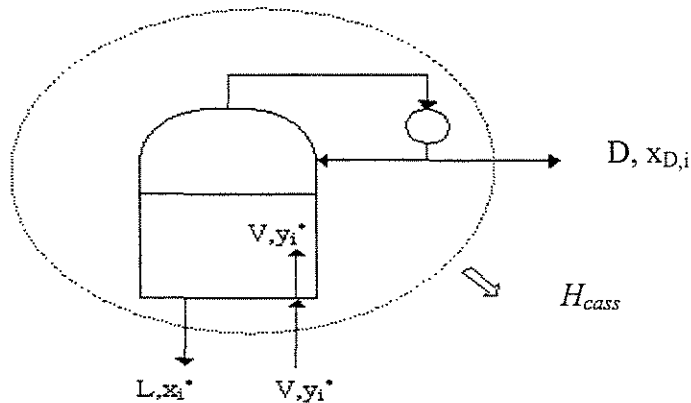


Figura 2-8: Desenho de uma bolha de um estágio na coluna.

Desenho de uma bolha de um estágio na coluna, Figura 2-8, exemplificando que as composições das correntes de entrada e saída, para um estágio reversível, são iguais. A coluna opera em uma maneira completamente reversível, ou seja, a condição de reversibilidade da coluna implica a inexistência de forças motrizes para transferência de massa e energia, que não há queda de pressão ao longo da coluna.

$$L_{min} \cdot x_{cl} - V_{min} \cdot y_{cl} = D \cdot x_{D,cl} \quad \text{eq. (2-1)}$$

$$L_{min} \cdot x_{cp} - V_{min} \cdot y_{cp} = D \cdot x_{D,cp} \quad \text{eq. (2-2)}$$

- em que:

cl: componente chave-leve (componente mais volátil ou o agrupamento de componentes, estágio-a-estágio, que formarão o chave-leve para solução das equações para sistemas multicomponentes).

cp: componente chave-pesado (componente menos volátil ou o agrupamento de componentes, estágio-a-estágio, que formarão o chave-pesado para solução das equações para sistemas multicomponentes).

O procedimento de resolução de cálculo do balanço de massa e energia pode ser realizado de 2 formas. Neste trabalho foi considerado o procedimento do topo ao fundo, Figura 2-8. Estes balanços porém, podem ser feitos do fundo em direção ao topo, onde as equações 2-1 e 2-2 passam a ser respectivamente:

$$L_{min} \cdot x_{cl} - V_{min} \cdot y_{cl} = B \cdot x_{B,cl} \quad \text{eq.(2-3)}$$

$$L_{min} \cdot x_{cp} - V_{min} \cdot y_{cp} = B \cdot x_{B,cp} \quad \text{eq.(2-4)}$$

O procedimento de calculo é do topo ao fundo da coluna, Figura 2-9. A resolução deste sistema de equações gera os valores das vazões mínimas de líquido e vapor necessárias para calcular as entalpias mínimas de líquido e vapor mostradas pelas equações (2-1) e (2-2). Calculando as entalpias mínimas de vapor e líquido em cada estágio, utilizando os valores das entalpias molares de cada corrente. Depois o próximo passo é a construção do perfil reversível da coluna.

$$H_{v,min} = H_v \cdot V_{min} \quad \text{eq.(2-5)}$$

$$H_{l,min} = H_l \cdot L_{min} \quad \text{eq.(2-6)}$$

Será calculado então, o déficit de entalpia em cada estágio, ou seja, a condição mínima termodinâmica operacional de cada estágio, considerando o tipo de condição

térmica utilizada:

- Acima da alimentação

$$H_{def} = H_{l,min} - H_{v,min} + H_{dist} \quad \text{eq.(2-7)}$$

- No estágio da alimentação e abaixo do estágio da alimentação:

$$H_{def} = H_{l,min} - H_{v,min} + H_{dist} - H_{alim} \quad \text{eq.(2-8)}$$

- Construção da Grande Curva Composta da Coluna.

$$H_{GCCC} = Q_{cond} + Q_{int} + H_{def} \quad \text{eq.(2-9)}$$

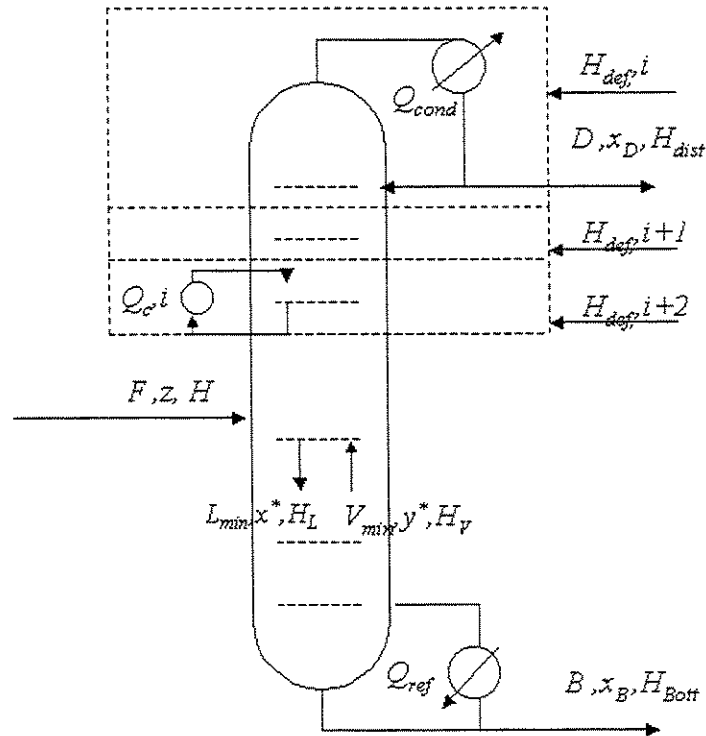


Figura 2-9: Procedimento de cálculo começando do topo da coluna.

O *DIST2K* é um programa desenvolvido (ZEMP, 1994) baseado no método de cálculo de Naphtali-Sandholms, que utilizou as equações de estado de estado de Peng-Robinson para calcular as propriedades físicas. As propriedades físicas, no caso, são perfis de temperatura, pressão, composição, vazão, entalpia e entropia, necessárias para os cálculos. Na simulação da coluna manteve-se o valor da recuperação constante variando a faixa do refluxo.

A modelagem acima descrita foi implementada utilizando a linguagem *Fortran95*. Neste trabalho é calculado o perfil reversível da coluna para sistemas binários e multicomponentes. Este perfil permite a identificação de excesso de refluxo, condição térmica não-otimizada e a viabilidade de utilizar trocadores intermediários de calor, dentro de uma análise termodinâmica.

2.4. Uso da GCCC na Otimização Colunas de Destilação

No tópico anterior foi mostrado que a partir de dados de um perfil de coluna (real ou simulada) obtém-se um perfil similar ao de uma coluna reversível (descrevendo o perfil de consumo/rejeição de energia). O perfil reversível de uma coluna apresenta características que permitem concluir modificações interessantes numa análise para diminuição do consumo de energia de uma coluna.

A otimização de colunas de destilação está diretamente relacionada com a escolha mais conveniente de parâmetros como condição térmica da alimentação, razão de refluxo e trocadores laterais. Esta metodologia proposta mostra que o estudo de um perfil *entalpia-temperatura* de uma coluna de destilação pode identificar, para os fatores anteriormente citados, qual a configuração da coluna que proporciona maior eficiência termodinâmica. É possível identificar qual desses parâmetros poderá ser apropriado para um determinado sistema de estudo.

Agora serão aplicado os conceitos estudados no capítulo anterior para sistemas de separação onde as modificações para otimização seguem a seguinte seqüência:

- Localização da alimentação.
- Redução do refluxo.

- Condição térmica da alimentação.
- Trocadores laterais.

2.4.1. Posição da Alimentação

A Figura 2-10 mostra um exemplo do uso da GCCC na identificação de modificações apropriadas para uma coluna. Primeiramente, a posição do estágio da alimentação de uma coluna pode ser otimizada, começando assim os estudos da análise termodinâmica. Isto pode ser feito simulando várias vezes uma coluna, deslocando a posição do estágio da alimentação, observando o impacto no consumo de energia.

Perfis com o posicionamento da alimentação incorreto mostram uma configuração apresentando um patamar na região da alimentação. A Figura 2-10 contém 3 perfis. O primeiro gráfico, Figura 2-10 (a), mostra um patamar localizado entre a região da alimentação e retificação. Este patamar está localizado na seção de retificação e a presença deste patamar indica que a alimentação foi muito deslocada em direção ao topo, sendo necessário deslocá-la em direção ao fundo da coluna. O mesmo se aplica ao segundo gráfico, Figura 2-10 (b). O segundo perfil apresenta um comportamento oposto, ou seja, o patamar é localizado entre a alimentação e a seção de esgotamento. No caso seria ideal deslocar a alimentação em direção ao estágio da alimentação.

A Figura 2-10 (c) mostra que posicionando a alimentação no estágio ótimo, o consumo de energia da coluna diminui significativamente. O perfil com o estágio ótimo da alimentação apresenta a ausência de patamar e um consumo de energia menor Figura 2-10 (c).

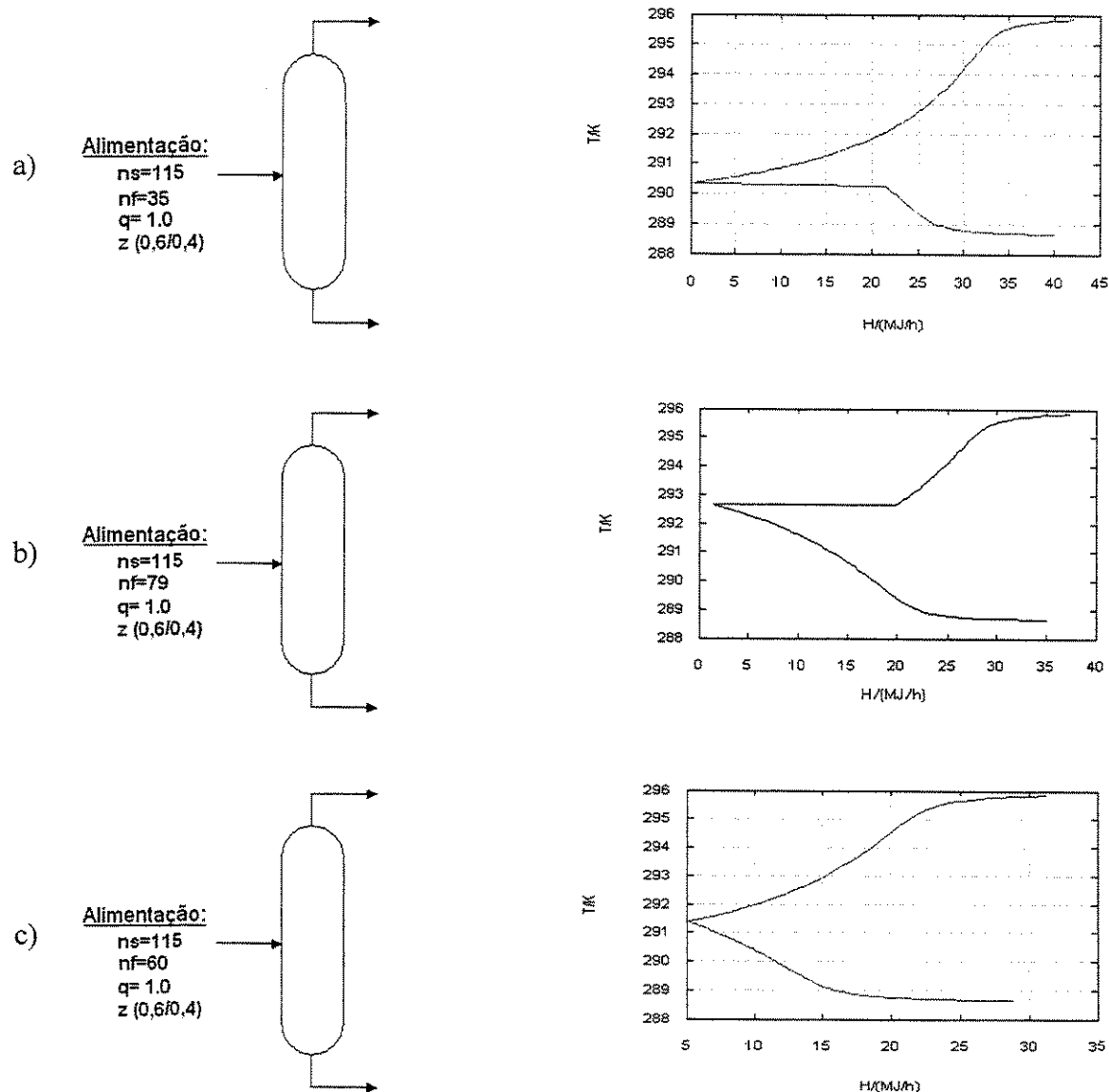


Figura 2-10: Estes casos foram simulados em uma coluna de 115 estágios, separando propeno de propano. a) a alimentação no estágio 35 a partir do topo. b) a alimentação no estágio 79 a partir do topo. c) a alimentação no estágio 60 (estágio ótimo).

2.4.2. Aumento do Número de Estágios

No perfil reversível, a distância horizontal entre o eixo vertical e o ponto *pinch*, indica a margem para a redução do refluxo na coluna, Figura 2-11. Quando o refluxo é reduzido pela adição do número de estágios, a *GCCC* se deslocará em direção ao eixo de temperatura. Numa coluna existente o refluxo pode ser otimizado pela adição de estágios

ou por aumento da eficiência dos estágios existentes. Depois da redução do refluxo, a próxima modificação é para avaliar o escopo para preaquecimento ou pré-resfriamento da alimentação.

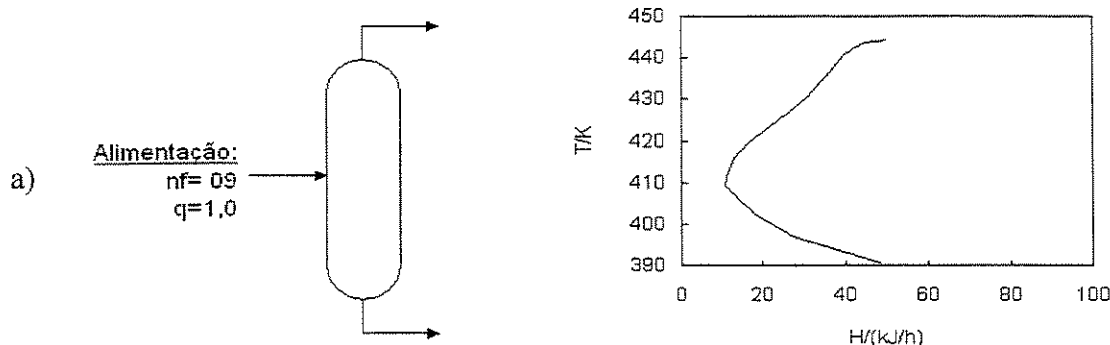


Figura 2-11: Redução de refluxo.

2.4.3. Condição Térmica da Alimentação

Após ao aumento do número de estágios, mudança do posicionamento da alimentação, se ainda identificada uma região plana na parte superior ou inferior da curva, na região da alimentação, o próximo parâmetro a ser estudado será a mudança da condição térmica da alimentação. A extensão dessa região indica aproximadamente, o escopo para o tipo de condição que pode variar a vapor super aquecido, vapor saturado, duas fases, líquido saturado, líquido sub resfriado.

A Figura 2-12 mostra dois casos simulados com o sistema equimolar benzeno-tolueno. No caso da Figura 2-12 (a), o deslocamento da curva situada na parte superior da curva (sinalizado com a seta) indica uma possibilidade de ser utilizar o preaquecimento da alimentação. Já na Figura 2-12 (b) apresenta o mesmo comportamento, mas na região abaixo da alimentação indicando uma possibilidade de usar o sub resfriamento.

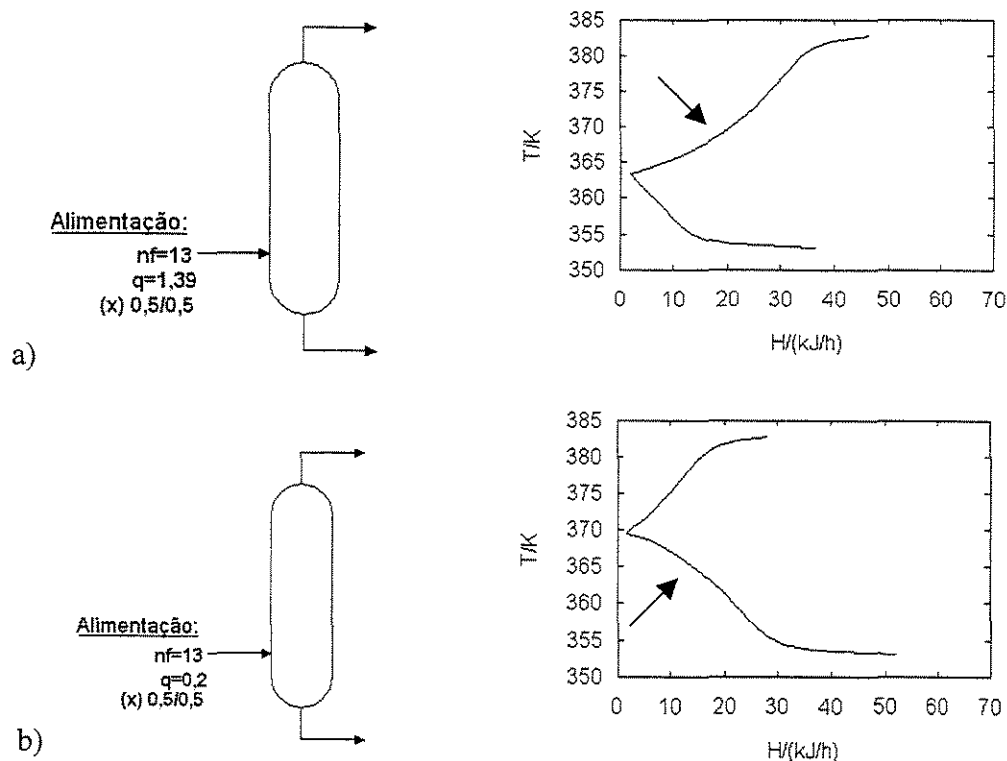


Figura 2-12: Condição térmica. a) escopo para pré aquecer. b) escopo para sub resfriar.

2.4.4. Alocação de Trocadores Intermediários de Calor

Numa análise onde propostas de modificação para uma determinada coluna são identificadas, estas modificações seguem uma sequência. A configuração de um gráfico pode indicar várias modificações para uma determinada coluna. Entretanto, a cada modificação realizada, a mudança da configuração do perfil indicará as próximas modificações são desnecessárias ou não.

◦

No caso onde as mudanças como a alimentação, aumento do número de estágios, tipo da condição térmica ainda indicam escopo para modificações o uso de condensadores e refeedores intermediários são indicados. Na Figura 2-13 (a), sistema equimolar benzeno-tolueno, existe um escopo para alocação de um condensador intermediário identificado pela acentuada curva que percorre do *pinch* até a parte inferior da curva (região onde as temperatura são menores). A Figura 2-13 (b) mostra um caso simulado com sistema não-equimolar benzeno-tolueno, onde no perfil aparece uma margem para a alocação de

refervedor intermediário, identificada pela acentuada curva que vai do *pinch* até a parte superior onde está localizadas as maiores temperaturas. Estes recursos, no entanto, somente são utilizados quando a mudança da condição térmica não otimiza a coluna. Através do gráfico é estimada a carga térmica intermediária para a alocação do trocador.

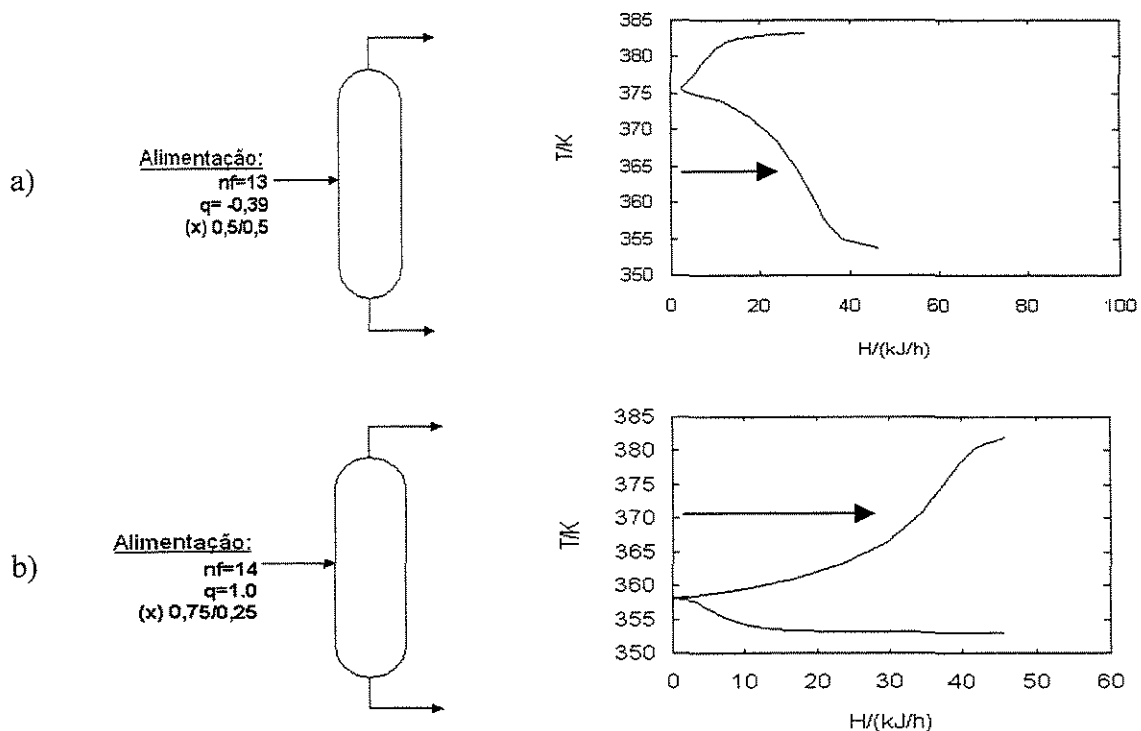


Figura 2-13: Escopo para alocação de trocadores intermediários.

A alocação de trocadores intermediários permite fornecer energia a uma temperatura mais baixa e recuperar a uma temperatura mais alta. No próximo tópico será descrito a esquematização do procedimento de análise para os sistemas de separação, utilizando o perfil reversível.

2.4.5. Procedimento de Análise Adotado

Neste capítulo estes conceitos serão aplicados a sistemas de separação binários e de multicomponentes. A Figura 2-14 mostra a esquematização do procedimento adotado para análise. A seguir serão estudados os sistemas de separação escolhidos:

- benzeno-tolueno (0,25/0,75),
- benzeno-tolueno (0,5/0,5),

- benzeno-tolueno (0,7/0,25),
- propeno-propano (0,25/0,75),
- *n*-heptano, *n*-octano, *n*-nonano, *n*-decano, *n*-pentadecano (0,2/0,2/0,2/0,2/0,2).

