

SIMULAÇÃO EM REGIME ESTACIONÁRIO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO AZEOTRÓPICA DE ALTA PUREZA

RIBEIRO, O. M. dos S. ¹, VASCONCELOS, L. G. S. ²

¹Universidade Federal de Campina Grande - UFCG/Departamento de Engenharia Química - DEQ, R. Aprígio Nepomuceno – 296 / Jd Paulistano – CEP 58100 – Campina Grande - PB, Brasil, otaviaeq@yahoo.com.br

² Universidade Federal de Campina Grande - UFCG/ Departamento de Engenharia Química - DEQ, Orientador, Avenida Aprígio Veloso, 882 / Bodocongó - CEP 58109-970 - Campina Grande - PB, Brasil, vasco@deq.ufcg.edu.br

Palavras-chave: Destilação azeotrópica, Simulação, HYSYS.

Área do Conhecimento: III - Engenharias

Resumo- A purificação de materiais por destilação é uma operação proeminente em diversos processos químicos, sendo muito utilizada nas indústrias de petróleo e petroquímica. A destilação é um processo de separação que se baseia na diferença de volatilidade dos componentes a serem separados. Na destilação azeotrópica é adicionado um agente de arraste, com o objetivo de formar um novo azeotrópo com um dos componentes inicialmente presentes na mistura. Entretanto, em algumas situações, não se observa a presença de um azeotrópo na corrente de alimentação, mas sim, uma mistura que tem potencial para formar ponto azeotrópico ao longo da coluna. A coluna de destilação em estudo apresentava este tipo de comportamento azeotrópico heterogêneo não convencional, a qual foi simulada para validar o modelo matemático empregado, utilizando como ferramenta computacional o simulador HYSYS versão 2.4. Portanto, o presente trabalho teve como objetivo simular o comportamento estacionário de uma coluna de destilação industrial.

Introdução

A destilação é um processo de separação que se baseia na diferença de volatilidade dos componentes a serem separados. Portanto, a fase vapor torna-se mais rica no componente mais volátil, à medida que sobe pela coluna, enquanto que a fase líquida torna-se esgotada deste mesmo componente, à medida que desce pela coluna [1,2].

O termo azeótropo é usado para descrever o estado em que um líquido em ebulição produz um vapor com exatamente a mesma composição e, conseqüentemente, o líquido não muda de composição à medida que ele evapora [3] e, a separação por simples destilação torna-se impossível.

Assim, uma das técnicas empregadas é a destilação azeotrópica, onde é adicionado um agente de arraste, com o objetivo de formar um novo azeotrópo com um dos componentes inicialmente presentes na mistura.

A coluna em estudo faz parte de um trem de purificação de 1,2-dicloroetano (EDC) de uma planta comercial de produção de monocloreto de vinila (MVC). É considerada não convencional pelo fato do comportamento azeotrópico ocorrer sob condições, tais como: o agente de arraste já está presente na alimentação e a mistura

comportar-se como azeótropo, estando, porém, longe do ponto azeotrópico [4].

Todos os componentes dessa mistura, que se comportam de modo azeotrópico no interior da coluna, estão presentes na alimentação, que é composta por 1,2-EDC e outras substâncias organocloradas saturadas com água. O comportamento azeotrópico é responsável pela retirada de água pelo topo da coluna, por onde também são retirados os organoclorados de baixa volatilidade, enquanto o 1,2-EDC, seco e com alta pureza, é retirado como produto de base.

A utilização de ferramentas computacionais na área de pesquisa mostra a importância da simulação numérica no estudo dos processos químicos, pois possibilita que o pesquisador trabalhe numa escala menor e obtenha resultados que sejam satisfatórios até mesmo para escala industrial. Assim, a simulação se torna muito importante no desenvolvimento, controle e otimização desses processos. Dessa forma, o presente trabalho teve como objetivo simular o comportamento estacionário de uma coluna de destilação industrial, que apresentava um comportamento azeotrópico heterogêneo não convencional, utilizando como ferramenta computacional o simulador comercial HYSYS versão 2.4.

Materiais e Métodos

Este trabalho utilizou a modelagem matemática para representação de um sistema real. As simulações foram realizadas através de computador de uso pessoal, utilizando como ferramenta o simulador comercial HYSYS versão 2.4.

