Simuladores de Processos

Colunas de Destilação

Destilação

Os simuladores de processo da Engenharia Química possuem pacotes capazes de simular vários processos e operações unitárias. Uma operação unitária bastante utilizada nesses simuladores é a destilação.

A simulação utilizando a coluna shortcut é útil para obter uma primeira aproximação do comportamento durante o projeto de uma coluna de destilação, tendo em vista que não leva em consideração todos os parâmetros envolvidos nas diferentes colunas de destilação existentes nos processos industriais. Nessa primeira aproximação, é possível obter as primeiras informações sobre, por exemplo, o número de pratos que a coluna deverá ter, ou qual a razão de refluxo mínima que poderá ser imposta.

A seguir está apresentado um exemplo de implementação de uma simulação de uma coluna de destilação (coluna shortcut) no DWSIM.

Destilação

Exemplo 1:

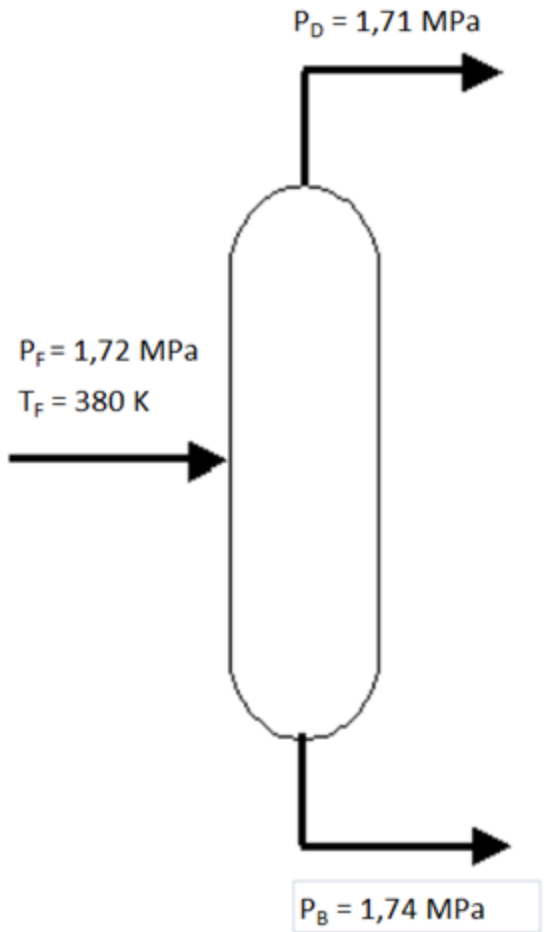
Pretende-se utilizar uma coluna de destilação, para separar uma mistura de cinco alcanos (C_2 a C_6). No processo de separação, o propano (C_3H_8) e o n-butano (C_4H_{10}) são os “compostos chave” (“leve”e “pesado”, respectivamente). A alimentação entra na coluna com uma vazão molar de 126 mol/s à pressão de 1,72 MPa e 380 K. Pretende-se obter no destilado no máximo 2% em mol de n-butano (C_4H_{10}) e na corrente de fundo (resíduo), 2% em mol de propano (C_3H_8) . Considere, inicialmente, uma razão de refluxo igual a 5, condensador tipo “Totalcond”, uma pressão no condensador de 1,71 Mpa e no refervedor de 1,74 MPa. Simule:

a) O Refluxo mínimo; b) O número mínimo de estágios; c) o número de estágios para as condições operacionais do problema; d) A carga térmica no condensador e no refervedor; e) A vazão molar do fluxo de topo e de fundo; f) as frações molares de cada componente nos fluxos de topo e de fundo.