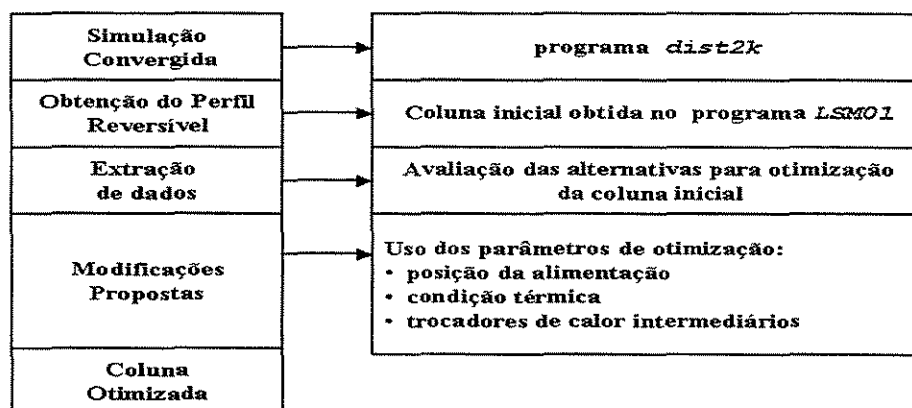


Figura 2-14: Esquematização do estudo utilizando o perfil reversível da coluna.

2.5. Sistema benzeno-tolueno

No início da aplicação do perfil reversível para sistemas de separação será utilizado um sistema ideal de separação. Para o sistema benzeno-tolueno, os dados de entrada serão utilizados para a obtenção da coluna real uma razão de refluxo estabelecida entre 5% a 20% acima da razão de refluxo mínima (LIU, MCGEE E EPPERLY,1987). O refluxo será fixado em de 20% acima do refluxo mínimo. O procedimento de análise do benzeno-tolueno começou separando-o em sistemas equimolares e não-equimolares. O objetivo de separar em sistemas equimolares e não-equimolares é identificar qual influência que a composição na alimentação pode exercer no comportamento do perfil. Respectivamente serão estudados os sistemas cuja a alimentação apresente as seguintes composições: (0,25/0,75), (0,5/0,5) e (0,75/0,25).

Para gerar a coluna convergente para o programa *LSM01*, o *dist2k*, necessita dos valores de composições da alimentação, refluxo, pressão e recuperação no topo do componente mais volátil definidos em seus dados de entrada. A determinação do refluxo mínimo, número de estágios será calculada pelo programa *dist48* ZEMP (1998), que é

um programa que calcula uma estimativa inicial dos parâmetros de uma coluna de destilação, se baseando nas equações de FENSKE, GILLILAND e UNDERWOOD. Para o arquivo de entrada do *dist2k*, foram fixados para este sistema binário, uma recuperação no topo do componente mais volátil; no caso arbitrou-se 99%, pressão de 1 bar, condição térmica de líquido saturado e vazão na limentação de 1kmol/h para a coluna inicial.

2.5.1. Sistema equimolar benzeno-tolueno (0,5/0,5)

O sistema equimolar foi montado obedecendo uma taxa de refluxo para a coluna real fixada em 20% acima do refluxo mínimo. Conseqüentemente obtendo-se uma coluna de 26 estágios e pressão de 1 bar. Conforme foi mencionado antes a recuperação no topo do componente mais volátil foi fixada em 99% e condição térmica de líquido saturado. O caso inicial foi simulado numa coluna com 26 estágios e com a alimentação localizada no estágio 13 a partir do topo, Figura 2-15 (a).

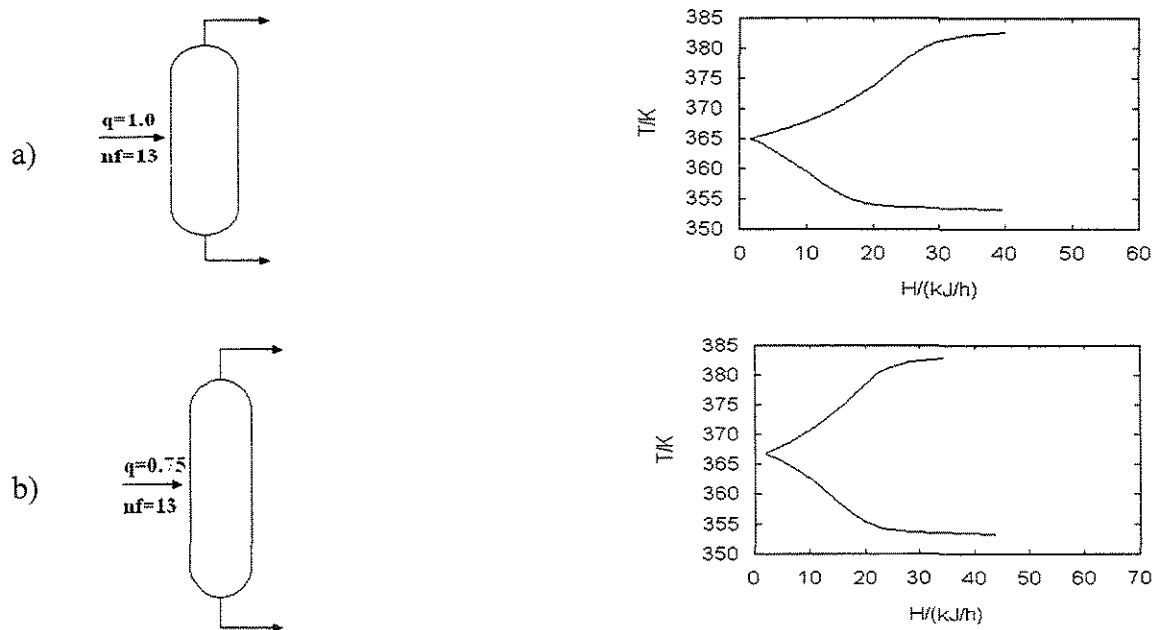


Figura 2-15: Modificações propostas para o sistema equimolar benzeno-tolueno.

O gráfico que não apresenta escopo para diminuição do refluxo ou alocação de trocadores é considerado como o caso ótimo, além de necessitar de um consumo menor de energia, Figura 2-15 (b). Portanto, a coluna simulada com condição térmica de 25% vaporizada e posicionamento da alimentação no estágio 13 apresentou melhores resultados.

O caso simulado com a condição térmica ótima, não apresenta escopo para alocação de trocadores intermediários. As utilidades intermediárias podem fornecer energia a colunas de destilação através de refeedores intermediários, reduzindo a carga do refeedor principal ou recuperar energia através de condensadores intermediários, reduzindo a carga do condensador principal, fazendo um reaproveitamento de energia do processo. Porém somente utilizadas quando o recurso de mudar a condição térmica não é suficiente para a otimização.

2.5.2. Sistema não-equimolar benzeno-tolueno (0,25/0,75)

No sistema não-equimolar (0,25/0,75), o perfil reversível será calculado numa coluna de 28 estágios, o posicionamento do estágio da alimentação localizado no centro da coluna, com uma recuperação no topo do componente mais volátil arbitrada em 99%, condição térmica de líquido saturado e pressão de 1 bar para todos os parâmetros de otimização. Pretende-se estabelecer quais são o posicionamento do estágio da alimentação, a condição térmica da alimentação e a viabilidade de alocação de trocadores intermediários de calor (condensador ou refeedor intermediário) adequados para o caso inicial. A Figura 2-16 (a) ilustra o caso inicial. Neste caso, surgiu um pequeno patamar na região da alimentação e a presença de um deslocamento da curva na parte inferior do perfil. Deslocando-se o estágio da alimentação para o estágio 10 a partir do topo, Figura 2-16 (b), o patamar situado na região da alimentação desaparece.

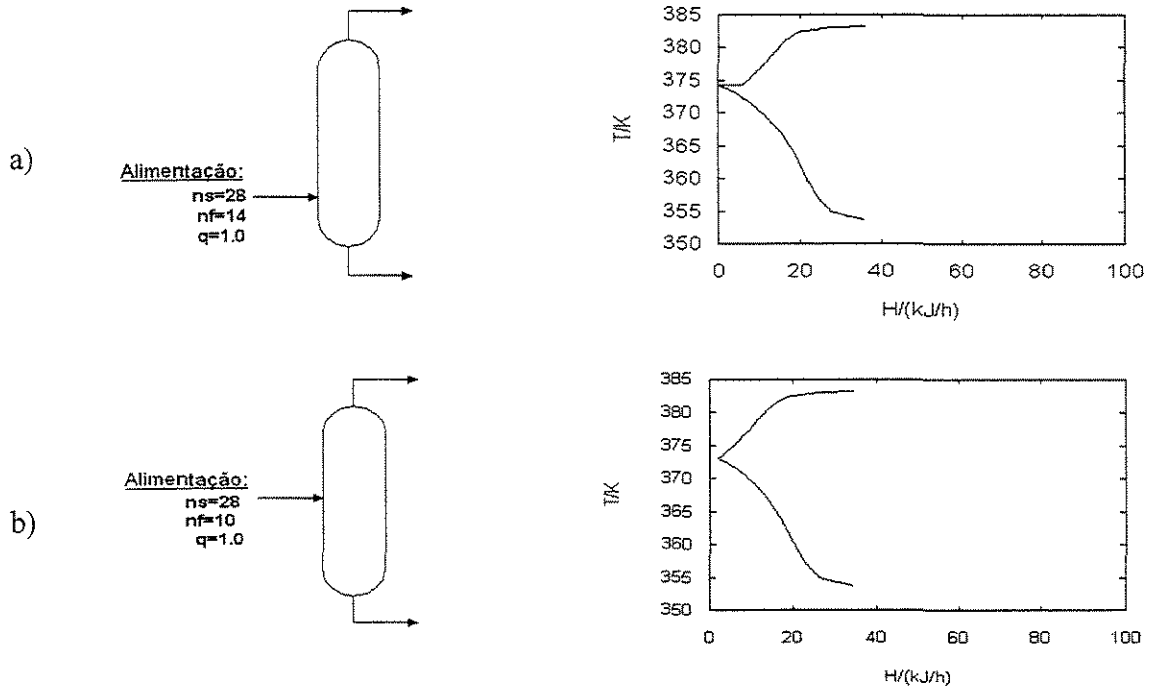


Figura 2-16: a) coluna inicial. .b) coluna otimizada.

Mantendo o número de estágios na coluna e preaquecendo, surge escopo para alocação de trocadores intermediários. No caso, o pré-aquecimento da alimentação, na Figura 2-17 (a) e Figura 2-17 (b), a parte inferior da curva desloca-se para direita dando margem para alocar um condensador intermediário. Aquecendo a corrente da alimentação, além de aumentar o consumo de energia das colunas, surge escopo para alocação de condensador intermediário e diminuição do refluxo para condição térmica 60% vaporizada e vapor saturado, mostrados na Figura 2-17.

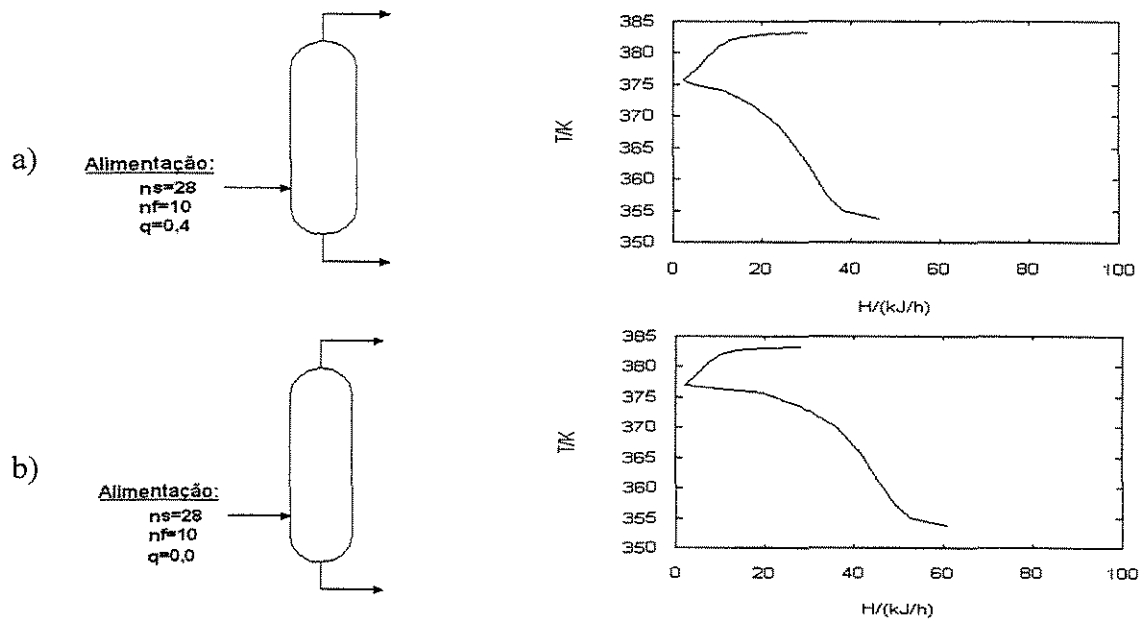


Figura 2-17: Colunas com condição térmica diferentes.

As utilidades intermediárias podem fornecer energia a colunas de destilação através de refeedores intermediários, reduzindo a carga do refeedor principal ou recuperar energia através de condensadores intermediários, reduzindo a carga do condensador principal. Porém, para este sistema não-equimolar o estudo com tanto o uso de preaquecimento da alimentação como alocação de trocadores laterais de calor torna-se desnecessário.

2.5.3. Sistema não-equimolar benzeno-tolueno (0,75/0,25)

O sistema não-equimolar (0,75/0,25), foi operado numa coluna com 28 estágios, operando com uma pressão de 1 bar. O procedimento para estudar a influência da alimentação no comportamento será idêntico ao que foi adotado para esse mesmo parâmetro para os dois casos estudados anteriormente.

A Figura 2-18 mostra o comportamento do perfil reversível, para diferentes posicionamentos do estágio da alimentação. O deslocamento da parte inferior da curva para direita, no sentido oposto ao do eixo de temperatura indica que na seção de exaustão estão os maiores déficits de entalpia.

Os gráficos da Figura 2-18 demonstram que é necessário utilizar outros parâmetros de otimização. Nos gráficos, há escopo para mudança do tipo de condição térmica. A mudança da condição térmica para vapor saturado modificou sensivelmente o comportamento do perfil, Figura 2-18 (c), desaparecendo o escopo para alocação de uma utilidade intermediária.

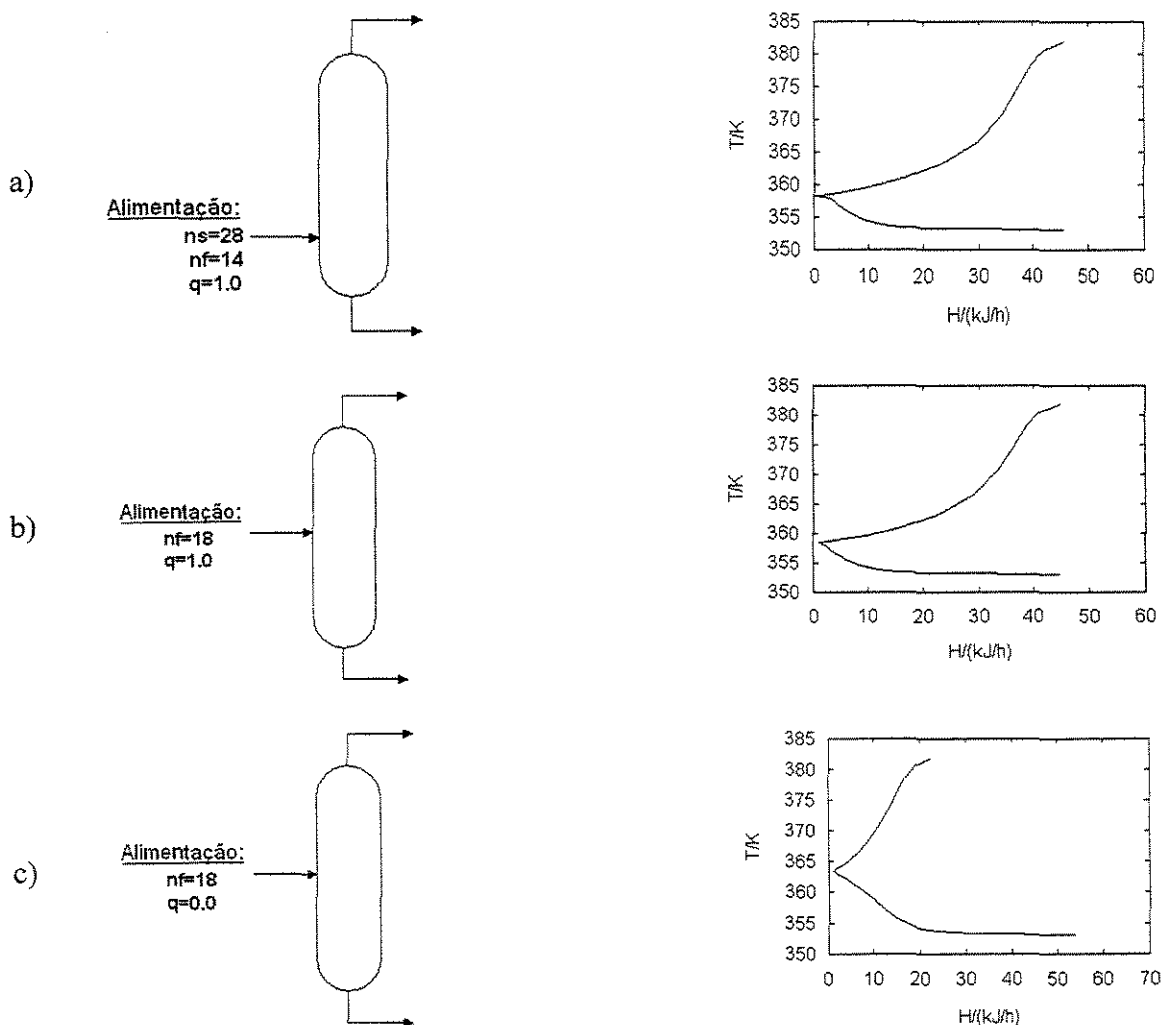


Figura 2-18: Influência do estágio da alimentação no comportamento dos perfis.

2.6. Sistema não-equimolar (0,6/0,4) propeno-propano

Inicialmente foi estudado um sistema de separação ideal e prosseguindo com a análise, agora os estudos serão direcionados para um sistema binário cujos os componentes apresentam características semelhantes, sendo classificado como de separação difícil. O motivo de se estudar outro sistema binário é verificar se as mesmas modificações propostas

serão semelhantes para um sistema de separação difícil. Arbitrou-se o propeno-propano também pela importância deste sistema na indústria.

2.6.1. Coluna inicial

Inicialmente estudou-se uma coluna retirada da literatura (HENLEY e SEADER,1981). Trata-se de uma coluna que apresentou as seguintes características descritas na Tabela 2-1. Os dados foram inseridos no programa *dist2k*. Estes dados são vazão, composição, refluxo, números de estágios, posição da alimentação na coluna, pressão e condição térmica. O estudo para o sistema não-equimolar propeno-propano com o parâmetro de posicionamento do estágio da alimentação foi desenvolvido numa coluna de 115 estágios. Na coluna inicial o estágio da alimentação está localizado na 79º estágio a partir do topo e estimativa de refluxo de 8,76.

<i>Propriedades</i>	<i>Alimentação</i>	<i>Topo</i>	<i>Fundo</i>
Vazão (kmol/h)	272,0	163,0	109,0
Carga térmica (MJ/h)		-34,9	37,4
Pressão (bar)	9,0	9,0	9,0
q	1,0	-	-
Fração molar			
propeno	0,6		
propano	0,4		

Tabela 2-1: Dados da coluna inicial.

O procedimento de análise para o sistema propeno-propano será propor com base na experiência adquirida pelo benzeno-tolueno, quais as modificações adequadas para obter a eficiência termodinâmica desta coluna, Figura 2-19.

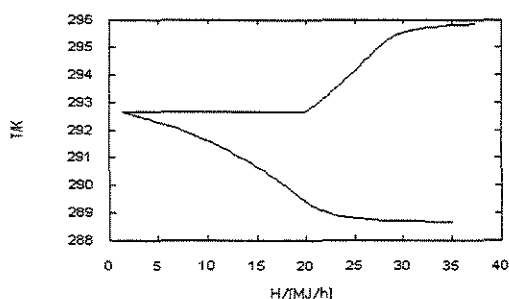


Figura 2-19: GCCC para o caso inicial.

A coluna inicial deste perfil, Figura 2-19, apresentou um patamar presente na região da alimentação que pode indicar que a coluna está com posicionamento da alimentação incorreto.

2.6.2. Análise

A Figura 2-20 mostra as modificações propostas para este sistema. A mudança de posicionamento da alimentação reduziu significativamente o consumo de energia da coluna. Entretanto, existe um escopo para redução de refluxo na região da alimentação. Os casos simulados com um aumento do número de estágios e com preaquecimento da alimentação mostraram um consumo ainda menor.

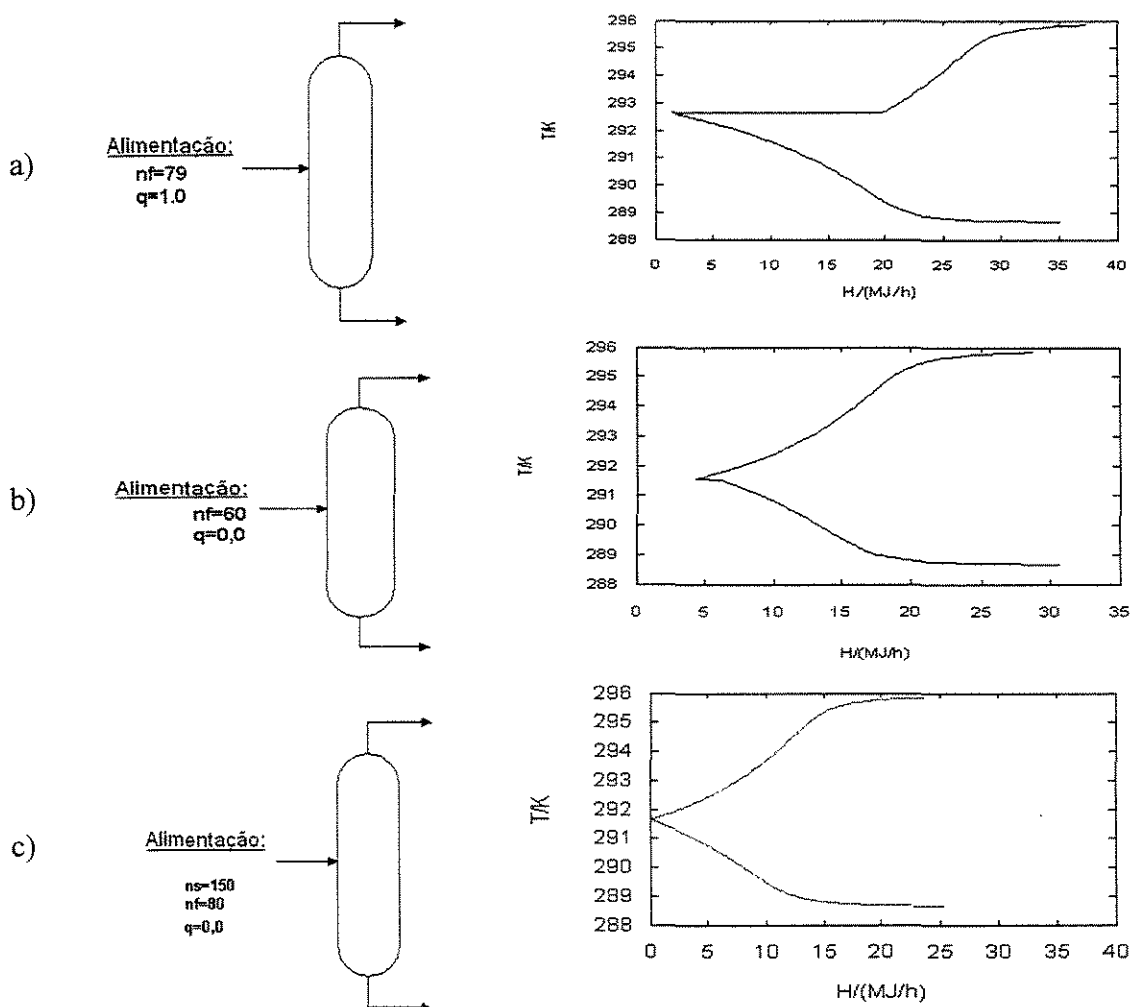


Figura 2-20: Colunas. a) coluna inicial. b) caso otimizado com $nf=60$ e condição térmica da alimentação de vapor saturado. c) coluna com o aumento de 35 estágios.