Então, fez-se a simulação em regime estacionário, onde se escolheu como modelo termodinâmico o de Van Laar. Os elementos utilizados no modelo estacionário foram uma corrente de alimentação (*Material Stream*), e uma coluna de destilação com condensador parcial e refeedor (*Distillation Column*), disponíveis no simulador. A coluna simulada possuía 70 estágios, numerados de cima para baixo, mais o refeedor. A alimentação da torre se dava no prato 21.

Os componentes escolhidos para participarem das simulações foram: 1,2-EDC, CCl₄, e o CHCl₃. E, devido à quantidade de água ser pequena ao longo da coluna, foi tomada a decisão de retirá-la da simulação. Desta forma, a coluna não apresentava três fases, o que facilitou a convergência.

Os dados de entrada da coluna estão descritos na Tabela 1.

Tabela 1- Dados operacionais da coluna

Descrição	Unidade	Valor
Vazão de alimentação	Kg/h	19.680
Temperatura de alimentação	°C	30
Pressão de alimentação	atm	2
Carga do refeedor	Kcal/h	2,1.10 ⁶
Pressão no topo da coluna	atm	1
Pressão na base da coluna	atm	1,35
Vazão de retirada de leves	Kg/h	69

Para uma melhor e mais rápida convergência dos resultados, foram especificadas as vazões de destilado de 69 Kg/h e de vapor da coluna, que foi de 0 Kg/h. Todos os dados foram colocados em base mássica.

A Figura 1 mostra o ambiente de simulação utilizado.

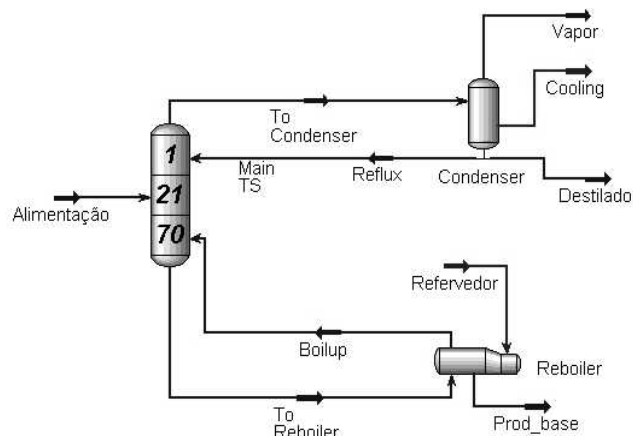


Figura 1 - Ambiente de simulação estacionária

Resultados

Após as simulações, obtiveram-se os seguintes resultados. A Tabela 2 apresenta a composição de cada componente na alimentação, para as condições operacionais utilizadas na simulação em regime estacionário.

Tabela 2 – Dados de composição da alimentação

Componente	Valor experimental	Valor simulado
1,2-EDC	0,9812	0,994665
CCL ₄	0,003239	0,003228
CHCl ₃	0,002115	0,002108
H ₂ O	0,004	0
Somatório	0,990554	1

A Tabela 3 mostra os valores experimental e simulado referentes às composições dos componentes obtidos na base e no topo da coluna em base mássica.

Tabela 3 – Dados experimentais e simulados na base e no topo da coluna

Local	Componente	Experimental	Simulado
Base	1,2-EDC	0,9976	0,998
	CCL ₄	0,002067	0,00196
	CHCl ₃	0,000276	0,000278
Topo	1,2-EDC	0,13	0,113
	CCL ₄	0,33	0,365
	CHCl ₃	0,54	0,522

Na Figura 2, vê-se os perfis de composição do 1,2 - dicloroetano, tetracloreto de carbono e clorofórmio ao longo dos 71 estágios da coluna.

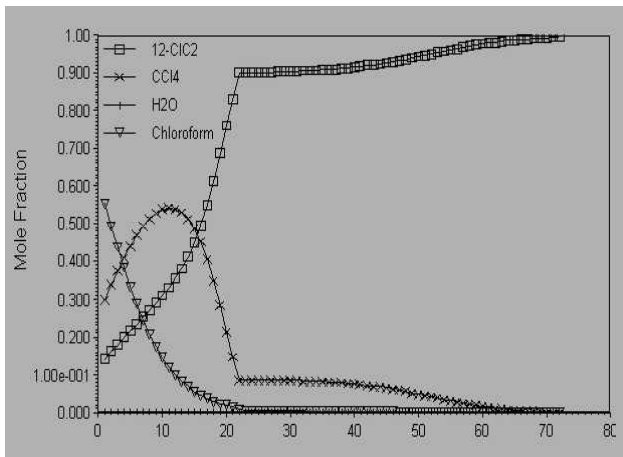


Figura 2 - Perfis de composição

Na Figura 3, tem-se o perfil de temperatura ao longo dos 71 estágios da coluna onde se comparam os dados experimentais e os simulados.