Destilação

Representação do problema:

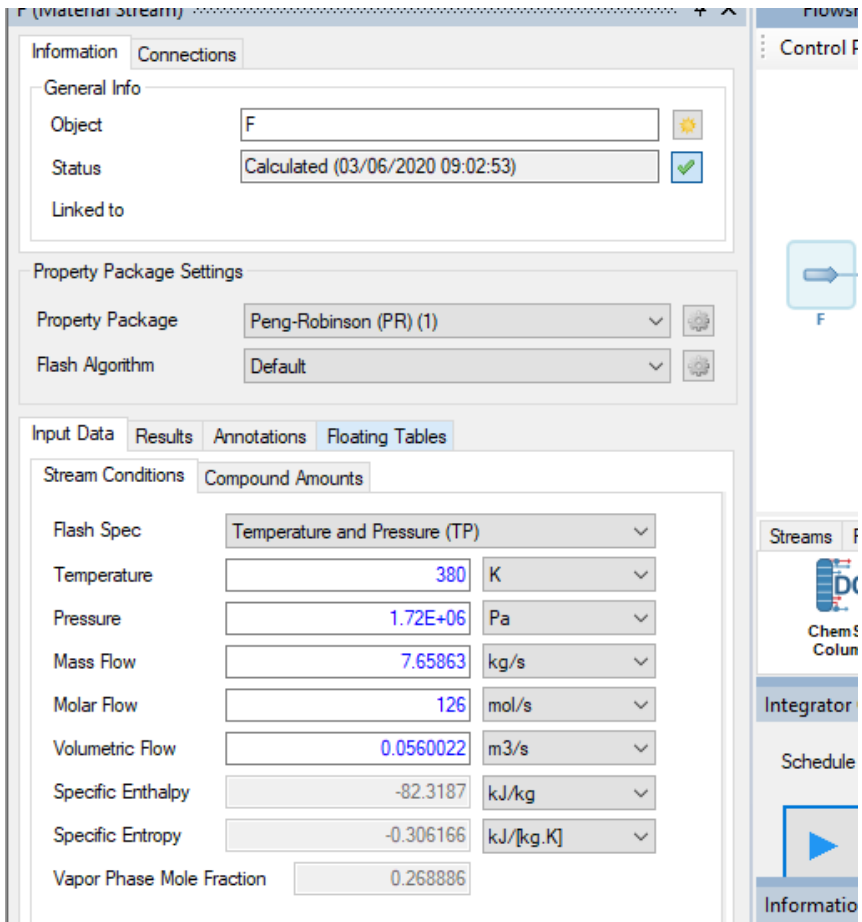
Alimentação, F	
Componente	fluxo (mol/s)
etano	3,8
propano	25,2
n-butano	46,6
n-pentano	44,1
n-hexano	6,3
Total	126

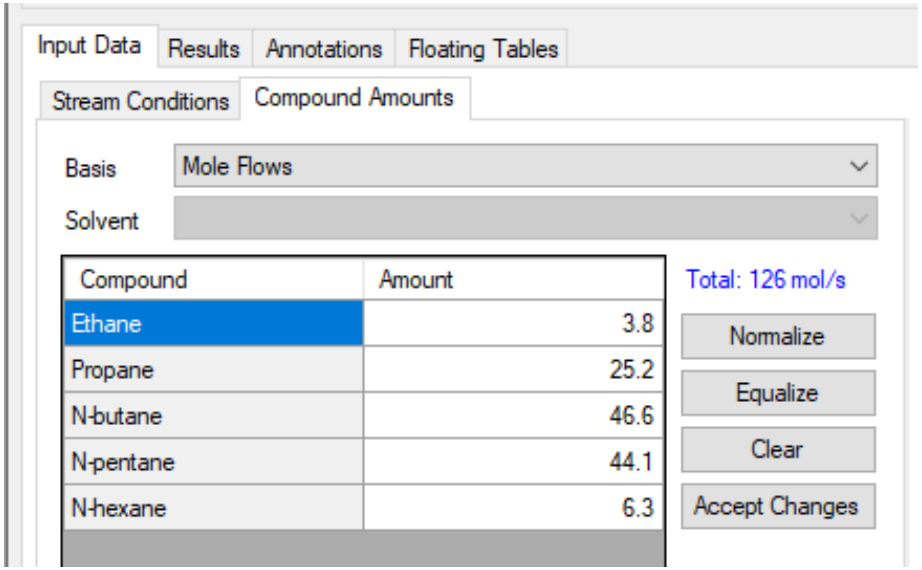


Destilação

Implementação – Etapa inicial do projeto:

1) Adicione todas as espécies químicas envolvidas no sistema em uma nova simulação no DWSIM. Escolha o pacote de fluidos de Peng-Robinson e o sistema internacional de unidades. Adicione e configure uma corrente de alimentação.





Destilação

Implementação – Etapa inicial do projeto:

Corrente de destilado (D)

Temperature	311.018	K
Pressure	1.71E+06	Pa
Mass Flow	1.1707	kg/s
Molar Flow	27.5838	mol/s
Volumetric Flow	0.00212726	m3/s
Specific Enthalpy	-324.412	kJ/kg
Specific Entropy	-1.41673	kJ/[kg.K]

Compound	Amount
Ethane	0.13773033
Propane	0.84215728
N-butane	0.02
N-pentane	3.333655E-05
N-hexane	4.7055266E-09

Produto de fundo (B)

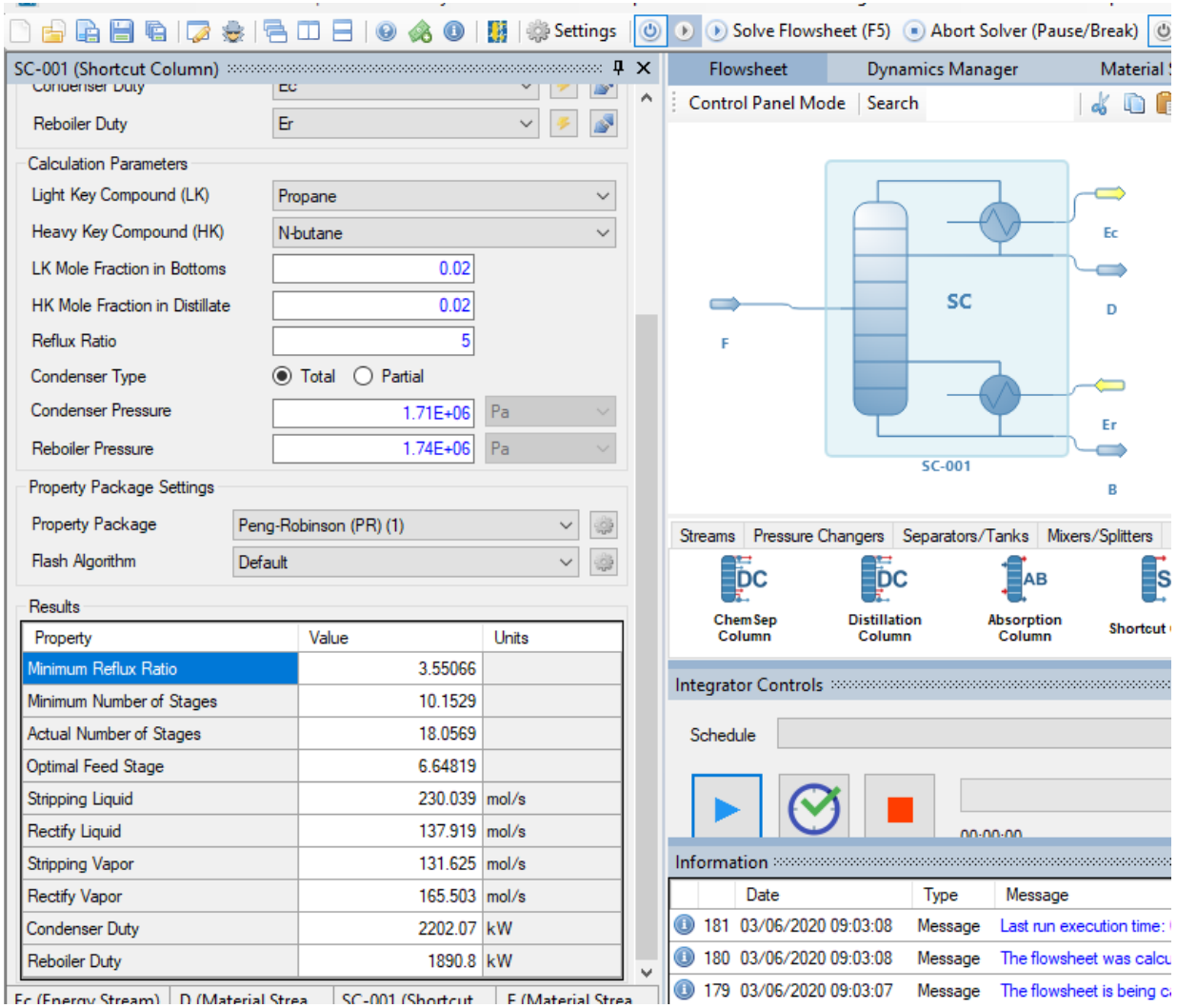
Temperature	399.88	K
Pressure	1.74E+06	Pa
Mass Flow	6.48784	kg/s
Molar Flow	98.414	mol/s
Volumetric Flow	0.0141589	m3/s
Specific Enthalpy	-86.6128	kJ/kg
Specific Entropy	-0.334271	kJ/[kg.K]