No próximo item os estudos serão direcionados a sistemas multicomponentes.

2.7.Sistema Multicomponentes

Nesta nova etapa, os estudos serão direcionados para sistema de multicomponentes. Para o início da análise será utilizado um sistema composto por cinco componentes já estudado na literatura. Tanto para sistema binário como multicomponentes, Dhole adotou para resolução do perfil da coluna a partir de dados (perfil de temperatura, composição e vazão) obtidos de simuladores.

2.7.1. Coluna Inicial

Os componentes do sistema a serem estudados são: *n*-heptano, *n*-octano, *n*-nonano, *n*-decano, *n*-pentadecano. Este caso foi simulado inicialmente numa coluna contendo 18 estágios. A recuperação no topo do componente *n*-octano, é de 97%. A Tabela 2-2 expõe os dados desta coluna. Abaixo será demonstrada cada modificação proposta por DHOLE, mostrando com a análise exergética a influência destas modificações que foram propostas por DHOLE para este sistema.

<i>Propriedades</i>	<i>Alimentação</i>	<i>Topo</i>	<i>Fundo</i>
Vazão (kmol/h)	1000,0	398,0	602,0
Pressão (bar)	2,0	2,0	2,0
Temperatura (K)	373,0	413,3	476,8
Fração de vapor	0	1,0	0
Fração molar			
<i>n</i> -C7 (a)	0,2	0,502442	0,000003
<i>n</i> -C8 (b)	0,2	0,487419	0,010000
<i>n</i> -C9 (c)	0,2	0,010000	0,325601
<i>n</i> -C10 (d)	0,2	0,000038	0,332186
<i>n</i> -C15 (e)	0,2	0,000000	0,332211

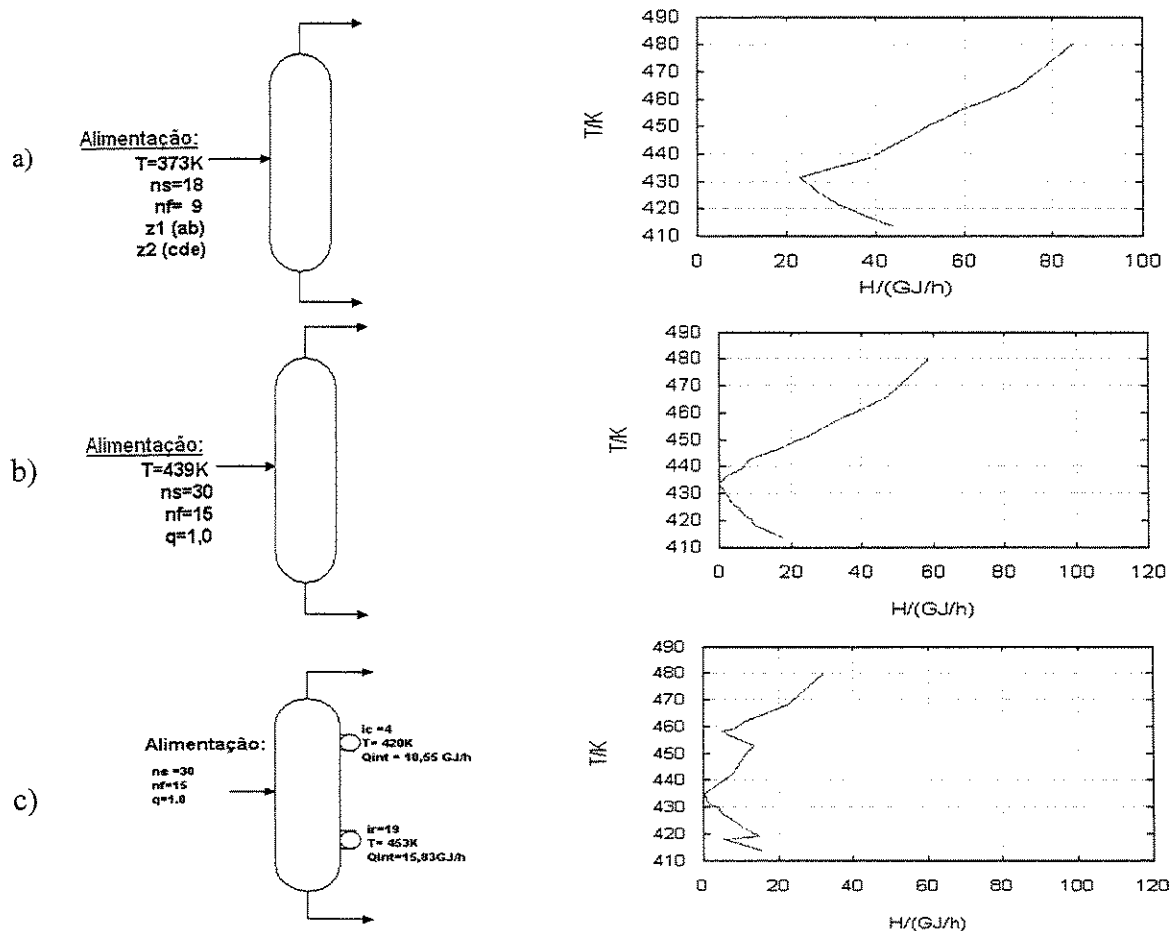
Tabela 2-2: Dados da coluna inicial.

Em sistemas multicomponentes ele fez uma aproximação utilizando o conceito de chave leve e chave pesado, item 1.1.3. Ou seja, os componentes são somados estágio-a-estágio formando um sistema pseudobinário. Dhole adota como critério que os componentes que devem formar a chave leve são aqueles que, na fase vapor, se

enriquecem no topo da coluna. Os demais componentes formarão a chave pesada. No caso, para este sistema, foi escolhido o pseudobinário (ab)/(cde).

2.7.2. Análise

A coluna inicial apresentou uma margem para redução de refluxo (aumentando o número de estágio). Esta margem é representada pela distância entre o pico da alimentação e o eixo da temperatura. Há escopo para preaquecimento da alimentação e a viabilidade de alocar trocadores intermediários de calor, através da margem existente entre o *pinch* da alimentação e o eixo de temperatura. A curva acentuada na região onde as temperaturas são maiores indicando um preaquecimento e uma possível alocação de trocadores intermediários.



2.7.3. Observação

Conforme o conjunto de chave leve e pesado escolhido para a resolução da coluna, o perfil ($T-H$) muda completamente exemplificado na Figura 2-22. Além disso, existe a dificuldade de determinar qual a combinação de chaves leve e pesada que deve ser utilizada num processo de otimização.

Dependendo da escolha do pseudo-binário as possíveis propostas de modificações para otimização são completamente diferentes. Na Figura 2-22 (a), há possibilidade de mudar a condição térmica introduzindo um preaquecimento e também o posicionamento da alimentação. Na Figura 2-22 (b) tem escopo para diminuição do refluxo, preaquecimento e alocação de dois trocadores (condensador e refeedor) intermediários. Na Figura 2-22 (c) nota-se que é necessário mudar a condição térmica da alimentação com um sub-resfriamento, diminuir o refluxo e mudar a posição da alimentação em direção ao fundo da coluna. Na Figura 2-22 (d), dois trocadores (condensador e refeedor) intermediários, redução do refluxo, um preaquecimento da alimentação. Na Figura 2-22 (e), diminuição do refluxo, e a alocação de um condensador e um refeedor intermediário. Na Figura 2-22 (f), diminuição do refluxo, mudança do estágio da alimentação e a alocação de um refeedor intermediário.

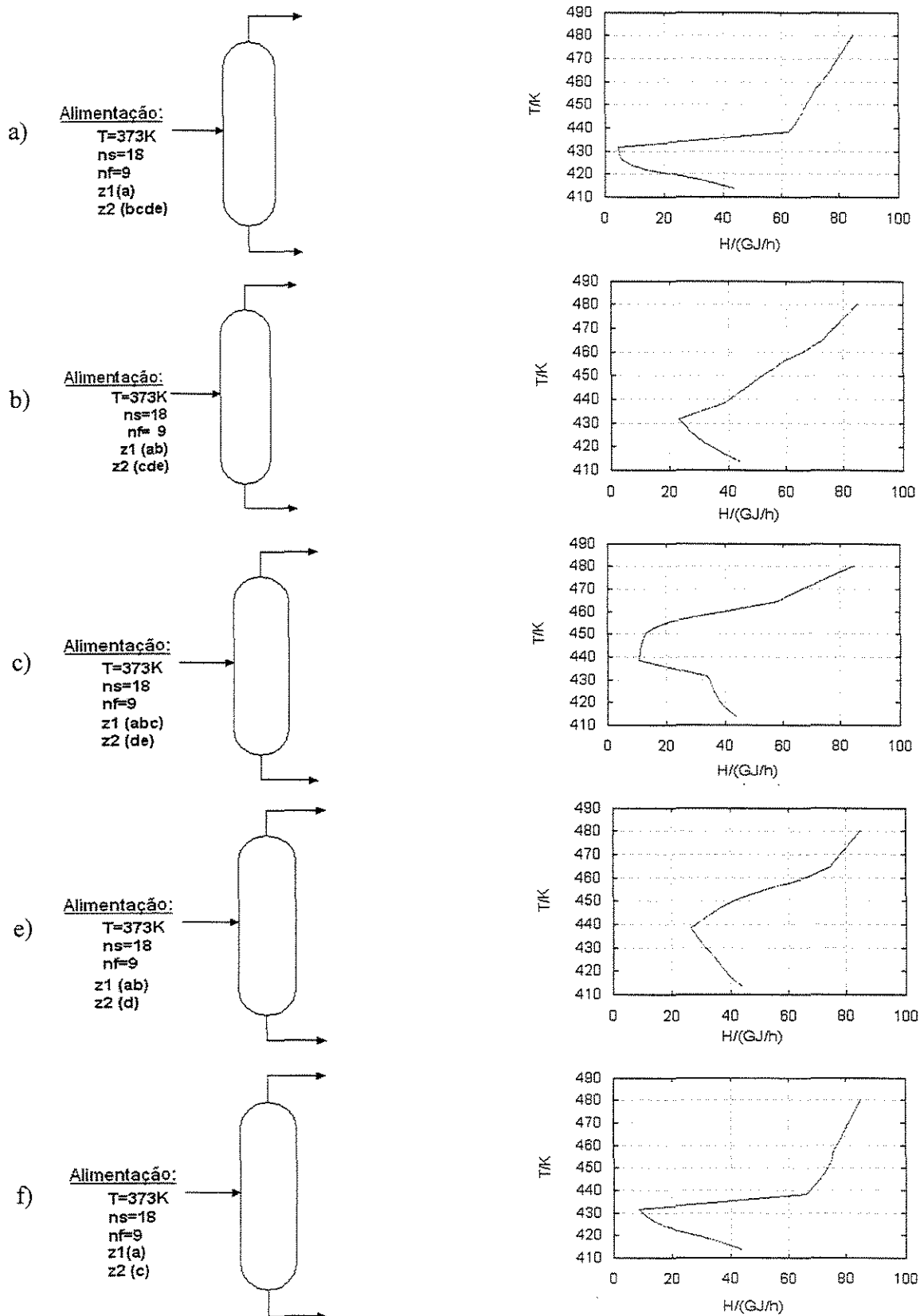


Figura 2-22: Comparação de diferentes combinações de pseudochaves para o perfil reversível para o sistema de multicomponentes em estudo.

2.8. Comentários e Conclusões

Os estudos mostraram que a análise realizada para sistemas binários e multicomponentes estudados neste capítulo serviram como exemplos na aplicação da análise energética, cuja a aplicação reduziu o consumo de energia dos sistemas estudados. Entretanto, nas análises realizadas com sistemas não equimolares benzeno-tolueno (0,75/0,25) e propeno-propano (0,6/0,4) as propostas de modificação apresentaram similares quanto à mudança da alimentação e preaquecimento. Entretanto para sistemas multicomponentes, a obtenção de um perfil reversível é realizada através de uma aproximação, com a formação de um pseudobinário, separando os componentes mais voláteis (chave leve) dos menos voláteis (chave pesada).

A Figura 2-22 demonstra várias combinações de chave leve e pesada deste sistema, que dependendo da escolha de uma delas, as propostas de modificação para a otimização deste sistema são completamente diferentes uma da outra. No trabalho onde serão comparadas duas metodologias diferentes, os outros pseudobinários também serão considerados. O intuito é averiguar se o pseudobinário escolhido através do critério determinado por Dhole poderá entrar em conflito quando analisado em conjunto com o perfil de perdas de exergia, ou seja, se as propostas de modificação para este sistema poderão ser diferentes.

No próximo capítulo, os sistemas de separação estudados neste capítulo também serão utilizados, mas com a análise exérgica (uma ferramenta baseada na segunda Lei da Termodinâmica). O estudo destes sistemas com a análise energética e a análise exérgica servirá como fundamento para a análise entre os métodos.

Capítulo 3. Perfil de Perdas de Exergia

3.1.Introdução

No último capítulo, foram realizados estudos baseados no conceito da aplicação da condição mínima termodinâmica para colunas operando em condições reais. Estes conceitos foram aplicados a sistemas de separação binários e multicomponentes.

Apesar de muito difundida, a análise energética ou da primeira lei da termodinâmica (balanço de energia) estudada no capítulo anterior em sistemas de separação não contabiliza a qualidade da energia que se está perdendo e nem onde ocorre às irreversibilidades dos processos, ou seja, não identifica as fontes nem os motivos.

Uma nova proposta de análise tem possibilitado a avaliação e otimização de processos térmicos é a *Análise Exergética*. A análise exergética é baseada no conceito de irreversibilidade e permite que as ineficiências de um processo sejam identificadas através da aplicação da 2ª Lei da Termodinâmica. Entretanto, o desenvolvimento principal da análise exergética tem sido na área de processos envolvendo calor e trabalho, sendo que pouco tem sido aplicado a processos com transferência de massa e reações (LINNHOFF, 1993b).

A análise energética continua tendo sua validade para diagnosticar os sistemas térmicos, propor modificações a nível de utilidades. Entretanto, com a contribuição da segunda lei e com a ajuda da análise exergética pode-se ampliar essa avaliação. Para realizar uma avaliação exergética faz-se necessária inicialmente, a análise energética, com base no primeiro princípio. O método exergético permite:

- Uma melhor medida de avaliação da magnitude da exergia perdida.
- Localização da(s) seções termodinamicamente ineficientes de uma coluna de destilação.
- Propostas de modificações para otimização de processos químicos.
- Uma medida de qualidade (ou de desperdício) da energia sob o ponto de vista termodinâmico.

- Uma variável para definir a eficiência racional para o sistema de separação.

O método se baseia na análise termodinâmica de colunas de destilação através da propriedade termodinâmica *exergia*. Balanços de exergia aplicados a colunas de destilação determinam a sua eficiência termodinâmica. Isto fornece parâmetros para avaliação do quanto a eficiência da coluna se distancia da eficiência termodinâmica máxima (coluna reversível).

3.1.1. Conceito de exergia

Em 1956, Z. RANT propôs o termo exergia, (*exergie* – alemão), ou (*exergy* – inglês), sendo que estes radicais provenientes do grego. O radical *ex* representa o significado para fora e *ergon* de trabalho. Ele sugeriu que a palavra exergia seria válida para as temperaturas acima das condições ambientais e anergia para denominar a parte da energia que não pode ser aproveitada (não disponível), isto é:

$$\text{ENERGIA} = \text{EXERGIA} + \text{ANERGIA}$$

Portanto, energia é a soma de tudo aquilo que pode ser conversível em qualquer forma de energia do tipo potencial (exergia) ou energia do tipo útil, como a parte que não é conversível (anergia). Segundo RANT, “é a parte da energia que pode ser completamente convertida em qualquer outra forma de energia”.

No processo de destilação esse termo expressa o trabalho que poderia ser gerado ou consumido, levando em consideração os fluxos de energia entre o ambiente e o processo. Portanto, associado ao fluxo de calor trocado entre o ambiente e o processo existe um fluxo de exergia, definido pelo termo $Q_i \left(1 - \frac{T_i}{T_0} \right)$.

No processo de destilação pode-se considerar duas hipóteses. A primeira é um processo operando reversivelmente, onde não há trabalho perdido, pois considera que o estágio está livre de forças motrizes de transferência de massa e energia. Já para processos irreversíveis onde são consideradas as perdas ocorridas pela transferência de massa e calor, a coluna apresenta um maior consumo de exergia com perdas termodinâmicas, Figura 3-1.

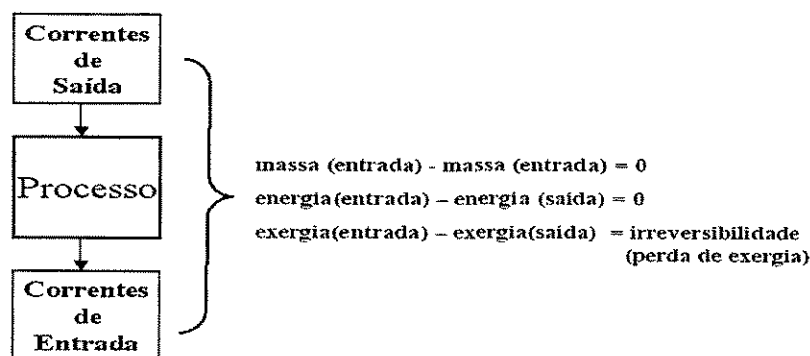


Figura 3-1: Irreversibilidades de um processo.

Uma perda de exergia representa a perda de oportunidade de produção de trabalho útil, ou seja, o trabalho perdido na coluna resulta em um processo termodinamicamente ineficiente.

3.2. Balanço de Exergia numa Coluna

O balanço de trabalho para um processo de separação sob estas condições foi apresentado por DENBIGH (1956), e estendido por HENLEY e SEADER (1981) com a introdução da grandeza *exergia*. O balanço de exergia tradicionalmente utilizado para uma coluna é operado sob condições reais em cada estágio. Dessa forma, a irreversibilidade termodinâmica de cada estágio, pode ser calculada, e as seções de baixa eficiência termodinâmica identificadas. Esta metodologia estende o conceito de irreversibilidade (e balanço de exergia) a cada estágio da coluna. As correntes de líquido e vapor que se encontram num estágio possuem exergia térmica e exergia de composição. No contato entre as fases, a corrente de vapor é parcialmente condensada, diminuindo o seu conteúdo de exergia térmica. A corrente líquida é parcialmente vaporizada, aumentando o seu conteúdo exergético térmico, mostrado na Figura 3-2. O balanço de exergia de um estágio típico é ilustrado na Figura 3-2: o vapor ascendente, ao entrar em contato com o líquido descendente, transfere energia sob forma de calor, reduzindo a sua temperatura e o seu conteúdo exergético. O calor liberado (e também parte da exergia) é utilizado para aquecer o líquido até a temperatura do estágio.

O balanço de exergia para este processo mostra um excedente de exergia, chamada de exergia térmica. Simultaneamente, ao processo de transferência de calor, ocorre também

um processo de separação no estágio, com o vapor se enriquecendo com o componente mais volátil.

Este processo de transferência de massa necessita de exergia (exergia de separação), que é fornecida pela exergia térmica disponível no estágio. Já diferença entre a exergia térmica disponível e a exergia de separação necessária é a exergia perdida neste estágio, sendo este, portanto, uma medida do grau de irreversibilidade.

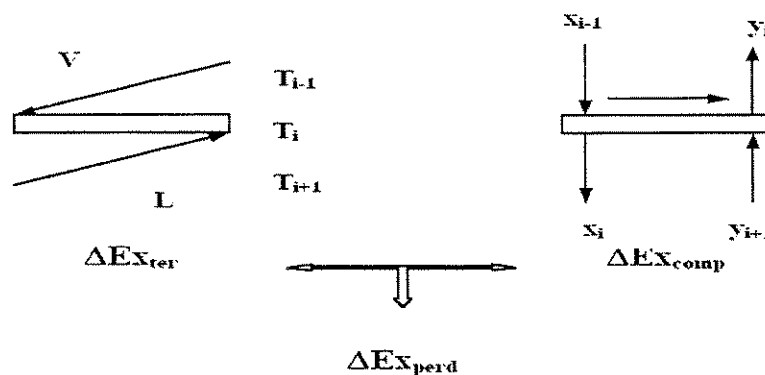


Figura 3-2: Balanço de exergia no estágio.

Foi mostrado por ZEMP (1994) que não somente o balanço global de exergia da coluna de destilação, mas também o balanço de exergia em cada estágio da coluna é necessário para sua otimização. O estudo de um perfil de perdas de exergia montado a partir de balanços de exergia em cada estágio de uma coluna de destilação, permite identificar as seções termodinamicamente eficientes através de uma distribuição mais uniforme de forças motrizes ao longo da coluna o que leva a uma coluna mais eficiente (ZEMP, 1994). A principal vantagem do novo método é a identificação de seções de colunas termodinamicamente ineficientes.

3.2.1. Modelagem matemática do perfil de perdas de exergia

Uma coluna de destilação recebe calor do sistema de utilidades, no refeedor e rejeita calor no condensador. Existe, então, para este caso uma certa quantidade de energia fornecida à coluna (refeedor) e uma certa quantidade de exergia recuperada da coluna (condensador). A exergia fornecida pelas utilidades é dada pela eq.(3-1).