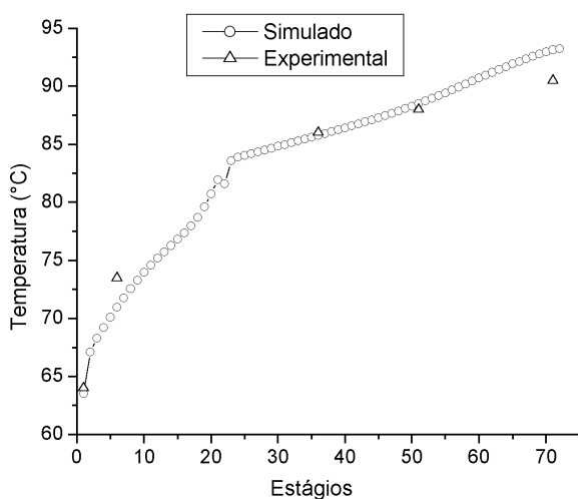


Figura 3 – Perfil de temperatura

Discussão

Analisando os valores obtidos na Tabela 2 para os componentes e comparando-se com os dados experimentais, obteve-se um erro de 1,37% para o 1,2-EDC, 0,34% para o CCl₄, e um erro de 0,33% para o CHCl₃.

De acordo com a Tabela 3, observou-se que os resultados obtidos foram bons, pois os erros foram relativamente baixos, apesar de não se considerar água na alimentação. Ou seja, embora a coluna real contenha água, a sua ausência na simulação não interferiu nos resultados, como mostra a Tabela 4.

Tabela 4 – Erros referentes às composições

Local	Componente	Erro (%)
Base	1,2-EDC	0,04
	CCL ₄	5,18
	CHCL ₃	0,72
Topo	1,2-EDC	13,08
	CCL ₄	10,61
	CHCL ₃	3,33

Analisando o perfil de concentração do CCl₄, na Figura 2, percebeu-se claramente que este é o componente intermediário, pela inversão característica de concentração na zona de retificação. Outra observação é quanto ao grau de pureza do 1,2-EDC no prato de alimentação (21), aproximadamente 90%, o que caracterizou a coluna como uma coluna de alta pureza. Ou seja, a coluna utilizava 71 estágios para elevar a pureza de alimentação em aproximadamente 10%; na base seu valor era aproximadamente de 14%. No caso do comportamento do CHCl₃, percebeu-se que sua maior concentração encontrava-se no topo da coluna.

Na Figura 3 observou-se uma boa concordância entre os dados experimentais e os simulados para o perfil de temperatura ao longo dos 71 estágios da coluna.

Conclusão

Simulou-se o comportamento estacionário da coluna industrial em estudo, utilizando como ferramenta computacional o simulador HYSYS tendo, portanto, alcançado o objetivo deste trabalho.

Os dados obtidos via simulação estacionária foram comparados com os fornecidos pelo sistema real, os quais apresentaram coerência com os valores experimentais. Desta forma, a retirada da água na alimentação não apresentou mudanças significativas nos resultados.

A partir da simulação, obtiveram-se erros de 1,37% para o 1,2-EDC, de 0,34% para o CCl₄, e um erro de 0,33% para o CHCl₃ na composição de alimentação. Observou-se também, um erro de aproximadamente 13% para o 1,2-EDC obtido no topo da coluna e um erro de 10,61% para o CCl₄ também no topo da coluna. Analisando o perfil de temperatura notou-se uma boa coerência dos dados simulados com os experimentais. No caso do perfil de composição não se pôde validar os resultados simulados por não se dispor dos dados experimentais, embora tenha se observado coerência com resultados obtidos, também via simulação, em outro trabalho [2].

Referências

[1] GOMIDE, Reynaldo. Operações Unitárias: Operações de transferência de massa, vol. 4, São Paulo: R. Gomide, p.33-167, 1988.

[2] SILVA, A.A.R., Aspectos Estacionário e Dinâmico de uma Destilação Azeotrópica não Convencional. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal de Campina Grande/UFCCG, 2002.

[3] SMITH, J. M.; NESS, H. C. Van.; ABBOTT, M. M. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 5ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, cap 12, p. 390-95, 2000.

[4] JÚNIOR, L. R. B. Controle de Colunas de Destilação de Alta Pureza: Um Caso Industrial. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal de Campina Grande/UFCCG, 2002.