Já as perdas de exergia que ocorrem no interior do condensador e refulvedor, devido à condensação e vaporização das correntes internas de vapor e líquido da coluna, têm que ser consideradas.

$$Ex_{util} = Ex_{cond} + Ex_{ref} + Ex_{troca\,dor\,de\,calor} \quad eq.(3-1)$$

A variação de exergia das correntes, Ex_{corr} , é constante e o único meio de diminuir-se a quantidade de exergia fornecida pelo sistema de utilidades Ex_{util} é diminuindo-se a exergia perdida.

$$Ex_{corr} = Ex_{destilado} + Ex_{prod.de\,fu\,ndo} - Ex_{alimenta\,ção} \quad eq.(3-2)$$

A variação de exergia das correntes é a mesma, pois o trabalho mínimo não depende do processo de separação, e sim somente dos estados de entrada e saída do processo, então o único meio de diminuir a quantidade de exergia fornecida pelo sistema de utilidades é diminuir sua exergia perdida e conseqüentemente aumentar sua eficiência termodinâmica (DE FARIA, 1996).

A aplicação do balanço de exergia a este caso mostra uma comparação entre o trabalho mínimo necessário para a separação (exergia mínima) e o trabalho real fornecido pelo sistema de utilidades (exergia fornecida) em duas colunas. A subtração entre as somas dos conteúdos exergéticos totais das correntes de entrada e a soma dos conteúdos exergéticos de saída é igual a somatória de perda de exergia dos estágios, Figura 3-3. O principal objetivo da aplicação do balanço global de exergia a uma coluna é estabelecer o quanto de exergia está sendo desperdiçado, ou seja, o quanto a coluna pode ser mais eficiente.

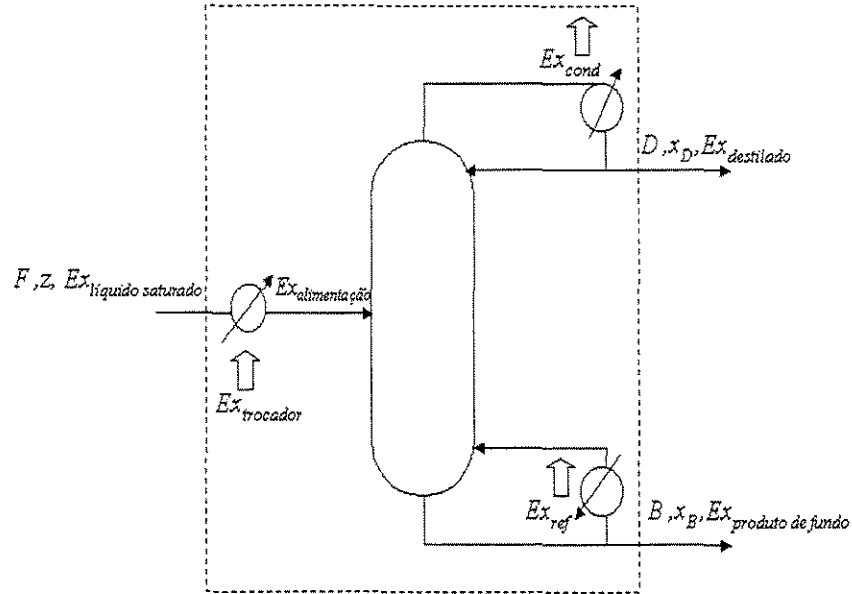


Figura 3-3: Balanço de exergia na coluna.

Entretanto, a simples aplicação do balanço global de exergia não identifica que tipo de modificações que devem ser feitas na coluna para que a sua eficiência termodinâmica aumente. Exergia é perdida pela existência de irreversibilidades (forças motrizes) no processo.

Numa coluna de destilação existe transferência de massa e energia em cada estágio, em consequência as forças motrizes de transferência de massa e de energia estão presentes em cada um desses estágios. Portanto, cada estágio possui uma perda de exergia e a perda total é a soma das exergias perdidas em cada estágio da coluna.

$$Ex_{perd} = Ex_{util} - Ex_{corr} = \sum Ex_{perd,i} \quad \text{eq.(3-3)}$$

A presença de forças motrizes num processo faz com que irreversibilidades sejam geradas, implicando em perdas de exergia. Um estudo detalhado das forças motrizes em colunas de destilação vai mostrar a relação entre estas e a eficiência da coluna. Para isto, as forças motrizes serão estudadas estágio a estágio.

- No estágio do condensador:

No processo de troca térmica entre o reator da coluna e utilidades (ou

condensador e utilidades), existe uma diferença de temperatura finita entre os fluidos do refeedor (ou condensador) e das utilidades. Isto faz com que exista uma força motriz de transferência de exergia e existam irreversibilidades. Se as temperaturas do condensador T_{cond} e do sistema de utilidades T_f tiverem valores próximos, a perda de exergia será nula. Quanto maior for a diferença entre a T_{cond} e T_f maior será a perda de exergia. Para o caso do refeedor estas perdas também ocorrem, quanto maior a diferença de temperatura entre o fluido do sistema de utilidades e refeedor maior a perda de exergia. As correntes de entrada e saída de um condensador total, as respectivas temperaturas de cada corrente e o calor recuperado são mostrados na Figura 3-4 (DE FARIA,1996).

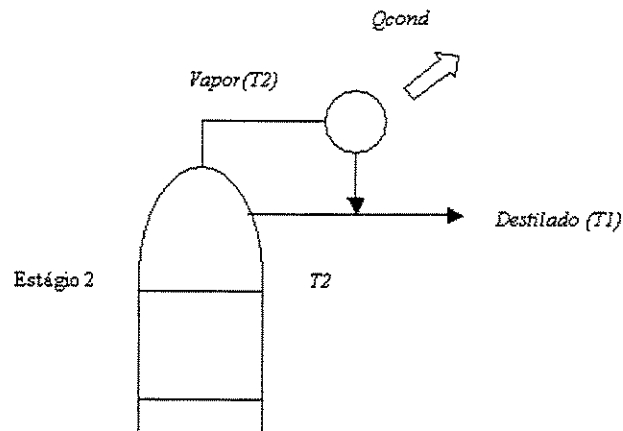


Figura 3-4: A carga do condensador não é recuperada a uma temperatura constante.

Nesta figura, o vapor que entra no condensador está na temperatura do estágio dois, T_2 . O calor é recuperado Q_{cond} e tanto o destilado quanto o refluxo são líquidos a uma temperatura T_1 , que é menor que T_2 . Portanto, Q_{cond} não é recuperado a uma temperatura constante. Como Q_{cond} não é extraído a temperatura constante, o cálculo de perdas de exergia é dado pela equação:

$$\Delta Ex_{perdidacond} = (\Delta Ex_{vaporentra}) - \left(\Delta Ex_{destilado} + \Delta Ex_{refluxo} + Q_{cond} \left(1 - \frac{T_0}{T_{cond}} \right) \right) \quad \text{eq.(3-4)}$$

- Se o condensador não operar a temperatura constante, T_{cond} é dada pela eq.(3-5), pela média logarítmica entre T_1 e T_2 , ou seja, entre a temperatura do estágio logo abaixo do condensador e a temperatura do produto do topo:

$$T_{cond} = \left(\frac{T_1 - T_2}{\ln\left(\frac{T_1}{T_2}\right)} \right) \quad \text{eq. (3-5)}$$

- Acima e abaixo do estágio da alimentação, ou seja, em estágios que não tenha entradas ou saídas laterais de calor:

$$\Delta Ex_{perdida} = (\Delta Ex_{v,entra} + \Delta Ex_{l,entra}) - (\Delta Ex_{v,sai} + \Delta Ex_{l,sai}) \quad \text{eq.(3-6)}$$

- No estágio de alimentação ou em estágios onde existam saídas laterais de calor:

$$\Delta Ex_{perdida} = (\Delta Ex_{v,entra} + \Delta Ex_{l,entra} + \Delta Ex_{alim. liquido,entra}) - (\Delta Ex_{v,sai} + \Delta Ex_{l,sai}) \quad \text{eq.(3-7)}$$

- No estágio do refeedor:

Para o estágio onde está localizado o refeedor o balanço de exergia será realizado da mesma forma que no estágio do condensador. Aqui serão consideradas para o cálculo da média logarítmica, as temperaturas do fundo da coluna e a do estágio acima, obtendo-se a equação:

$$\Delta Ex_{perdida,ref} = \left(\Delta Ex_{l,entra} + Q_{ref} \left(1 - \frac{T_0}{T_{LM}} \right) \right) - (\Delta Ex_{produtodefundo} + \Delta Ex_v) \quad \text{eq.(3-8)}$$

A partir de dados de uma coluna convergida, com os perfis de temperatura, composição, vazão, entalpia e entropia o perfil de perdas de exergia é calculado.

3.3. Uso do perfil de perdas de exergia na otimização de colunas

A partir de dados de um perfil de coluna (real ou simulada) obtém-se um perfil que representa a distribuição das forças motrizes de transferência de massa e calor ao longo da coluna. O perfil de perdas de exergia apresenta características que permitem concluir modificações interessantes numa análise para diminuição do consumo de exergia de uma coluna. Esta diminuição é realizada através de uma redistribuição das perdas de exergia entre as seções da coluna, tornando-a termodinamicamente mais eficiente.

Esta otimização está diretamente relacionada com a escolha mais conveniente de parâmetros como posicionamento da alimentação, condição térmica da alimentação, alocação de trocadores de calor laterais. Esta metodologia proposta mostra que o estudo de um perfil *exergia-temperatura* de uma coluna de destilação pode identificar, para os fatores anteriormente citados, qual a configuração da coluna que proporciona maior eficiência termodinâmica. É possível identificar qual desses parâmetros poderá ser apropriado para um determinado sistema de estudo.

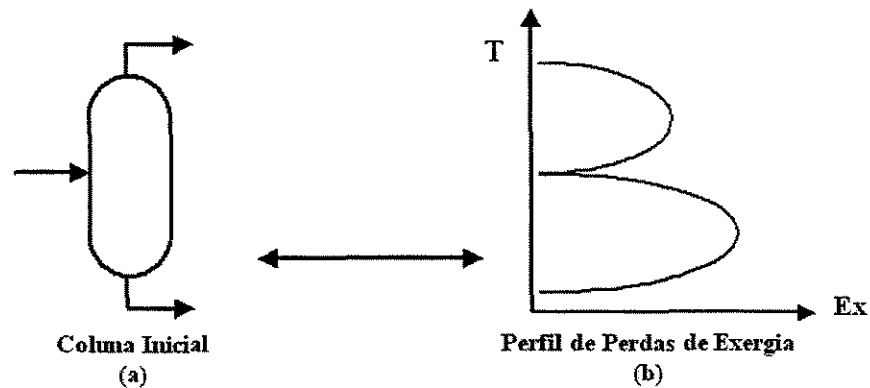


Figura 3-5: Obtenção do perfil de perdas de exergia.

Agora serão aplicados os conceitos estudados no capítulo anterior para sistemas de separação onde as modificações para otimização seguem a seguinte sequência:

- Localização da alimentação.

- Redução do refluxo.
- Condição térmica da alimentação.
- Trocadores laterais.

3.3.1. Posição da Alimentação

A posição do estágio da alimentação de uma coluna pode ser otimizada, começando assim os estudos da análise termodinâmica. Isto pode ser feito simulando várias vezes uma coluna, deslocando a posição do estágio da alimentação, observando o impacto na distribuição das forças motrizes entre as seções da coluna.

O perfil com a posição da alimentação adequada será aquele que não apresentar um patamar na região da alimentação. Este comportamento pode ser exemplificado pela Figura 3-6. Esta demonstra dois perfis. Estes casos foram simulados com a mesma condição térmica, porém com alimentação localizada em estágios diferentes da coluna.

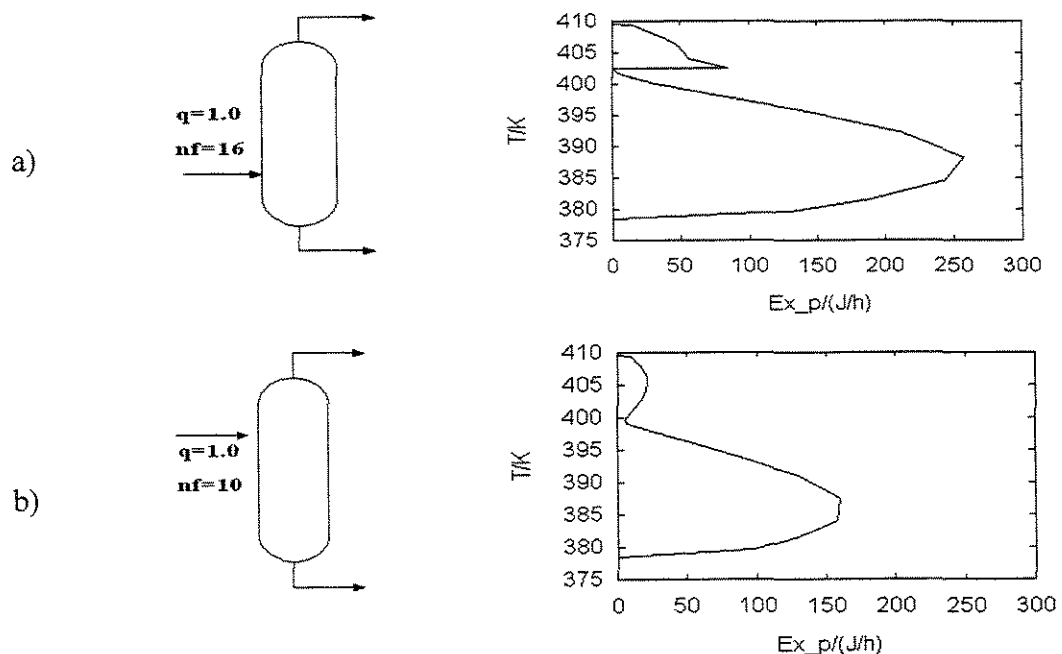


Figura 3-6: Estes casos foram simulados em uma coluna de 28 estágios (sistema benzeno-tolueno). a) alimentação no estágio 18 a partir do topo. b) alimentação no estágio 10 a partir do topo (estágio ótimo).

No próximo tópico, a alteração do tipo de condição térmica será estudada, bem como sua influência no perfil de exergia.

3.3.2. Aumento do número de estágios

O perfil reversível mostrou que a distância horizontal entre o eixo vertical e o ponto *pinch*, indica o escopo para a redução do refluxo na coluna. Quando o refluxo é reduzido resulta em direta economia de carga no estágio do condensador e do refeedor. Entretanto, para tal alternativa existe um custo econômico que só uma análise mais detalhada do processo pode determinar.

O que vale salientar que com aumento do número de estágios, uma otimização utilizando conceitos termodinâmicos torna-se desnecessária. O sistema multicomponentes estudado no capítulo anterior foi necessário um aumento de 12 estágios na coluna para otimizá-la. Mas com o conceito de exergia, pretende-se otimizar uma coluna sem precisar aumentar o número de estágios. O que numa análise econômica pode ser mais viável. Depois da mudança do posicionamento da alimentação, a próxima prioridade é para avaliar o escopo para preaquecimento ou sub-resfriamento da alimentação.

3.3.3. Condição térmica

Após a mudança do posicionamento da alimentação, o próximo parâmetro a ser utilizado será a condição térmica. Esta mudança aumenta as vazões internas na retificação e diminui as correntes internas na seção de esgotamento, ou vice-versa. Este caso pode ser exemplificado pela Figura 3-7. O primeiro caso indica uma coluna necessitando de um aumento nas vazões internas na retificação e uma diminuição na outra, Figura 3-7 (a). No caso esta coluna necessita de redirecionamento das perdas e simulando com condições que variaram de vapor super aquecido a líquido sub resfriado. O equilíbrio na distribuição das perdas ocorreu com uma condição térmica 25% vaporizada, Figura 3-7 (b).

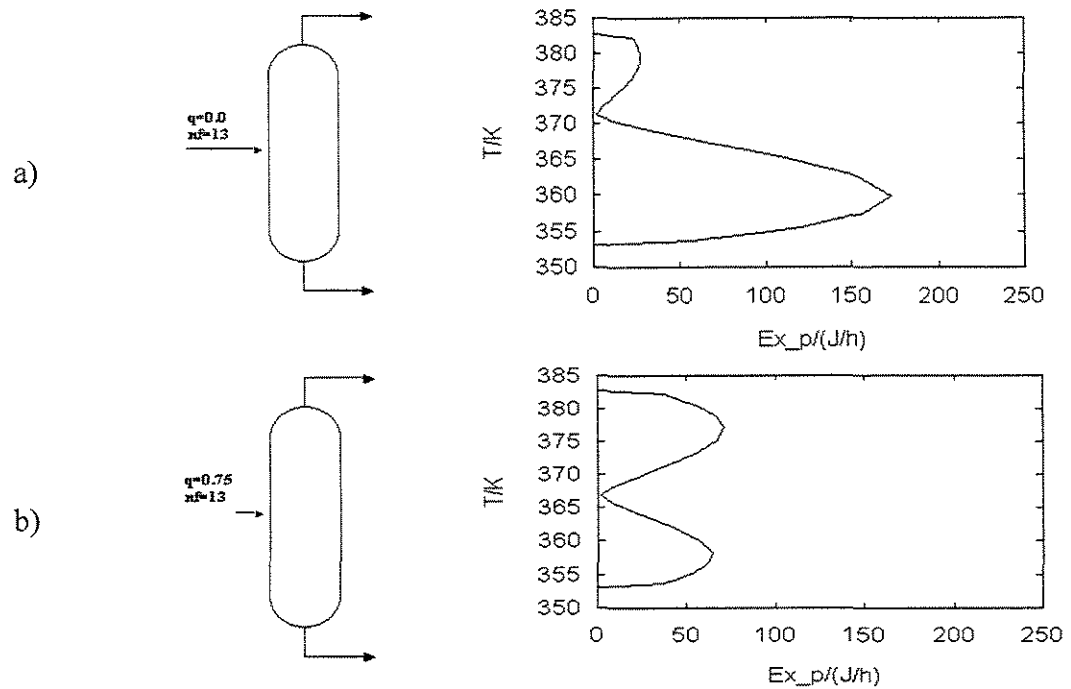


Figura 3-7: Coluna de 26 estágios. a) condição térmica de vapor saturado. b) condição térmica 25% vaporizada (condição ótima).

Uma coluna otimizada apresenta uma distribuição de perdas de exergia uniforme entre as seções da coluna. Afinal, esta apresentará uma perda menor de exergia, um exemplo desta afirmação pode ser visto na comparação dos gráficos que compõe a Figura 3-7. Porém, quando a alteração do tipo de condição térmica não é suficiente para equilibrar a distribuição de perdas de exergia, são realizados estudos alocando trocadores intermediários de calor. No próximo item será abordada esta questão.

3.3.4. Alocação de Trocadores Intermediários de Calor

O uso de condensadores e refeedores intermediários é necessário em colunas que apresentam distribuição de exergia está muito desproporcional entre as seções. Através dos estudos realizados com o perfil de perdas de exergia, sabe-se que um condensador intermediário diminui as vazões nos estágios abaixo dele e um refeedor aumenta as vazões nos estágios acima.

Os refeedores intermediários de calor aumentam as vazões internas acima do estágio onde o trocador está alocado e diminui abaixo. Já o condensador tem o efeito

contrário; aumenta as vazões internas nos estágios abaixo. Este recurso é utilizado quando a mudança da condição térmica não otimiza a coluna.

A Figura 3-8 exemplifica um seqüenciamento de modificações para otimizar a coluna. Todos os gráficos possuem a alimentação no mesmo estágio. Neste caso, o refeedor intermediário redistribuiu as vazões internas e conseqüentemente otimizando a coluna pela diminuição das perdas de exergia.

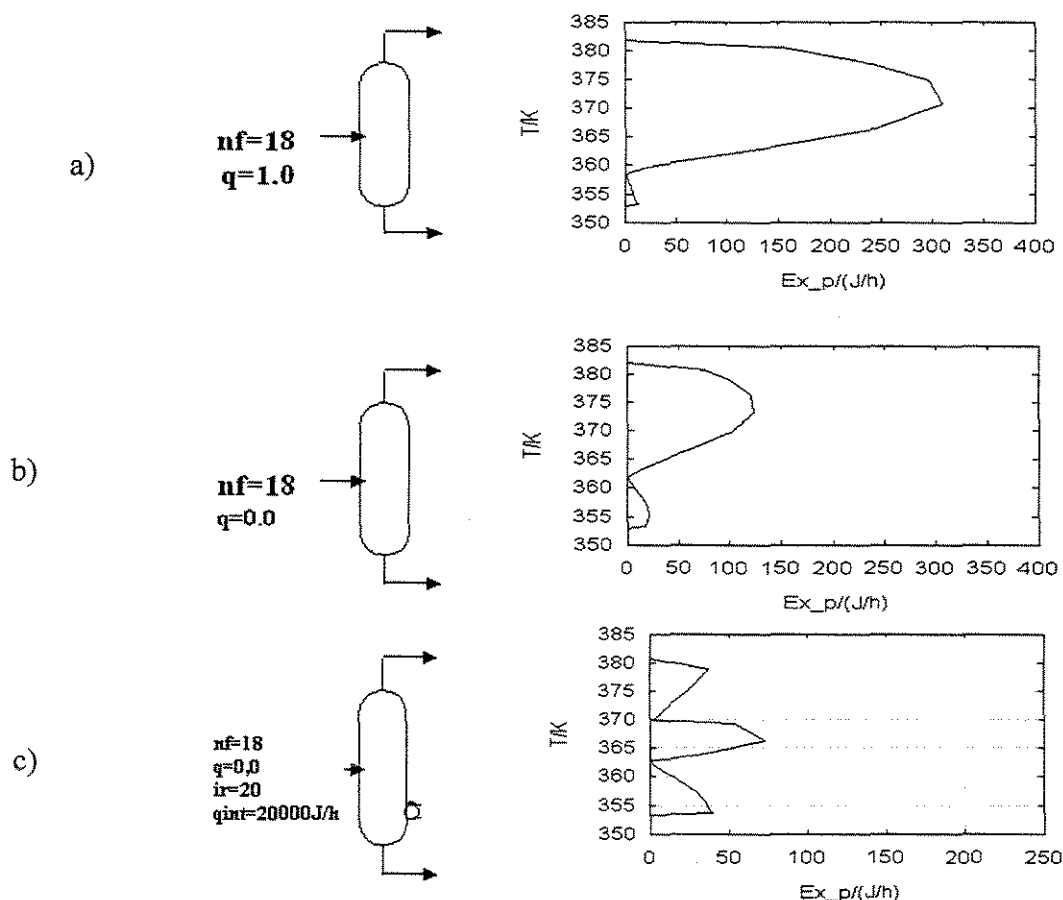


Figura 3-8: Colunas. a) caso inicial com condição térmica de líquido saturado. b) preaquecendo a alimentação, $q=0,0$. c) alimentação preaquecida e alocação de um refeedor intermediário.

A seguir, serão estudados os mesmos sistemas de separação estudados no capítulo 2. O objetivo é poder otimizar os sistemas com propostas de modificação do perfil de perdas de exergia e realizar uma comparação entre os resultados obtidos de ambos os métodos, ou seja, os resultados alcançados com as análises utilizando o perfil de perdas de exergia serão comparados aos resultados obtidos pelo perfil reversível.

3.4. Sistema benzeno-tolueno

A distribuição das forças motrizes de transferência de massa e de calor ao longo da coluna de uma coluna de destilação é função das temperaturas e composições em cada estágio, que por sua vez são funções das vazões internas de líquido e vapor da coluna. Parâmetros como número de estágios, posição e condição térmica da alimentação, quando alterados, podem modificar de maneira significativa as vazões internas da coluna. Logo, a modificação de qualquer dos parâmetros citados pode alterar a distribuição das forças motrizes ao longo de toda a coluna.

O perfil de perdas de exergia permite uma visualização da distribuição das forças motrizes numa coluna de destilação. Se os parâmetros acima citados forem alterados, a consequente mudança nas vazões e na distribuição das forças motrizes produz alteração no formato do perfil de perdas de exergia.

A coluna inicial do sistema foi montada obedecendo uma taxa de refluxo de 20% acima do refluxo mínimo para uma vazão na alimentação de 1 kmol/h, condição térmica de líquido saturado, posicionamento da alimentação no centro da coluna e pressão de 1 bar. Foi arbitrada uma recuperação no topo de 99% do componente mais volátil.

3.4.1. Sistema equimolar benzeno-tolueno (0,5/0,5)

O sistema equimolar (0,5/0,5), foi calculada uma coluna inicial contendo 26 estágios, com uma recuperação no topo do componente mais volátil arbitrada em 99% e pressão de 1 bar, condição térmica de líquido saturado e posição alimentação no estágio 13 a partir do topo. Ela é ilustrada na Figura 3-9 (a).

A Figura 3-9 (a) mostra um gráfico com uma distribuição desproporcional entre as duas seções da coluna, com grandes perdas no esgotamento. Já para colunas simuladas com o estágio da alimentação localizado no meio da coluna, operadas com condição térmica 25% vaporizada, Figura 3-9 (b), as distribuições de perdas de exergia apresentaram-se mais uniformes e equilibradas, ou seja, tanto na região de esgotamento e retificação as perdas foram semelhantes e menores que os demais casos rodados. Neste caso, a alocação de trocadores torna-se desnecessária. No próximo item será estudado o sistema não-equimolar benzeno-tolueno (0,25/0,75).

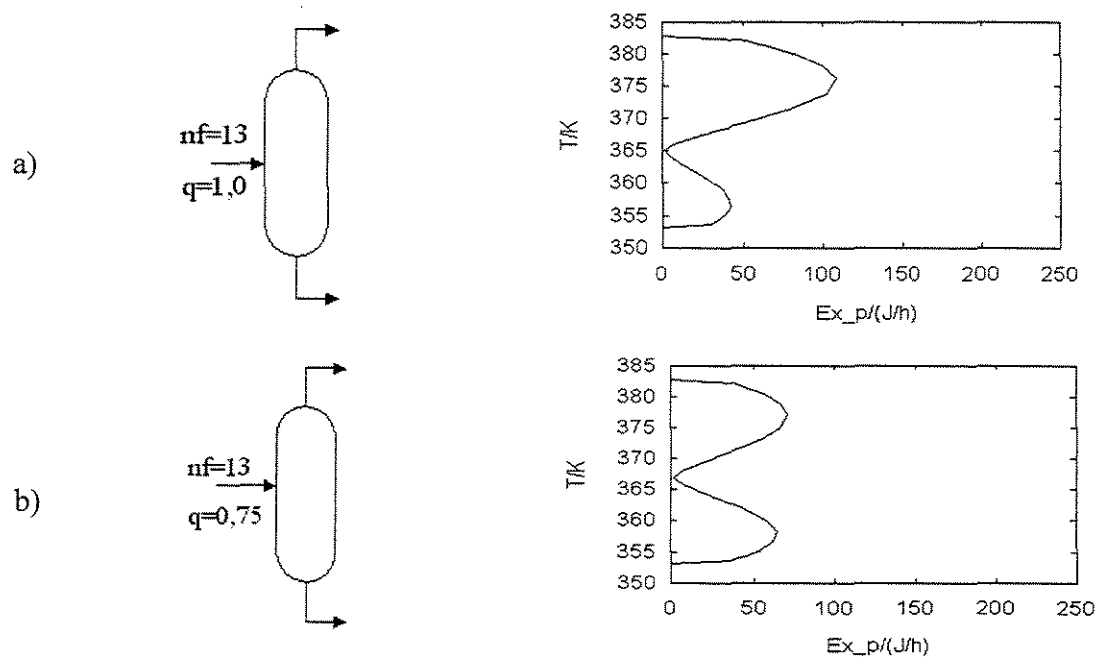


Figura 3-9: Modificações propostas para o sistema equimolar benzeno-tolueno.

3.4.2. Sistema não-equimolar benzeno-tolueno (0,25/0,75)

O sistema não-equimolar (0,25/0,75), foi calculada uma coluna inicial contendo 28 estágios, com uma recuperação no topo do componente mais volátil arbitrada em 99% e pressão de 1 bar, condição térmica de líquido saturado e posição alimentação no estágio 14 a partir do topo. Ela é ilustrada na Figura 3-10 (a).

As propostas de modificações para este sistema são demonstradas na Figura 3-10. A coluna inicial apresenta grandes perdas na retificação e mudando seu posicionamento para o estágio 10 a partir do topo, a distribuição de perdas de exergia está desproporcional entre as seções da coluna.

A Figura 3-10 (b) mostra também que só a modificação da condição térmica da alimentação não é suficiente para “uniformizar” a distribuição de perdas de exergias ao longo da coluna. Portanto, neste caso é necessário a alocação de um condensador intermediário que aumente as vazões internas na seção de esgotamento e consequentemente redistribuindo as perdas na coluna.

As perdas de exergia ficam semelhantes entre as seções com uma condição térmica 25% vaporizada e um condensador intermediário de carga térmica de 15.000J/h no estágio 8 a partir do topo, Figura 3-10 (c).

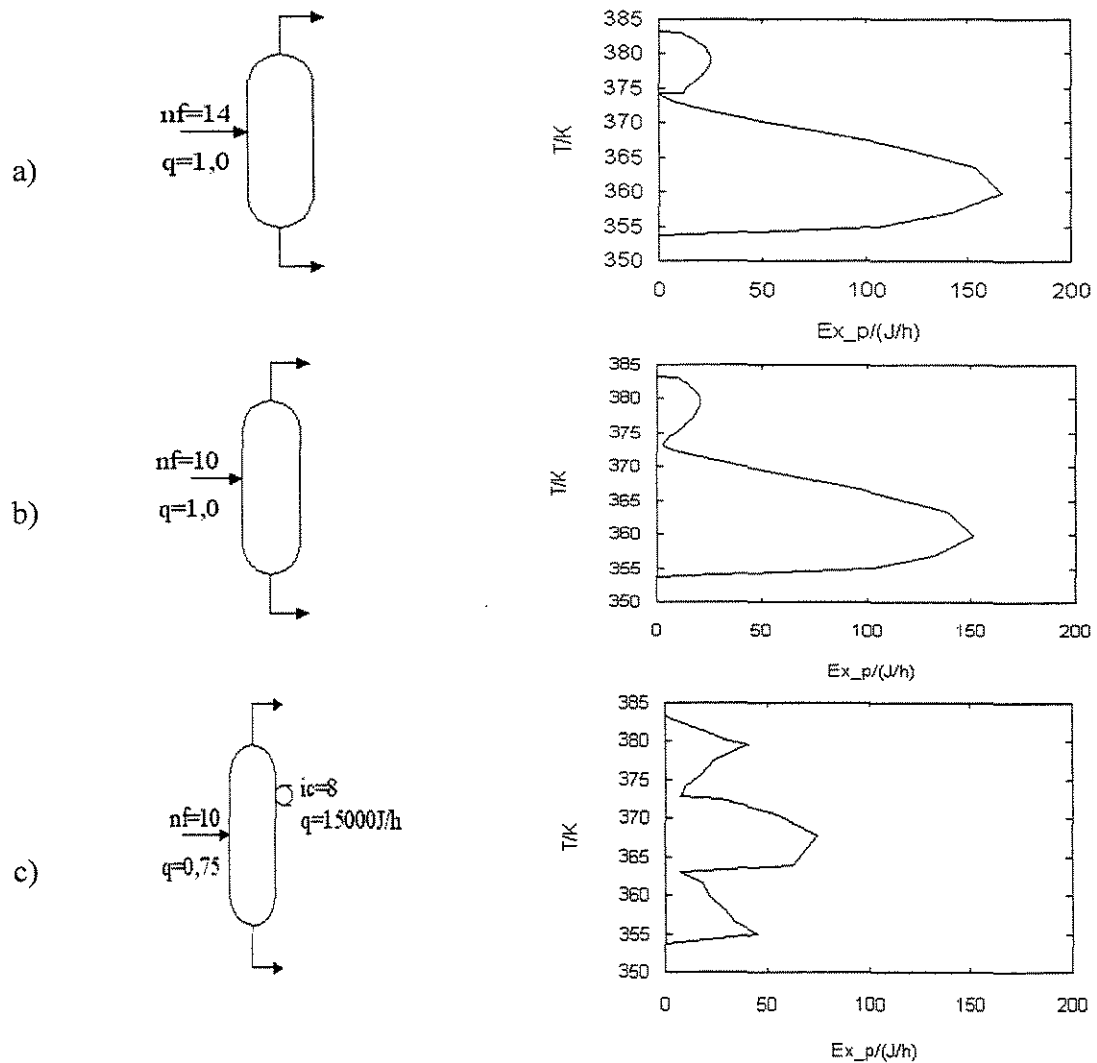


Figura 3-10: Modificações propostas para o sistema benzeno-tolueno (0,25/0,75).

3.4.3. Sistema não-equimolar benzeno-tolueno (0,75/0,25)

A coluna inicial do sistema não-equimolar (0,75/0,25) foi calculada em 28 estágios, alimentação no 14 estágio a partir do topo, condição térmica de líquido saturado e pressão de 1 bar. A coluna inicial é ilustrada na Figura 3-11. No estudo realizado com o sistema 0,25/0,75 as maiores perdas ocorreram na retificação e para este sistema grandes perdas de exergia foram identificadas na seção de esgotamento, devido às vazões internas serem maiores nessa seção e consequentemente as perdas de exergia.

A seção de exaustão apresentou as maiores perdas exergéticas. Alterando a condição térmica para 90% vaporizada, as perdas exergéticas foram menores na exaustão, ou seja, o aquecimento na alimentação promoveu o aumento das vazões internas na seção da retificação, diminuindo o “desequilíbrio” com relação a distribuição de perdas de

exergia. Apesar de um pico de exergia na região da alimentação causado pela presença do refulvedor no estágio 20 (a partir do topo) com carga térmica de 20000J/h, as perdas entre as seções se equilibraram. No próximo tópico, estudo referentes ao sistema propeno-propano.

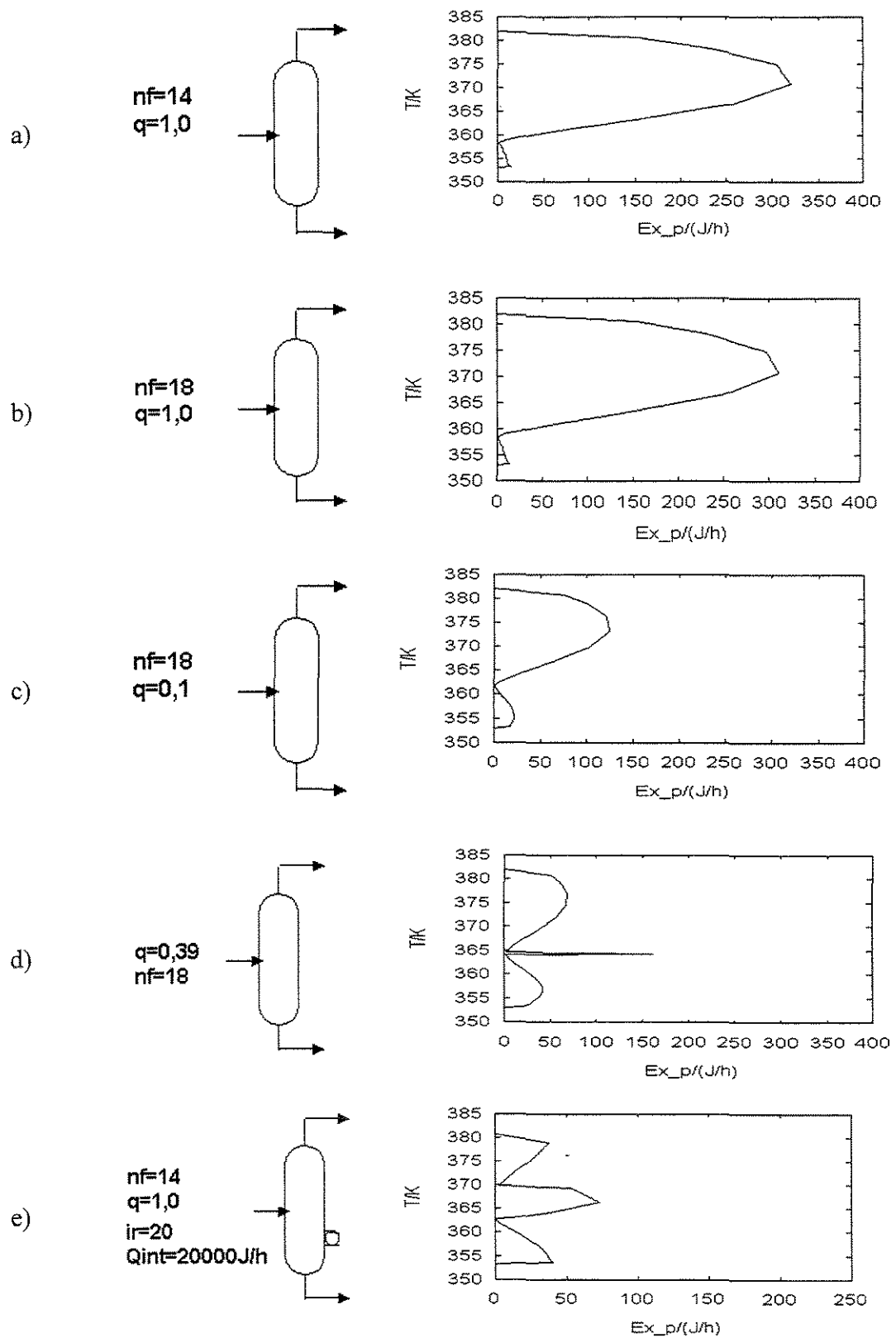


Figura 3-11: Modificações propostas para o sistema benzeno-tolueno.

3.5. Sistema não-equimolar propeno-propano (0,6/0,4)

O estudo para o sistema não-equimolar propeno-propano com o parâmetro de posicionamento do estágio da alimentação foi desenvolvido numa coluna de 115 estágios. Na coluna inicial o estágio da alimentação está localizado na 79º estágio a partir do topo. Conforme foi dito no capítulo anterior os dados foram retirados da literatura, conforme citado no item 2.6. A Tabela 3-1 mostra os dados da coluna inicial.

Tabela 3-1: Dados da coluna inicial.

<i>Propriedades</i>	<i>Alimentação</i>	<i>Topo</i>	<i>Fundo</i>
Vazão (kmol/h)	272,0	163,0	109,0
Carga Térmica (MJ/h)	-	-34,9	37,4
Pressão (bar)	9,0	9,0	9,0
Fração molar			
propeno	0,6		
propano	0,4		
Exergia Perdida (kJ/h)			
utilidades	855		
perdida	520		
Média (J/h)	4561		

3.5.1. Análise

O diagrama da Figura 3-12 mostra um perfil com grandes perdas na região da alimentação. Este pico de exergia indica que a alimentação está operando com condição térmica inadequada ou com um posicionamento incorreto. Este fato influencia na distribuição de exergia ao longo das duas seções da coluna. A distribuição de perdas perdas de exergia existentes entre as duas seções da coluna (retificação e esgotamento) está desproporcional, Figura 3-12.

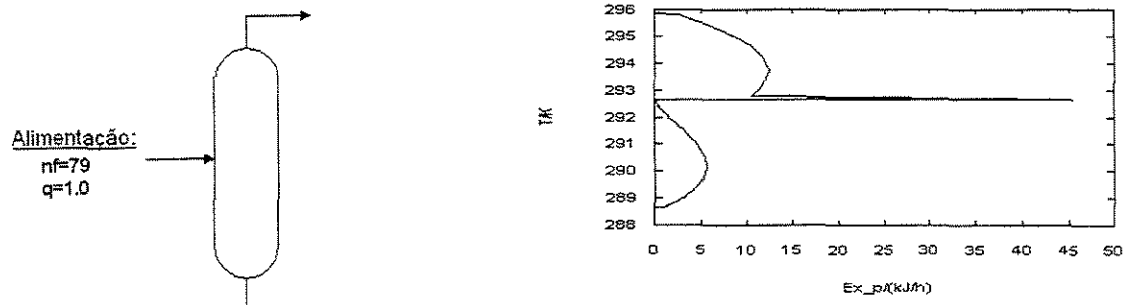


Figura 3-12: Coluna inicial.

Os casos rodados para alimentação no estágio 60 mostraram melhores resultados, sendo escolhido como estágio ótimo. Para condição térmica tendendo para vapor saturado, o comportamento da coluna apresenta valores significativamente inferiores ao caso inicial. A mudança do tipo de condição térmica para o sistema propeno-propano com a alimentação no estágio 60 diminuiu as vazões internas da seção de esgotamento, porém ainda não apresentou uma configuração ótima, Figura 3-13 (a). A distribuição de perdas de exergia entre as duas seções da coluna ainda está desproporcional. A Figura 3-13 (b) mostra a coluna com com condição térmica de vapor saturado. Na Figura 3-13 (c), o super aquecimento da alimentação gera no perfil de perdas de exergia um pico na região da alimentação, causado pela a diferença de temperatura e composição entre a corrente de alimentação com a correntes internas do estágio. Este superaquecimento da alimentação não distribuiu as perdas entre as seções. Neste caso, o uso de um trocador intermediário seria mais adequado para redistribuir as perdas de exergia na coluna.

Um refulvedor intermediário de 10MJ/h foi alocado no estágio 62 a partir do topo. A exergia perdida entre as seções tornou-se uniforme. Os dados da Figura 3-13 (d) mostram uma comparação com os dados da coluna inicial e da coluna otimizada. O caso simulado com a condição térmica $q=0,75$ apresentou os melhores resultados, pois a duas seções estão com uma distribuição de perdas semelhante e o pico de exergia presente na região da alimentação gerado pela presença do trocador, mostra-se menor que os demais casos rodados.

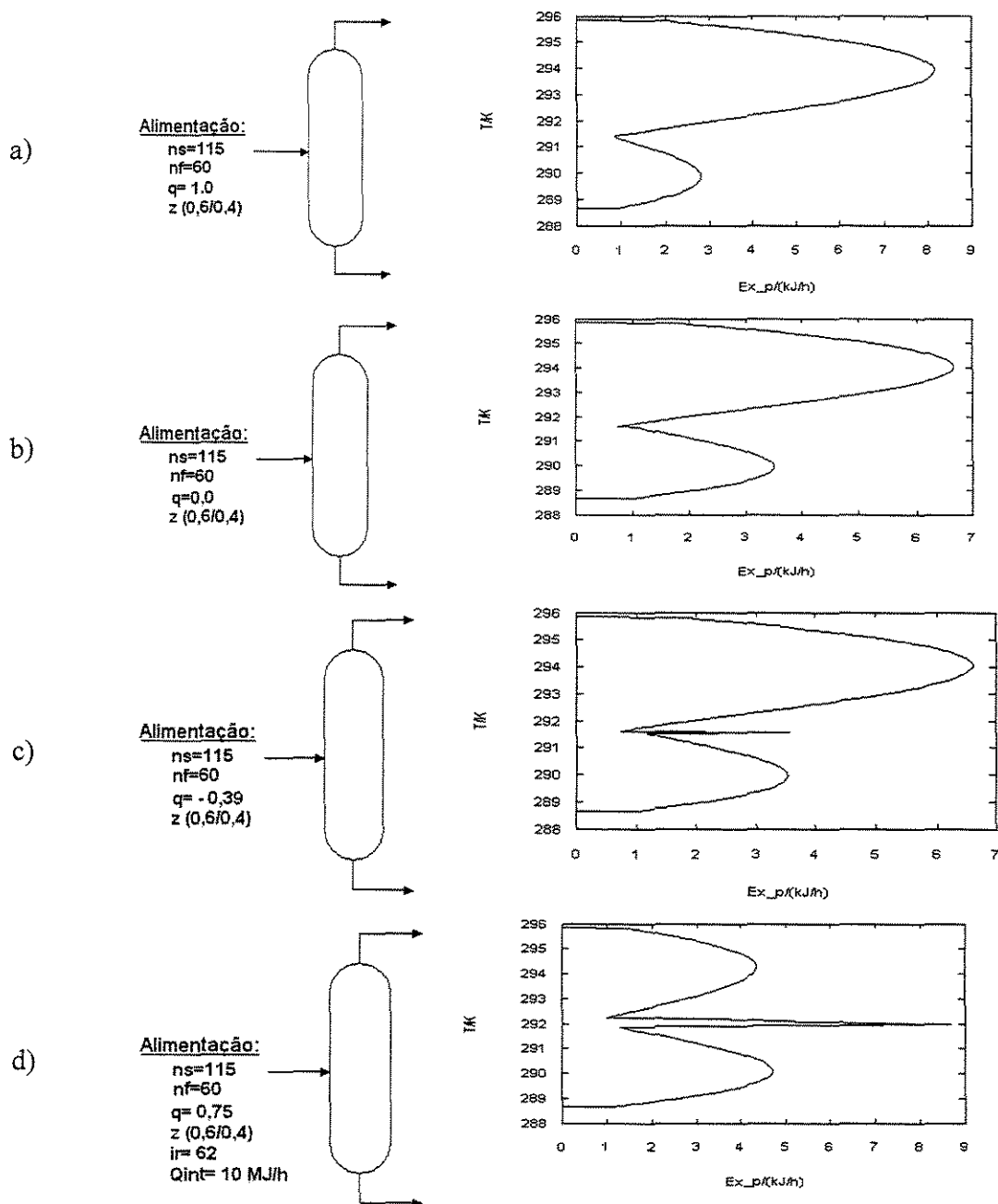


Figura 3-13: Procedimento de otimização. a) mudança do estágio da alimentação. b) mudança de condição térmica. c) alocação de um reboiler intermediário.

A Tabela 3-2 representa o resumo final dos estudos efetuados no sistema propeno-propano. Mostrando os principais dados da coluna inicial bem como da coluna otimizada.

Tabela 3-2: Dados comparativos entre coluna inicial e otimizada.

Tabela Comparativa			
Propriedades	Coluna nf:79	Coluna nf:60	Redução em %
Q_{cond} (kJ/h)	-34989	-33317	4,8
Q_{ref} (kJ/h)	37410	24751	7,1*
Q_{int} (kJ/h)	0,0	10000	
Ex_{cond} (kJ/h)	1140	1094	4,0
$Ex_{\text{útil}}$ (kJ/h)	855	696	18,0
Ex_{perd} (kJ/h)	520	341	34,0
Média (J/h)	4561	2967	35,0

* No cálculo deste valor considerou a carga térmica intermediária.

Houve uma economia de 4.8% referente às cargas do condensador da coluna otimizada, ou seja, uma coluna com o estágio da alimentação 60 a partir do topo, condição térmica 25% vaporizada e alocação de um refeedor intermediário de carga 10 MJ/h posicionado no estágio 62.

3.6.Sistema Multicomponente

O sistema analisado por Dhole é sistema tem cinco componentes, contendo: *n*-heptano, *n*-octano, *n*-nonano, *n*-decano, *n*-pentadecano. Este caso foi simulado inicialmente numa coluna contendo 18 estágios. A recuperação no topo do componente *n*-octano, é de 97%. A Tabela 3-2 expõe os dados desta coluna. Abaixo será realizada a análise exergética para este sistema.

Na análise realizada para este sistema, Dhole propõe que a otimização é obtida utilizando a alocação de dois trocadores e aumento de doze estágios na coluna. Agora será estudado as modificações propostas com base na análise realizada com o perfil de perdas de exergia para este sistema.

A Figura 3-14 mostra o perfil de perdas de exergia para o sistema de cinco componentes. Este perfil apresenta um pico de exergia grande na região da alimentação. Este pico indica que a alimentação está operando com condição térmica inadequada ou com

um posicionamento incorreto. Tanto o posicionamento como a condição térmica inadequada influencia na distribuição de exergia ao longo das duas seções da coluna. E pode ser exemplificado pelas perdas desiguais existentes entre as duas seções da coluna (retificação e esgotamento), demonstrado na Figura 3-15. Porém não indica o quanto o refluxo pode ser reduzido. Mas não é preciso de um gráfico de *entalpia-temperatura* para determinar o quanto pode ser diminuído. O simples aumento do número de estágios numa simulação já resolve este problema.

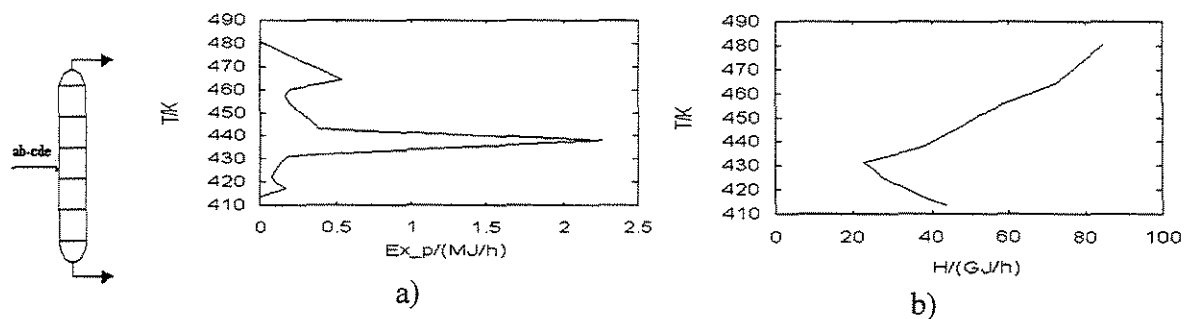


Figura 3-15: Perfis termodinâmicos. a) perfil de perdas de exergia. b) perfil reversível escolhido.

Através dos estudos realizados com o perfil de perdas de exergia, sabe-se que um condensador intermediário diminui as vazões nos estágios abaixo dele e um refeedor aumenta as vazões nos estágios acima (DE FARIA,1996). No caso desta coluna seria indicado apenas o uso de um trocador (refeedor) para redistribuir as vazões internas dos estágios acima dele e um preaquecimento para redistribuir as perdas de exergia na coluna.

Para sistema de multicomponente a análise realizada por Dhole propõe um aumento de 12 estágios na coluna, um preaquecimento e a alocação de dois trocadores intermediários. A retificação apresenta as menores perdas e a alimentação é responsável pelas grandes perdas na coluna. O uso do condensador, no caso, iria tornar a distribuição de perdas entre as seções bem desigual.

A mudança do tipo de condição térmica gera uma redistribuição nas vazões internas da coluna, interferindo no comportamento da distribuição de exergia desta. Porém

a mudança da condição térmica para 25% vaporizada não apresentou um comportamento otimizado, embora as perdas na alimentação diminuíssem pela metade sem aumentar o número de estágios. A Tabela 3-3 mostra uma comparação entre o caso inicial e o caso otimizado. A média de exergia perdida por estágio é menor do que a média do caso inicial analisado.

Tabela 3-3: Otimização do sistema multicomponente.

q	ic	ir	Ex _{perd} (MJ/h)	Mp (MJ/h)
1,39*	-	-	5,67	0,315
0,75**	-	12	4,04	0,230

* Coluna inicial.

**Coluna otimizada.

A alocação de um refeedor intermediário no estágio 12 com carga 15GJ/h e a mudança da condição térmica é viável para 25% vaporizada, onde as perdas são significativamente menores se comparadas ao caso inicial, principalmente na alimentação. Entretanto, o perfil de perdas ainda não ficou simétrico, devido a presença do trocador. Porém, caso colocasse um superaquecimento na alimentação, o pico de perdas de exergia nesta região seria maior que o caso inicial.

O uso de um refeedor não foi suficiente para deixar o perfil simétrico, mas as perdas são menores. A utilização de um condensador intermediário proposta por Dhole no item 2.7.1. acarretaria numa diminuição das perdas na retificação, onde a distribuição das perdas seria bem desigual entre as seções, indicando que a coluna está termodinamicamente ineficiente. O perfil de perdas de exergia demonstra que uma das principais fontes de perdas de exergia para este sistema residem principalmente na região da alimentação.

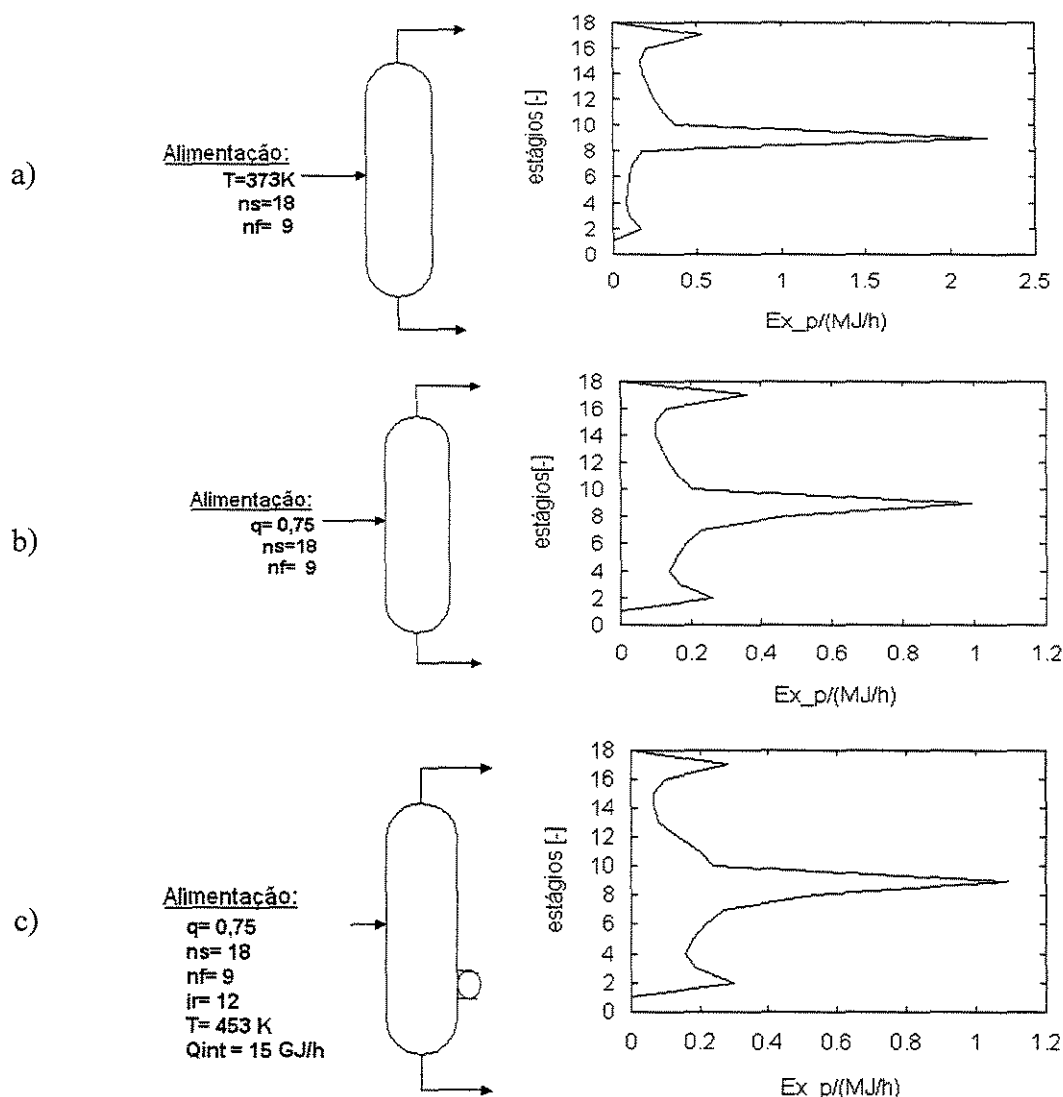


Figura 3-16: Modificações propostas para o sistema de multicomponentes.

3.7. Comentários e Conclusões

Os sistemas utilizados no capítulo anterior também foram estudados neste capítulo. O objetivo na repetição dos sistemas de separação consiste em verificar se as propostas de modificações do perfil reversível apresentaram ser iguais às propostas do perfil de perdas de exergia.

Com base nos resultados obtidos no capítulo 2 e neste capítulo, uma análise será realizada, em relação se a propostas de modificações trouxeram diminuição do consumo de energia e se houve um aumento da eficiência das colunas estudadas. A comparação será abordada no próximo capítulo.

Capítulo 4. Análise Comparativa Entre os Perfis

4.1.Introdução

No decorrer deste trabalho, foi desenvolvido uma análise para sistemas de separação envolvendo a primeira lei da termodinâmica, ou seja, com o perfil reversível e com conceitos da segunda lei, com o perfil de perdas de exergia. A proposta deste trabalho foi desenvolver uma metodologia de otimização de colunas utilizando (*reversibilidades X irreversibilidades*) de metodologias já estudadas (DHOLE,1991; DE FARIA, 1996) mas ainda não comparadas.

Na primeira etapa deste trabalhos foi efetivada o estudo de sistemas de separação, utilizando cada metodologia de forma separada. Os resultados obtidos nos capítulos 2 e 3 servirão como base para a análise deste capítulo para a avaliação de ambos os métodos identificando possíveis conflitos e através de um estudo desenvolver um procedimento da eliminação conflitos detectados.

4.2.Comparação entre o perfil reversível e o perfil de perdas de exergia

A análise energética abordada no (capítulo2) é baseada nos conceitos da Primeira Lei da Termodinâmica. O perfil reversível (GCCC), ferramenta da Análise *Pinch* o qual é uma adaptação da GCC, faz uma abordagem simples para integração energética de colunas. O conceito se baseia no cálculo da condição mínima termodinâmica para uma coluna simulada em condições reais.

Apesar de muito difundida, a análise energética ou da primeira lei da termodinâmica (balanço de energia) estudada no (capítulo2) em sistemas de separação não contabiliza a qualidade da energia que se está perdendo e nem onde ocorre as irreversibilidades dos processos, ou seja, não identifica onde e porquê elas aparecem. Os estudos realizados com os sistemas não-equimolares e multicomponentes indicaram que a utilização da análise energética não identifica quais as seções em que ocorrem as perdas de exergia geradas pelas forças motrizes. A identificação da seção termodinamicamente ineficiente numa coluna, direciona as propostas de modificações. Conseqüentemente, reduzindo as perdas e obtendo o aumento da eficiência do processo.

A análise exergética é baseada no conceito de irreversibilidade e permite que as ineficiências de um processo sejam identificadas através da aplicação da 2ª Lei da Termodinâmica. O perfil de perdas de exergia é utilizado em dados de uma coluna *real* (ou simulada sob condições reais) que permite a identificação das seções termodinamicamente ineficientes. Na análise exergética o balanço de exergia é estendido prato a prato. Consequentemente, as irreversibilidades geradas pela separação em cada estágio são computadas permitindo a identificação de seções termodinamicamente ineficientes. Os parâmetros de operação de uma coluna, quando alterados, modificam de maneira significativa as vazões internas da coluna. Ocorre a alteração da distribuição de exergia perdida na coluna e o formato do perfil de perda de exergia.

Neste tópico será mostrada a comparação entre os resultados obtidos com o uso de ambas as metodologias para os mesmos sistemas de separação.

4.2.1. Sistema benzeno-tolueno (0,5/0,5)

Iniciando como sistema equimolar benzeno-tolueno onde as propostas de cada metodologia adotada são similares figura 4-1. A figura 4-1 exemplifica as alterações realizadas em todos os sistemas de separação estudados neste trabalho, com base na análise proposta pelo perfil reversível. Iniciando como sistema equimolar benzeno-tolueno onde as propostas de cada metodologia adotada são similares.

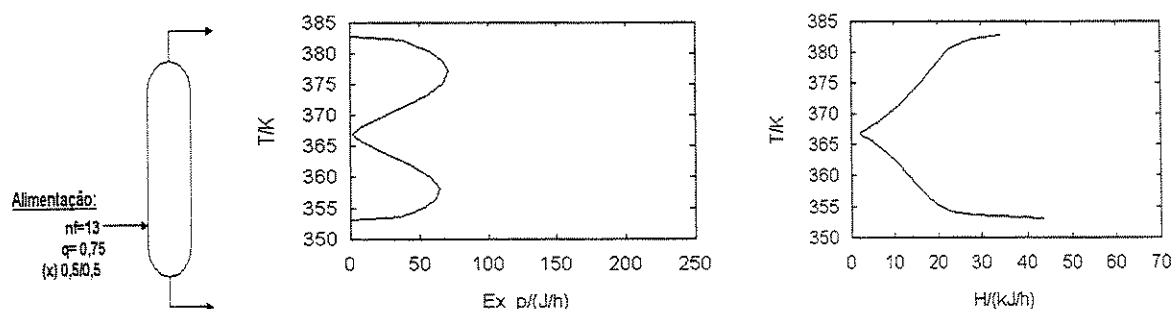


Figura 4-1: Propostas de modificações para o sistema equimolar.

4.2.2. Sistema benzeno-tolueno (0,25/0,75)

A comparação entre os perfis mostra que para o sistema não-equimolar benzeno-tolueno (0,25/0,75) as propostas de modificações foram diferentes por parte de cada método. A Figura 4-2 exemplifica as propostas de cada metodologia e a influência causada na outra ferramenta após as mudanças. O perfil reversível indica que a mudança do estágio da alimentação é suficiente para diminuir o consumo de energia da coluna, Figura 4-2 (a). Entretanto, o perfil de perdas de exergia mostra que as seções da coluna estavam apresentando uma distribuição de perdas de exergia desproporcional, sendo necessário o uso de um preaquecimento na alimentação bem como a alocação de um condensador intermediário, Figura 4-2 (b).

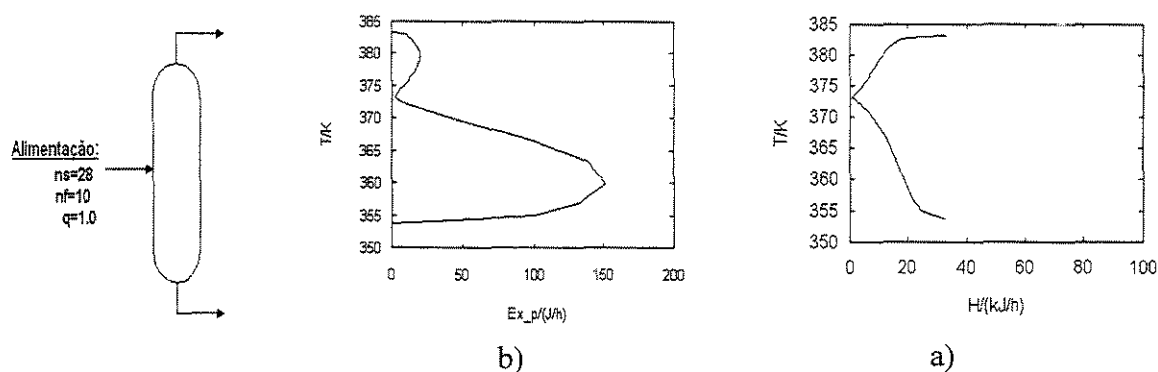


Figura 4-2: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil reversível.

O uso do trocador intermediário permitiu a recuperação de energia a uma temperatura mais alta Figura 4-3 (a). Na Figura 4-3 (b) o perfil apresenta uma distribuição mais equilibrada de perdas ao longo da coluna, onde na região da alimentação as perdas são causadas pela presença do trocador.

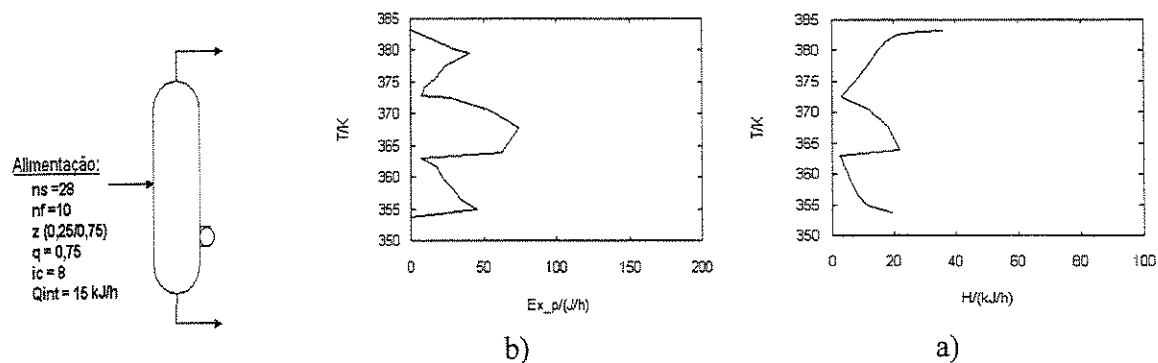


Figura 4-3: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil de perdas de exergia.

4.2.3. Sistema benzeno-tolueno (0,75/0,25)

Os sistemas não-equimolares benzeno-tolueno (0,75/0,25) as propostas de modificações foram similares quanto à mudança da alimentação e preaquecimento da alimentação. No perfil reversível, a mudança do estágio da alimentação com preaquecimento foi suficiente, Figura 4-4 (a). Entretanto, as seções da coluna estavam apresentando distribuição de perdas de exergia desproporcional, onde o esgotamento está perdendo menos que a retificação, sendo necessário o uso da alocação de um refeedor intermediário para redistribuir as perdas, Figura 4-4 (b).

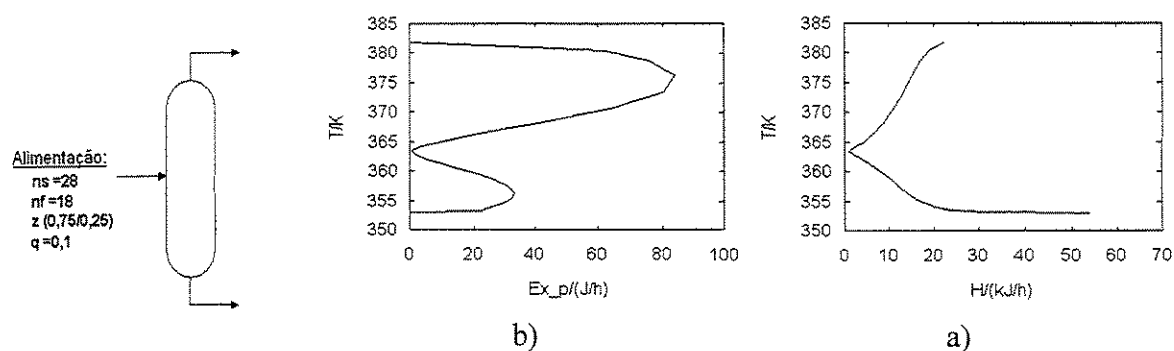


Figura 4-4: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil reversível.

A alocação de um refeedor intermediário com o preaquecimento da alimentação, distribuíram as perdas ao longo da coluna. Conforme o ocorrido com o sistema benzeno-

tolueno (0,25/0,75) as perdas ocorridas na alimentação se devem a presença do trocador que aumenta as vazões internas, Figura 4-5 (b) e (a).

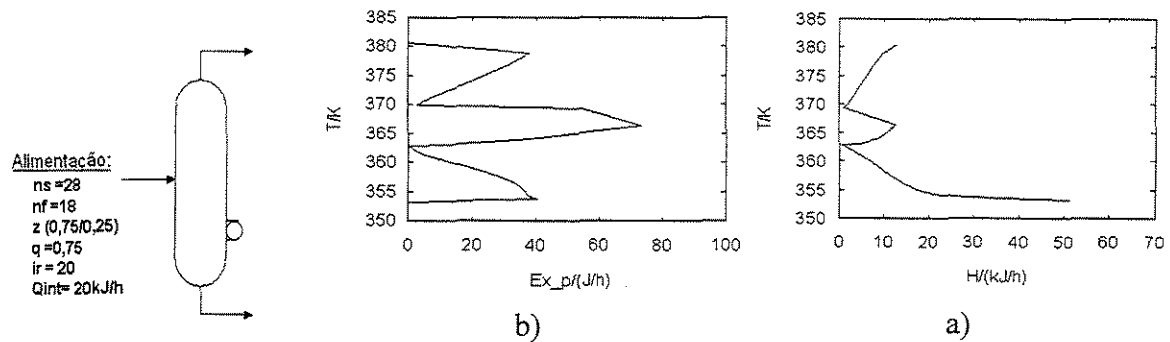


Figura 4-5: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil de perdas de exergia.

4.2.4. Sistema propeno-propano (0,6/0,4)

O sistema propeno-propano (0,6/0,4) foi estudado com o objetivo de averiguar se as propostas de modificações seguem uma tendência. Os estudos realizados com o perfil reversível indicam preaquecimento e um aumento no número de estágios, Figura 4-6 (a). Entretanto, após as modificações realizadas, o perfil de perdas de exergia ainda apresentou uma distribuição de perdas de exergia desigual, Figura 4-6 (b). O aumento do número de estágios e o preaquecimento diminuíram o consumo de energia. Porém, nem sempre o aumento do número de estágio é economicamente viável.

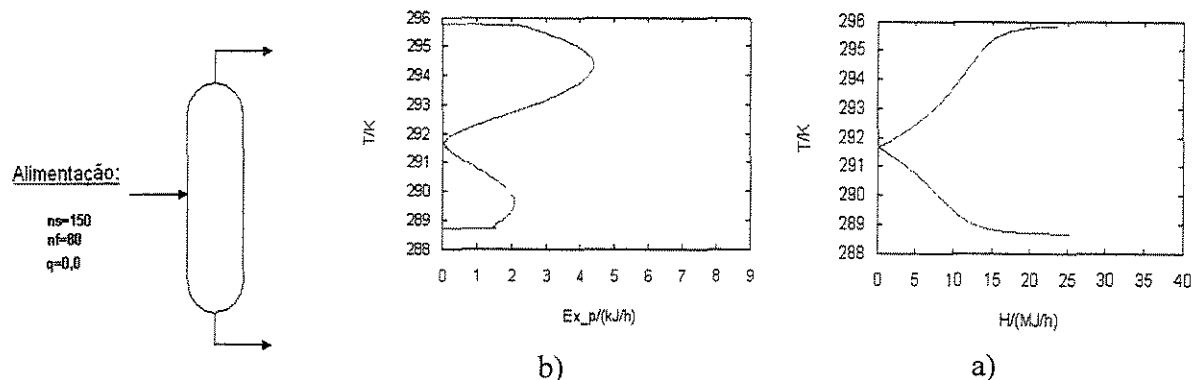


Figura 4-6: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil reversível.

O perfil de perdas de exergia direciona as propostas de modificações para a alocação de um refeedor intermediário sem o aumento de estágios e após as mudanças propostas, surgiu um escopo para redução de refluxo na região da alimentação.

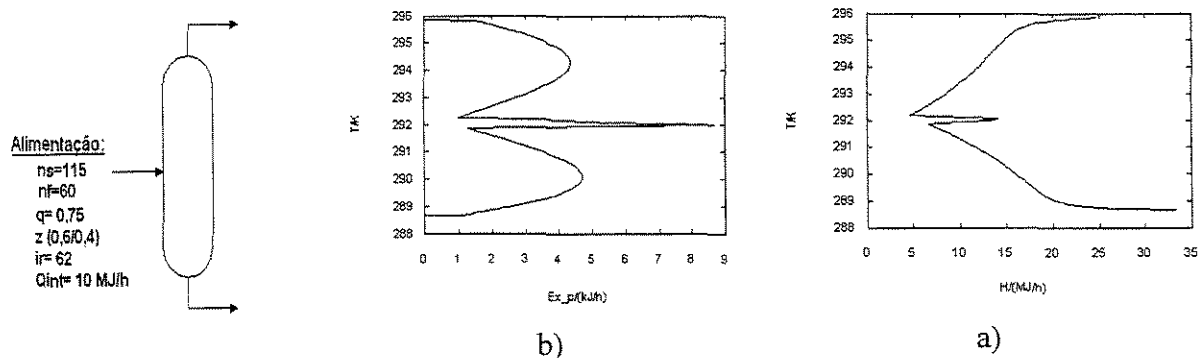


Figura 4-7: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil de perdas de exergia.

O estudo realizado com o sistema benzeno-tolueno mostrou que as propostas são similares quanto ao posicionamento da alimentação e preaquecimento da alimentação.

4.2.5. Sistema multicomponentes

No sistema multicomponentes, a análise realizada por Dhole propôs um aumento de 12 estágios na coluna, um preaquecimento e a alocação de dois trocadores intermediários, Figura 4-8 (a). Conforme foi mostrado na análise de perdas de exergia, a retificação apresenta as menores perdas e a alimentação é responsável pelas grandes perdas na coluna. O uso do condensador, neste caso, acarretaria em uma distribuição de perdas de exergia entre as seções ainda mais desproporcional, Figura 4-8 (b).

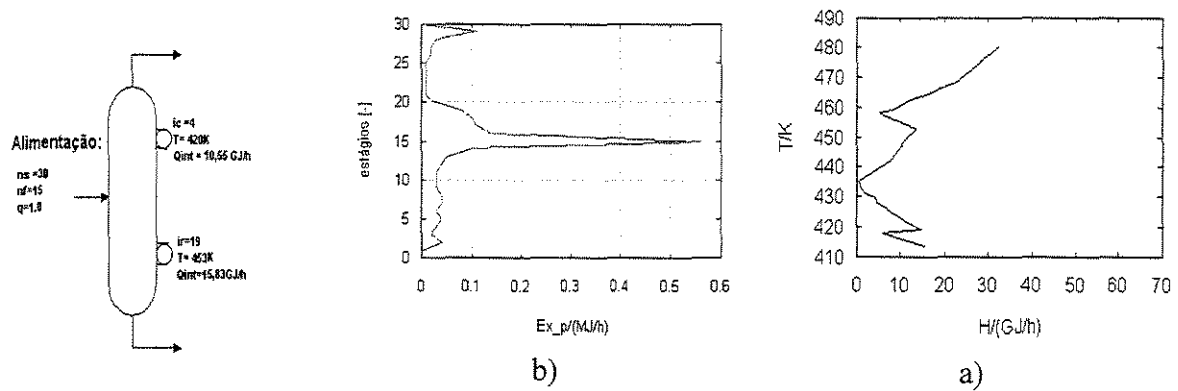


Figura 4-8: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil reversível.

O perfil de perdas de exergia também apresentou dificuldades para interpretação do gráfico para sistemas com muito componentes devido ao aparecimento de picos de perdas de exergia, produzindo os melhores resultados para sistemas binários e ternários conforme foi verificado por DE FARIA (1996). Entretanto, os estudos indicaram que a coluna apresentando 18 estágios, um preaquecimento e a alocação de um refeedor intermediário as perdas na alimentação são significativamente menores que o caso inicial. Apesar do perfil não apresentar uma configuração simétrica, as perdas entre as seções foram redistribuídas, Figura 4-9(b). As modificações propostas pelo perfil de perdas de exergia acarretaram num aumento do escopo para redução de refluxo.

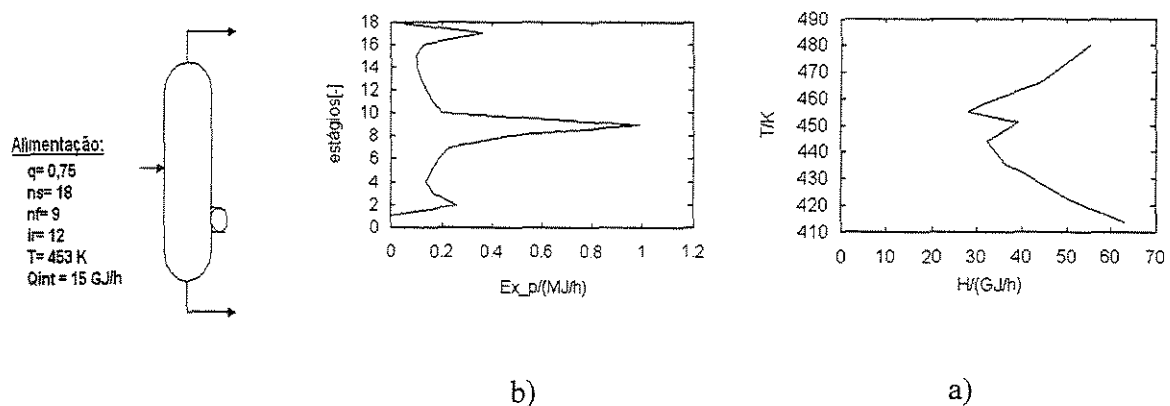


Figura 4-9: propostas sugeridas baseada na análise utilizando o perfil de perdas de exergia.

4.3.Comentários e Conclusões

Neste capítulo a análise realizada entre os métodos com base na comparação dos resultados obtidos com o estudo dos sistemas de separação mostrou que a análise baseada na primeira lei permite a estimativa de carga térmica intermediária e redução do refluxo para um estudo de otimização. A análise exergética é uma metodologia que visa apresentar as bases teóricas e práticas do uso racional de energia. Ela é baseada em conceitos termodinâmicos, baseando-se em princípios da segunda lei da termodinâmica. O uso conjunto é viável onde cada metodologia contribui com metas para redução de energia.

No estudo realizado com sistema multicomponentes foi mostrado que o pseudobinário escolhido através do critério adotado por DHOLE, numa análise em conjunto com o perfil de perdas de exergia, mostrou conflitos quanto as propostas de modificações. No próximo capítulo, será abordado a aplicação conjunta de ambos os métodos a um sistema ternário. Nesta análise o estudo da eliminação dos conflitos detectados neste capítulo será desenvolvido.

Capítulo 5. Nova Metodologia

5.1.Introdução

Nos capítulos 2 e 3 deste trabalho foram estudados, de forma separada, o perfil reversível e o perfil de perdas de exergia. O objetivo em se estudar separadamente os métodos foi entender o comportamento dos perfis aplicados a sistemas de separação.

No capítulo 4 os resultados obtidos nos capítulos 2 e 3 serviram de base para comparação entre os métodos. Entretanto, na avaliação do sistema de 5 componentes baseada no perfil reversível da coluna surgiu uma questão com relação a escolha do pseudobinário adequado para análise, uma vez que o pseudobinário escolhido pelo critério de Dhole, mostrou conflitos em relação às propostas de modificação do perfil de perdas de exergia para o sistema. Portanto, para uma melhor compreensão desta questão levantada no capítulo anterior, os estudos serão direcionados a um sistema multicomponentes simples, no caso foi arbitrado o sistema ternário benzeno (a), tolueno (b) e orto-xileno (c). O desenvolvimento desta análise será explicado no próximo tópico

5.2.Sistema benzeno, tolueno e orto-xileno

Os dados de entrada serão utilizados para a obtenção da coluna real uma razão de refluxo estabelecida entre valores 5% e 20% acima da razão de refluxo mínima (LIU, MCGEE E EPPERLY,1987). O refluxo será fixado em de 20% acima do refluxo mínimo. A composição da alimentação é respectivamente 0,333, 0,333 e 0,334. Os valores fixados para este sistema foram uma recuperação no topo do tolueno de 99%, pressão de 2 bar, condição térmica de líquido saturado e vazão na alimentação de 1kmol/h para a coluna inicial. A coluna simulada apresentou 20 estágios, o posicionamento do estágio da alimentação localizado no estágio 10 a partir do topo.

5.2.1. Análise

Este sistema gerou cinco combinações de pseudo-binário, sendo elas: (a)/(bc), (ab)/(c), (a)/(b), (a)/(c) e (b)/(c). Conforme foi mencionado no capítulo 2, as combinações calculadas geram perfis de *temperatura-entalpia* completamente diferentes e consequentemente com propostas de otimização de coluna bem distintas Figura 2-23, onde

as propostas de modificação para o pseudobinário adotado por DHOLE, numa análise com o perfil de perdas de exergia foi identificados conflitos quanto as mudanças na coluna. Todas as combinações serão analisadas e comparadas posteriormente. Entretanto, como cada perfil ($T-H$) indica através da configuração uma proposta diferente, a análise será baseada nas propostas de modificações do perfil de perdas de exergia. O objetivo desta análise é identificar *qual ou quais* pseudobinários podem mostrar conflitos após as modificações realizadas e verificar se algum pseudobinário não apresentará algum tipo de conflito após as modificações realizadas. No caso, estes conflitos seriam margem para outras modificações.

Para este sistema, a distribuição de perdas de exergia entre as seções está desproporcional, onde a retificação demonstra menores perdas em relação a outra seção da coluna e alimentação apresenta um pico de perdas de exergia nesta região. Portanto, o uso de um preaquecimento da alimentação e da alocação de um trocador intermediário é viável para redistribuir as perdas de exergia na coluna, Figura 5-1.

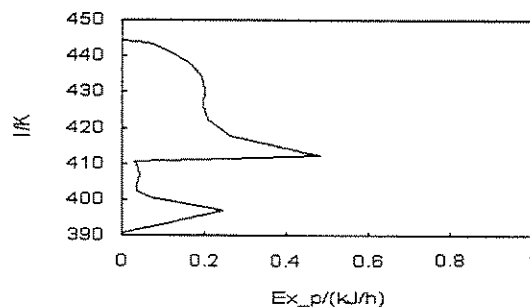


Figura 5-1: Perfil de perdas de exergia numa coluna.

A Figura 5-2 demonstra várias combinações de chave leve e pesada para este sistema. A Figura 5-2 (a) mostra a combinação (a)/(b)c. O perfil reversível indica que existe um grande patamar na região da alimentação, mostrando a possibilidade de preaquecer a alimentação e/ou uma mudança do estágio da alimentação na coluna. A Figura 5-2 (b) mostra a combinação (ab)/(c) onde no perfil reversível onde existe um escopo para diminuição do refluxo semelhante ao perfil quase-reversível, a possibilidade de preaquecer a alimentação e/ou mudança no estágio da alimentação. A Figura 5-2 (c) ilustra o pseudobinário (a)/(b) onde no perfil reversível é mostrado um grande patamar na alimentação indicando um escopo para mudança da localização da alimentação na coluna,

preaquecimento da alimentação e alocação de refeedor intermediário. A Figura 5-2 (d), onde o pseudobinário é (a)/(c), o perfil reversível mostra uma margem para mudança da localização da alimentação na coluna, preaquecimento da alimentação e alocação de refeedor intermediário e diminuição do refluxo. A Figura 5-2 (e), onde o pseudo binário é (b)/(c), mostra um perfil reversível mostrando um escopo para redução de refluxo semelhante ao perfil quase-reversível e uma mudança da alimentação na coluna.

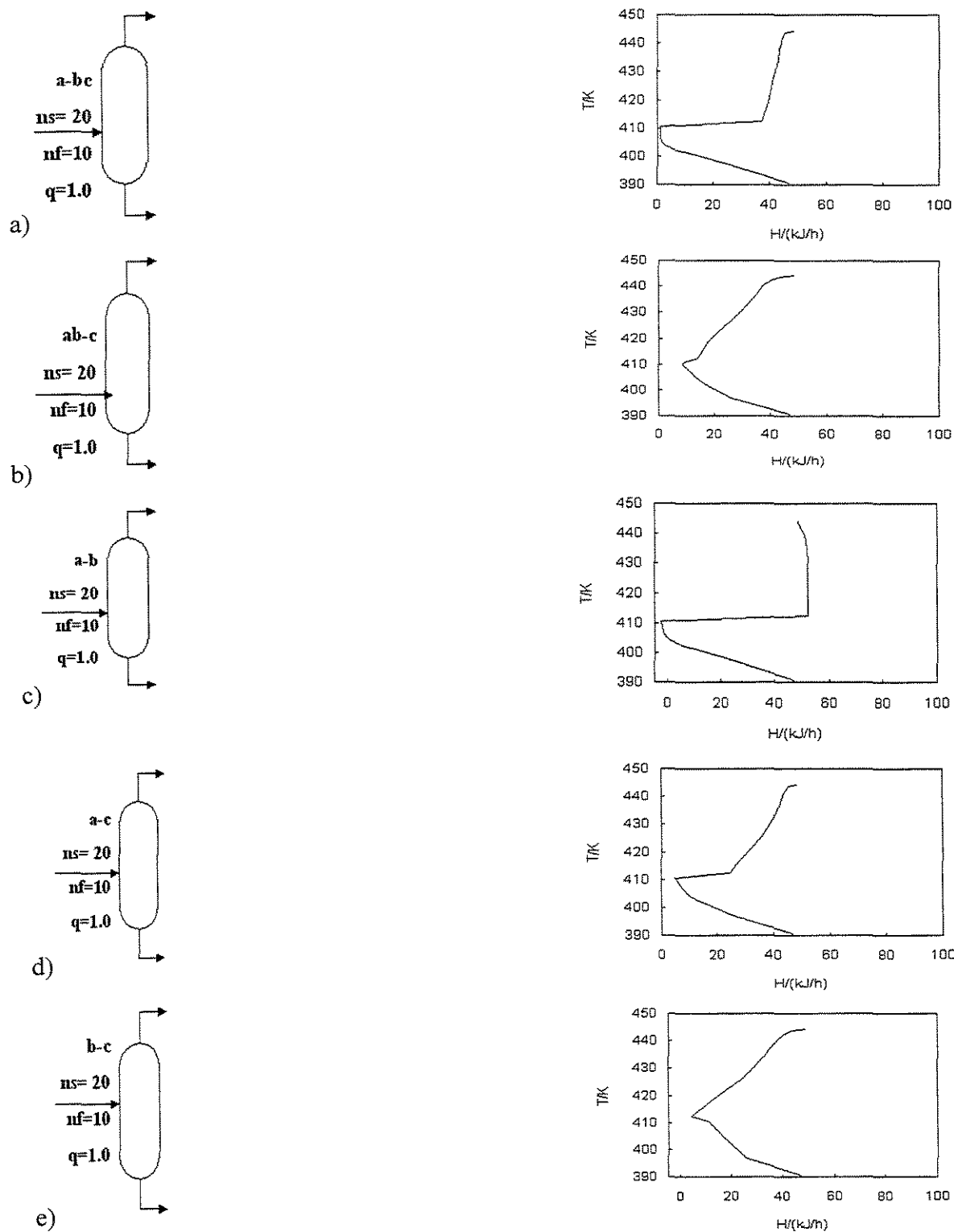


Figura 5-2: Comparação das combinações de pseudo-chaves para o perfil reversível com o perfil rigoroso para o sistema ternário em estudo.

As modificações realizadas para os 5 pseudobinários estão exemplificadas na Figura 5-3. Os gráficos são respectivamente: os pseudobinários (a)/(bc), (ab)/(c), (a)/(b), (a)/(c) e (b)/(c). As modificações foram propostas com base na análise realizada com perfil de perdas de exergia. Nas modificações propostas, modificou o estágio da alimentação para o estágio 8 a partir do topo, preaqueceu a alimentação em 60% e alocou um condensador intermediário para realizar uma redistribuição das perdas de exergia na coluna. O condensador foi alocado no estágio 6 a partir do topo com carga térmica de 20000J/h.

Nos pseudobinários (a)/(bc) e (a)/(b), as modificações realizadas aumentaram o consumo de energia da coluna. O patamar continuou presente indicando a possibilidade de outras modificações em relação à alocação de um refeedor intermediário.

A combinação (a)/(c), as modificações aumentaram o escopo para redução de refluxo. Entretanto, as modificações realizadas para os pseudobinários (ab)/(c), (b)/(c) não mostraram conflitos, ou seja, após as modificações a configuração do perfil não apresentou escopo para outras modificações. O fato destes pseudobinários não terem indicado inicialmente as mesmas modificações propostas pelo perfil de perdas de exergia, não acarretou em conflito.

Em relação as distribuição de perdas de exergia na coluna, o preaquecimento redistribuiu as grandes perdas no esgotamento. A alocação de um condensador diminuiu as perdas do esgotamento. Contudo a região da alimentação é responsável pelas grandes perdas na coluna.

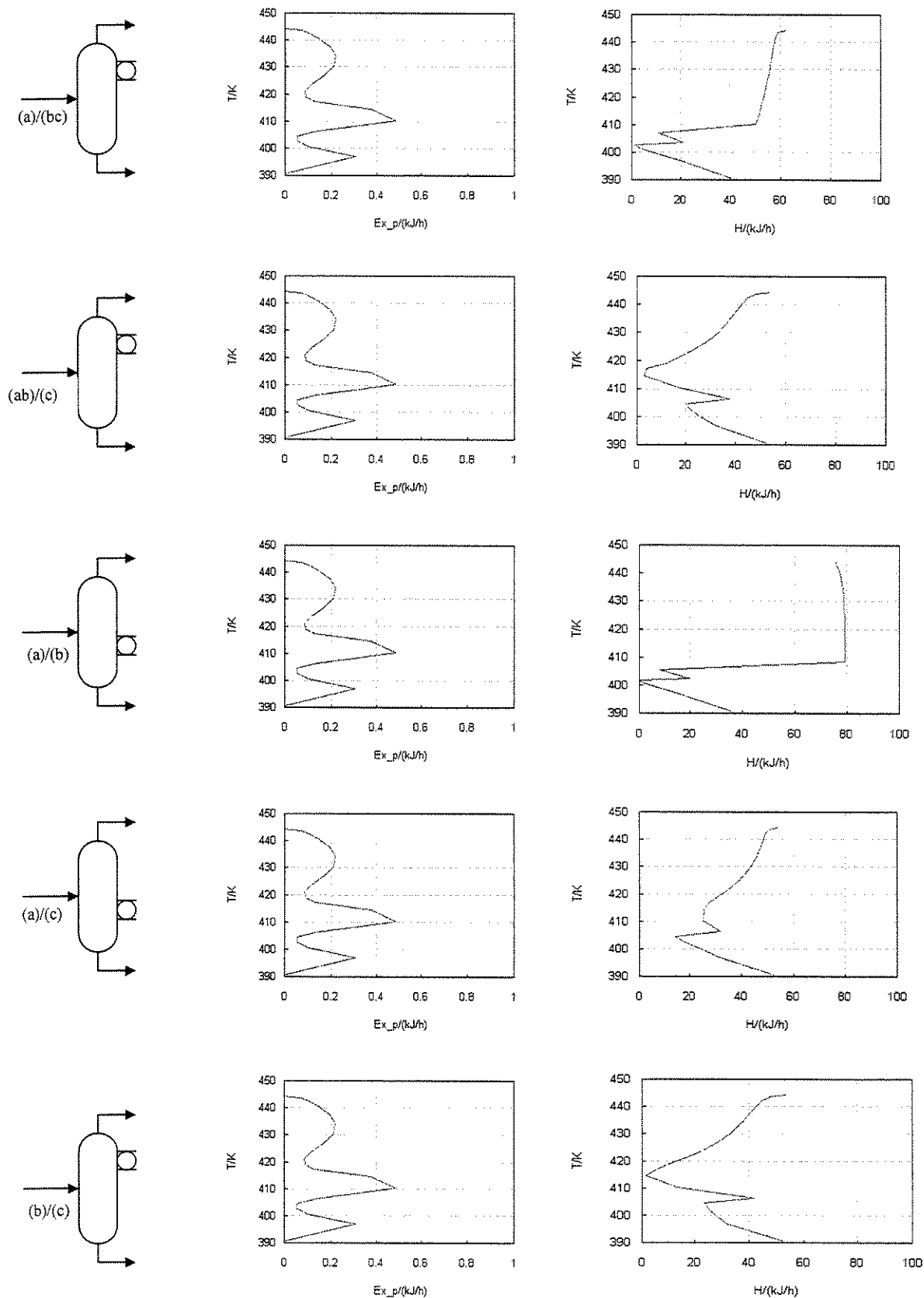


Figura 5-3: Modificações propostas.

Portanto, as combinações de pseudobinários ideais são (ab)/(c), (b)/(c). Entretanto, para sistemas com muitos componentes esta sistematização em analisar todos as combinações com base no perfil de exergia não seria viável pelo o número de pseudobinários que poderiam ser gerados a partir do número de componentes. Entretanto, para este sistema multicomponentes simples a análise será inicialmente modificada. A escolha da melhor combinação chave leve e pesado será realizada comparando o perfil reversível de DHOLE com o perfil quase-reversível rigoroso (ZEMP, 1994; KHOELER, 1991; MAIA, 2000). Esta nova metodologia será explicada no próximo item.

5.3. Nova proposta

No item anterior as análises foram realizadas seguindo o seguinte critério. As modificações propostas através do gráfico de perdas de exergia seriam aplicadas aos pseudobinários. O motivo de se basear as análises no perfil de perdas de exergia consiste que o perfil reversível (para este sistema) mostra cinco possibilidades diferentes de propostas de modificações para otimizar a coluna. Ao contrário do perfil reversível, o perfil de perdas de exergia parte da análise de um gráfico somente, independente do número de componentes do sistema.

A resolução apresentada por Dhole para obtenção do perfil reversível para um sistema multicomponente é realizada numa aproximação, ou seja, os componentes da coluna são agrupados em chave “leve” e “pesada”, formando um pseudobinário. Em decorrência disso, a influência da distribuição dos componentes não-chave na coluna deixa de ser computada. Ao contrário de Dhole, KAIBEL (1987) propõe um método rigoroso de cálculo da coluna reversível através da resolução sistemas não lineares, considerando que os cálculos realizados obedecem à distribuição reversível dos componentes não-chave entre os produtos, Figura 5-4.

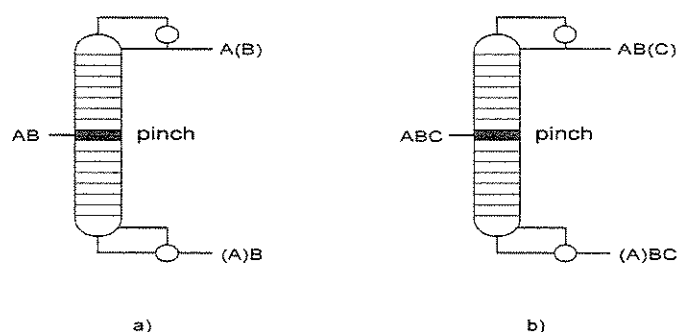


Figura 5-4: Localização do *pinch* em colunas reversíveis: sistema binário (a), e sistema multicomponente (b).

KOEHLER (1991) desenvolveu um modelo matemático que permite a obtenção dos dados dos *pinches*. Baseia-se na determinação de um ângulo mínimo, cujos vetores são linhas que conectam a composição de cada *pinch* com a composição da alimentação. Assim tem-se a localização dos *pinches* na coluna, Figura 5-5. A coluna multicomponente calculada opera com a distribuição irreversível dos componentes não-chave nos produtos tem a localização dos *pinches* afastada do estágio da alimentação. Neste caso as regiões reversíveis da coluna são localizadas acima do *pinch* superior e abaixo do *pinch* inferior. Esta irreversibilidade na região da alimentação é gerada pela impossibilidade de igualar a composição e temperatura da corrente da alimentação com a composição e temperatura das correntes no estágio da alimentação. Este perfil é denominado de quase-reversível. Os dados dos perfis de temperatura, vazão e composição não são obtidos a partir de uma simulação. Eles são calculados a partir de um modelo matemático cuja solução é feita através de várias interações. Na solução é necessário o uso de uma sub-rotina de cálculo de propriedades físicas. No caso é obtido um perfil um perfil rigoroso, ou seja, que considera a irreversibilidade na região da alimentação, seção da localizada na alimentação entre os *pinches* no perfil, Figura 5-5. Teoricamente não é possível operar uma coluna de destilação multicomponente como reversível para uma separação de interesse econômico, mesmo que fossem satisfeitas as exigências de um número infinito de estágios.

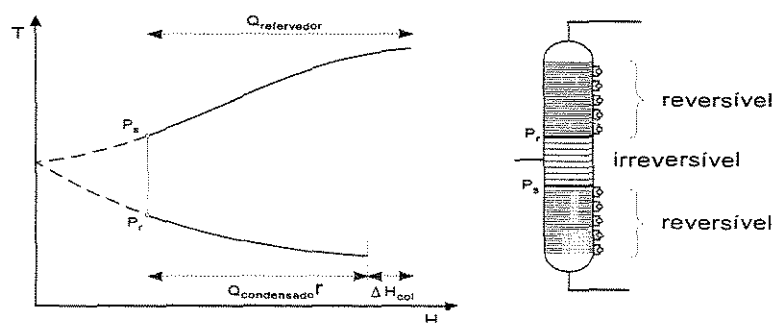


Figura 5-5: Relação entre os *pinch* da coluna e as seções reversíveis.

A Figura 5-5 mostra um exemplo do perfil quase-reversível obtido. Nesta figura existem dois pontos *pinch*, um *pinch* da retificação e outro *pinch* do esgotamento pode ser tomada totalmente reversível pela adição de infinitos condensadores e refeedores laterais, respectivamente. A região que corresponde ao prato da alimentação, região entre os pontos *pinch*, contudo será sempre irreversível. As seções de retificação e esgotamento da coluna quase-reversível podem ser vistas como uma série de pontos *pinch*. A cada *pinch* da seção de retificação existe um *pinch* correspondente na seção de esgotamento de forma a satisfazer o balanço global de energia Figura 5-5.

O objetivo em utilizar o perfil quase-reversível rigoroso neste capítulo é comparar as diferentes escolhas dos componentes chaves do perfil reversível com um perfil rigoroso. A melhor combinação de "chave-leve" e "chave-pesado" que forma o perfil reversível de um sistema multicomponentes é ou serão as combinações que apresentarão uma configuração semelhante à do perfil quase-reversível rigoroso e se estas combinações serão similares as combinações indicadas pela análise realizada no item 5.2.1.

5.3.1. Análise

A Figura 5-6 mostra a esquematização do procedimento adotado para análise. O sistema a ser analisado será o sistema benzeno, tolueno e orto-xileno. O programa utilizado para o cálculo do perfil quase-reversível (ZEMP,1994) calcula os perfis de vazão, composição e temperatura a partir da resolução das equações de estado de Peng-Robison (SANDLER, 1989), utilizando sub-rotina de cálculo de propriedades físicas. A solução da coluna reversível é realizada a partir da condição da alimentação (composição e

temperatura) em direção aos dois extremos da coluna. Para o cálculo da localização dos *pinches* é utilizado o algoritmo proposto por KOEHLER (1991).

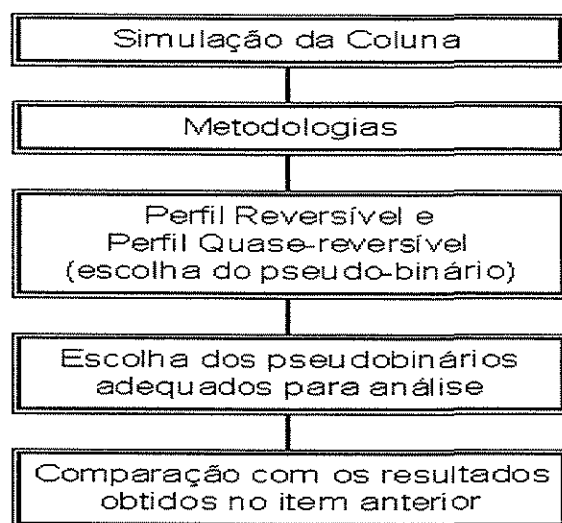


Figura 5-6: Procedimento de análise do sistema ternário.

Na figura 5-7 mostra os pseudobinários e o perfil quase-reversível A localização dos *pinches* para o perfil quase-reversível está entre 410K e 420K. Entretanto, os pseudobinários estão como os *pinches* localizados na temperatura próxima a 410K. O escopo para redução de refluxo estão iguais para as combinações (ab)/(c) e (b)/(c). A cargas térmicas do pseudobinário (a)/(b) estão completamente diferentes do quase-reversível, ao contrário das demais configurações. As configurações (a)/(bc), (a)/(b) e (a)/(c) apresentam patamares na região da alimentação. Justamente estas configurações que apresentam uma configuração completamente diferente da do perfil quase-reversível apresentaram conflitos quando analisadas com o perfil de perdas de exergia, no item 5.2.1. Os pseudobinários (ab)/(c) e (b)/(c) são semelhantes ao perfil quase-reversível e estes quando analisados com o perfil de perdas de exergia não apresentaram conflitos, ou seja, após as modificações realizadas estes não mostraram margem para outras modificações.

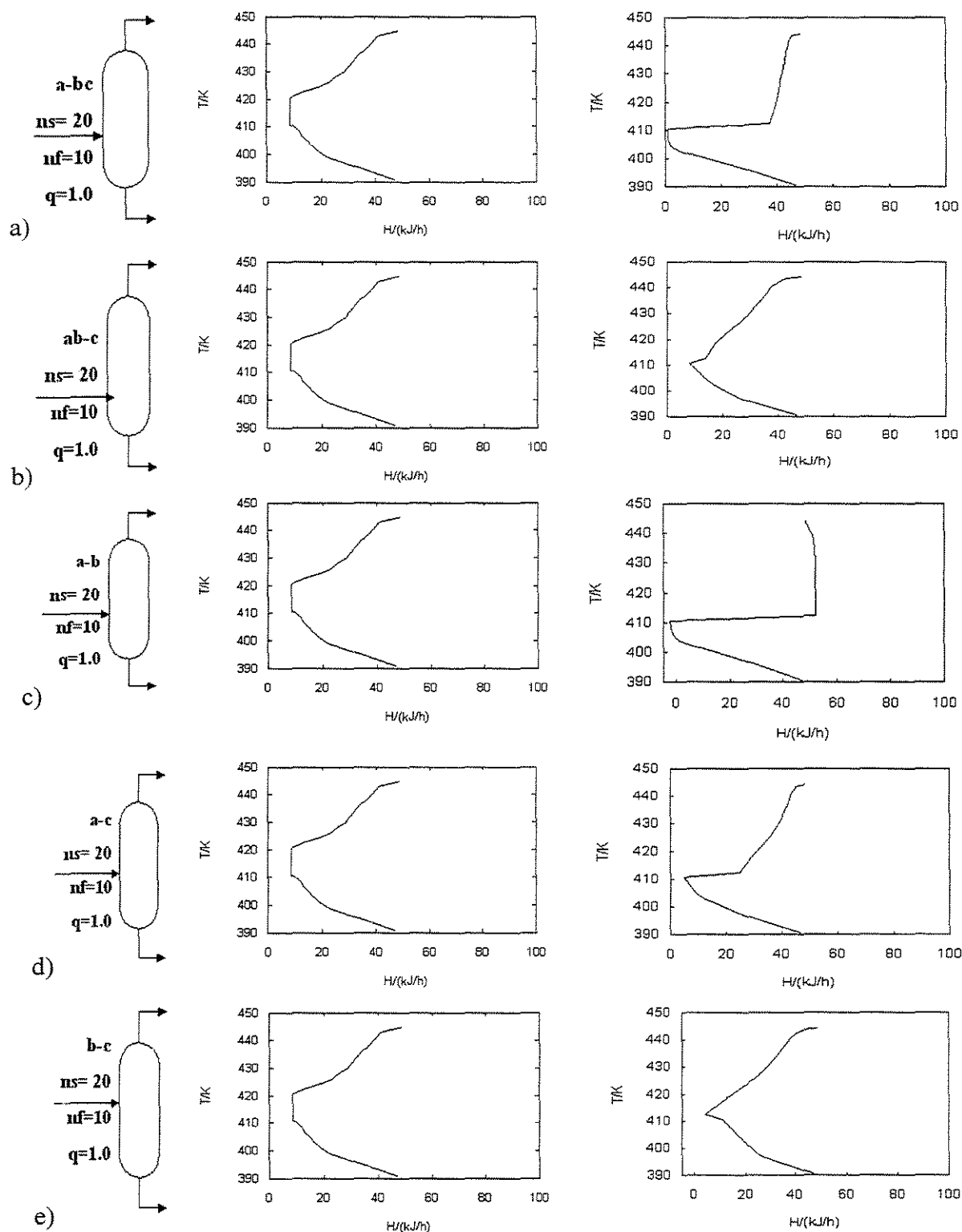


Figura 5-7: Comparação das combinações de pseudo-chaves para o perfil reversível com o perfil rigoroso para o sistema ternário em estudo.

No caso de uma análise de um multicomponente com muitos componentes,

adotando este procedimento a análise será mais viável, pois o número de pseudobinários analisados seria diminuído. No caso de multicomponentes, o uso do pseudobinário adequado acarreta em minimização dos conflitos na análise, ou seja, as propostas de cada perfil, no caso perfil de perdas de exergia e o perfil reversível da coluna proposto Dhole, serão semelhantes para os pseudobinários análogos ao perfil quase-reversível rigoroso.

5.4.Comentários e Conclusões

Os estudos realizados neste capítulo tiveram como objetivo eliminar os conflitos identificados nos capítulos anteriores, ou seja, se numa análise conjunta com ambas as metodologias, existiria um ou mais pseudobinário(s) que não mostrasse conflitos quanto as propostas de modificação. Assim ambas as metodologias poderiam ser utilizadas onde cada uma contribuiria para a otimização do ponto de vista termodinâmico.

Duas propostas de eliminação de conflitos foram implementadas e estudadas para o sistema ternário. Na primeira proposta, a resolução do perfil reversível gerou 5 pseudobinários e a análise foi realizada baseando-se nas propostas de modificações do perfil de perdas de exergia e foi verificado que dois pseudobinários (ab)/(c) e (b)/(c) não apresentaram conflitos após as modificações, ou seja, após as mudanças sugeridas não apresentou escopo para outras modificações.

Na outra análise, uma comparação entre os pseudobinários e o perfil quase-reversível rigoroso. Os estudos mostraram que para este sistema, justamente os pseudobinários que são semelhantes ao quase-reversível rigoroso não mostraram conflitos nas propostas de modificação para coluna item 5.2.1. Portanto as combinações ideais são: (ab)/(c) e (b)/(c). Portanto, para sistemas ternários e multicomponentes, o uso do quase-reversível é uma ferramenta que torna a análise mais simplificada, ou seja, sem precisar analisar todos os outros pseudobinários. Entretanto, essa metodologia apresentou a desvantagem de demandar um grande esforço computacional e ser restrita a alimentação líquido saturado e colunas simples (sem retiradas laterais, varias alimentações).

Os estudos realizados neste capítulo mostraram que a análise conjunta deve ser realizada, pois cada metodologia contribui com a identificação de metas de redução do consumo de energia com modificações nas condições operacionais da coluna.

Capítulo 6. Conclusões e Sugestões

O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma sistemática onde será utilizada a análise energética e a análise exérgica de colunas de destilação e convergí-las para um procedimento combinado, para uma redução do uso de energia mais prática e viável. Esta sistemática foi desenvolvida em varias etapas:

- O estudo de cada método aplicado em sistemas binários e multicomponentes.
- A análise comparativa entre o perfil reversível e perfil de perdas de exergia, com base nos resultados obtidos referentes aos sistemas de separação.
- A proposta de eliminação dos conflitos que surgiram com o estudo de multicomponentes.

Os estudos mostraram que a otimização do ponto de vista termodinâmico para sistemas de separação é viável com a utilização conjunta de ambas as metodologias, onde a análise é rigorosa para sistemas binários equimolares. Os sistemas não-equimolares binários a análise exérgica estende as propostas para a alocação de trocadores intermediários de calor. Para sistemas multicomponentes, os conflitos identificados são eliminados com a comparação dos pseudobinários formados com o perfil quase-reversível rigoroso.

Os estudos comprovaram que a análise energética continua com sua validade para diagnosticar os sistemas de separação, propondo modificações em nível de utilidades e redução de refluxo. Entretanto, com a ajuda da análise exérgica pode-se ampliar esta avaliação, direcionando as propostas de modificação para seções termodinamicamente ineficientes identificadas.

A realização de uma avaliação energética faz-se necessária inicialmente, a análise exérgica, com base no segundo princípio. Portanto, as análises da primeira e segunda lei são complementares, contribuindo para avaliação dos sistemas de separação. Através destes conceitos combinados existe uma avaliação do processo de destilação, apresentando as seguintes vantagens:

- A identificação da localização, magnitude e a fonte das perdas exergéticas no processo.
- Propostas de metas para redução do consumo de energia da coluna.
- Apresenta bases teóricas e práticas do uso racional de energia.

6.1.Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho mostrou que o perfil reversível (amplamente comentado na literatura) não é uma forma eficiente de analisar e modificar colunas, uma vez que apresenta a dificuldade de escolher o conjunto pseudobinário mais adequado para a determinação do perfil reversível. Mesmo para sistemas simples (como alguns dos que foram utilizados neste trabalho), a análise das possíveis combinações de pseudobinários é uma tarefa exaustiva. O uso do perfil quase-reversível pode ser utilizado para identificar o melhor conjunto de componentes pseudobinários, mas a sua aplicação é restrita a colunas com uma única alimentação e sem retiradas laterais.

Para tornar a metodologia mais geral, com aplicação para sistemas multicomponentes mais complexos, como, por exemplo, à separação de frações de petróleo, é necessário o estudo da viabilidade da obtenção do perfil de perdas de exergia e do perfil reversível, considerando o grande número de componentes. Este estudo necessariamente envolveria o desenvolvimento de uma regra para a determinação do conjunto pseudobinário mais adequado.

Outra área importante é a separação de misturas não ideais, onde a necessidade de computar propriedades físicas como a *exergia* para soluções não-ideais exige um estudo detalhado, não encontrado na literatura consultada.

Referências Bibliográficas

- BANDYOPADHYAY, S., MALIK, RAJAN K. e SHENOY, UDAY V., *Temperature-Enthalpy Curve For Energy Targeting Of Distillation Columns*, Computers & Chemical Engineering, v.22, p. 1733-1744, 1998
- BENEDICT, M. *Multistage Separation Processes*. Trans. I.Ch.p.43-41, 1947.
- FARIA, S. H. B. de *Estudo Energético De Colunas De Destilação Através De Análise Exergética*, Tese de mestrado- Unicamp, 1996.
- DHOLE, V.R. *Distillation Column Integration and Overall Design of Subambient Plants*, Tese de Doutorado, UMIST, Inglaterra, 1991.
- DENBIGH, K.G. *The Second-law Efficiency of Chemical Processes*, Chemical Engineering Science, v. 6, p. 1-9, 1956.
- DHOLE, V. e LINNHOFF, B. *Setting Targets for Distillation*, Process Engineering junho, 33-40, 1992.
- DHOLE, V. e LINNHOFF, B. *Distillation Column Targets*, Computers & Chemical Engineering, v. 17, p. 549-560, 1993.
- FITZMORRIS, R.E. e MAH, R.S.H. *Improving Distillation Column Design Using Thermodynamic Availability Analysis*. A.I Ch.E.J. v. 26, p. 265-273, 1980.
- FONYO, Z. e MIZEY, P. *Economics Applications of Heat Pumps in Integrated Distillation Systems*, Heat Recovery Systems & CHP, v. 14, nº 3 , p. 249 – 263, 1994.
- FOUST, A. S. , WENZEL, L. A., CLUMP, C. W., MAUS, L. e ANDERSEN, L.B. *Princípios das Operações Unitárias*, Guanabara Dois, p. 116 - 120.
- FRANKLIN, N.L. e WILKINSON, M. B. *Reversibility in the Separation of Multicomponent Mixtures*, Transaction of the Institute of Chemical Engineers, v. 60, p. 276-282, 1982.
- DE FREITAS, V. A. *Análise termodinâmica em Projetos de Processos: Estudo da Separação de Hidrocarbonetos à baixas Temperaturas*. Tese de Mestrado – USP, 1996.
- GOMEZ-MUNOZ A. e SEADER, J.D. *Synthesis of Distillation Trains by Thermodynamic Analysis*, Computers & Chemical Engineering, v. 9, n. 4, p.311-341,1985.

- HENLEY, E.J. e SEADER, J.D. *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, John Wiley, 1981.
- HO, F.G. e KELLER, G.E. *Process integration. In Recent Development In Chemical Process And Plant Design*. Y.A.Liu, H.A. McGee e W.G. Epperly, eds. Willey, New York, 1987.
- KAIBEL, G.E. *Gestaltung destillativer Trennung unter Einbeziehung Thermodynamischer Gesichtspunkte*, Ph.D. Thesis, University of Munique. 1987.
- KING, C.J. *Separation Processes*, McGraw-Hill, 1980.
- KISTER, H. Z. *Distillation-Design*, McGraw-Hill, New York, 1992.
- KOEHLER, J., POELLMANN, P. e BLAß, E. *Berechnung des Minimalen Energiebedarfs nichtidealer Rektifikationen*, Chemie-Ingenieur-Technik, v.65, n. 2, p. 143-156, 1993.
- KOEHLER, J. e BLAß, E. *Synthesis of Distillation Sequences Using the Reversible Multicomponent Distillation Schem*, AIChE Spring National Meeting, 1991.
- LIU, Y.A., MCGEE, H. A. Jr, EPPERLY, W.R. *Recent Developments in Chemical Process and Plant Design*, John Willey & Sons, p.104-113, 1987.
- LINNHOFF, B e FLOWER, J. R. *Synthesis of heat Exchanger Networks- Parte I e II*, IChemE, 24(4): 633-654, 1983.
- LINNHOFF, B. e SMITH, R. "The Pinch Principle", Mechanical Engineering, p. 70 – 73, 1988.
- LINNHOFF, B. *A User Guide on Process Integration for the Efficient Use of Energy*, IChemE, Rugby, 1982.
- LINNHOFF, B. *Pinch Analysis: State-of-the-Art Overview*, Trans. I ChemE., v. 71, part a, 1993.
- LINNHOFF B, et all. *Introduction to Pinch Tecnolog*, v. 2., p. 23-26, 1998.
- MAIA, L.O., ZEMP, R. J. *Thermodynamics Analysis of Multicomponent Distillation Columns: Identifying Optimal Feed Conditions*, Brazilian Journal Of Chemical Engineering, v. 17, nº 04-07, p. 751 – 759, 2000.

- MANLEY, D.B., CHAN, P.S e CRAWFORD, D.B. *Thermodynamic Analysis of Ethylene Plant Distillation Columns*, AIChE Spring National Meeting, 1992.
- MAH, R.S.H., NICHOLAS Jr., J.J. e WASNIK, R.B. *Distillation with Secondary Reflux and Vaporization: A Comparative Evaluation*, AIChE Journal, v. 23, nº 5, 651 – 658, 1977.
- OGNISTY, T.P. “Thermodynamics Analysis of Distillation Columns”, AIChE Spring National Meeting, 1993.
- OGNISTY, T.P. “Analysis Distillation Columns With Thermodynamic”, Chemical Engineering Progress, p. 40 – 46, 1995.
- ROSE, L.M. “Distillation Design in Practice”, Elsevier Science Publishers B.V., p. 63-65, 1985.
- SMITH, R. e ZEMP, R. J. *Process Integration of Separation Systems*, Separation Technology: the next ten years, IChemE, Inglaterra, 1994.
- SOPHOS, A.G. *Multiojective Analysis and Planning of the Petrochemical Industry, and the Synthesis of Distillation Sequences with Energy Integration Schemes*, Tese de Doutorado, University of Minnesota, 1981.
- TORRES, E. A. “Avaliação Exergética e Termoeconômica de um Sistema de Cogeração de um Pólo Petroquímico”, Tese de Mestrado – UNICAMP, 1999.
- TERRANOVA, B.E e WESTERBERG, A.W. *Temperature-Heat Diagrams For Complex Columns*. Ind.Eng. Chem, v. 42, p. 871-876, 1989.
- VISWANATHAN, J. e GROSSMANN, J.E. 1993. *An Alternative MINLP Model for Finding the Number of Trays for a Specified Separation Objective*, Comput. Chem. Eng., Vol. 17, pg 949 – 955.
- ZEMP, R.J., DE FARIA, S.H.B. e MAIA, M.L.O. *Driving Force Distribution And Exergy Loss In The Thermodynamic Analysis Of Distillation Columns*, Computers and Chemical Engineering, v. 21, p. 523-528, 1997.
- ZEMP, R.J. *Thermodynamic Analysis of Separation Systems*, Tese de Doutorado, UMIST-Manchester, Inglaterra, 1994.