Compound	Amount
Ethane	5.8568592E-06
Propane	0.02
N-butane	0.46790358
N-pentane	0.44809746
N-hexane	0.064015257

Destilação

Implementação – Etapa inicial do projeto:

2) Adicione uma Coluna Shortcut e configure (aproveite para inserir a corrente de alimentação F e criar as correntes de matéria e energia). Faça as alterações que julgar necessárias e analise os resultados obtidos.



Destilação

Correção da razão de refluxo: A razão de refluxo de operação (r) é calculada por $r=k*r_{min}$, tendo o utilizador de especificar o parâmetro k. Este parâmetro pode ser otimizado de acordo com critérios econômicos e sabe-se que, habitualmente, o seu valor ótimo se situa entre 1,05 e 1,3, ou seja, a razão de refluxo ótima é tipicamente 5 a 30% acima da mínima. Aqui vamos considerar k = 1,2. Então, deve-se alterar a razão de reciclo para r= 3,6*1,2 = 4,3, obtendo-se os seguintes resultados:

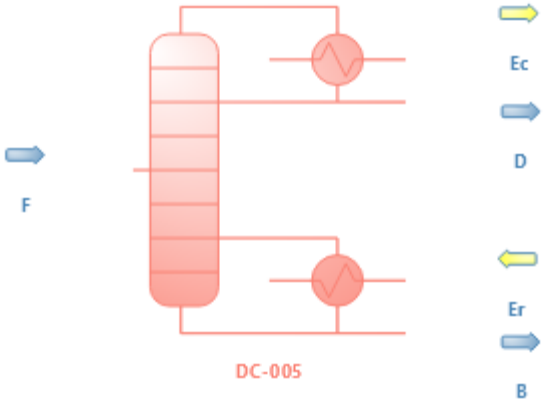
Results

Property	Value	Units
Minimum Reflux Ratio	3.55066	
Minimum Number of Stages	10.1529	
Actual Number of Stages	21.4195	
Optimal Feed Stage	7.88623	
Stripping Liquid	210.731	mol/s
Rectify Liquid	118.61	mol/s
Stripping Vapor	112.317	mol/s
Rectify Vapor	146.194	mol/s
Condenser Duty	1945.16	kW
Reboiler Duty	1633.89	kW

Ec (Energy Stream) | D (Material Strea | SC-001 (Shortcut | E (Material Strea

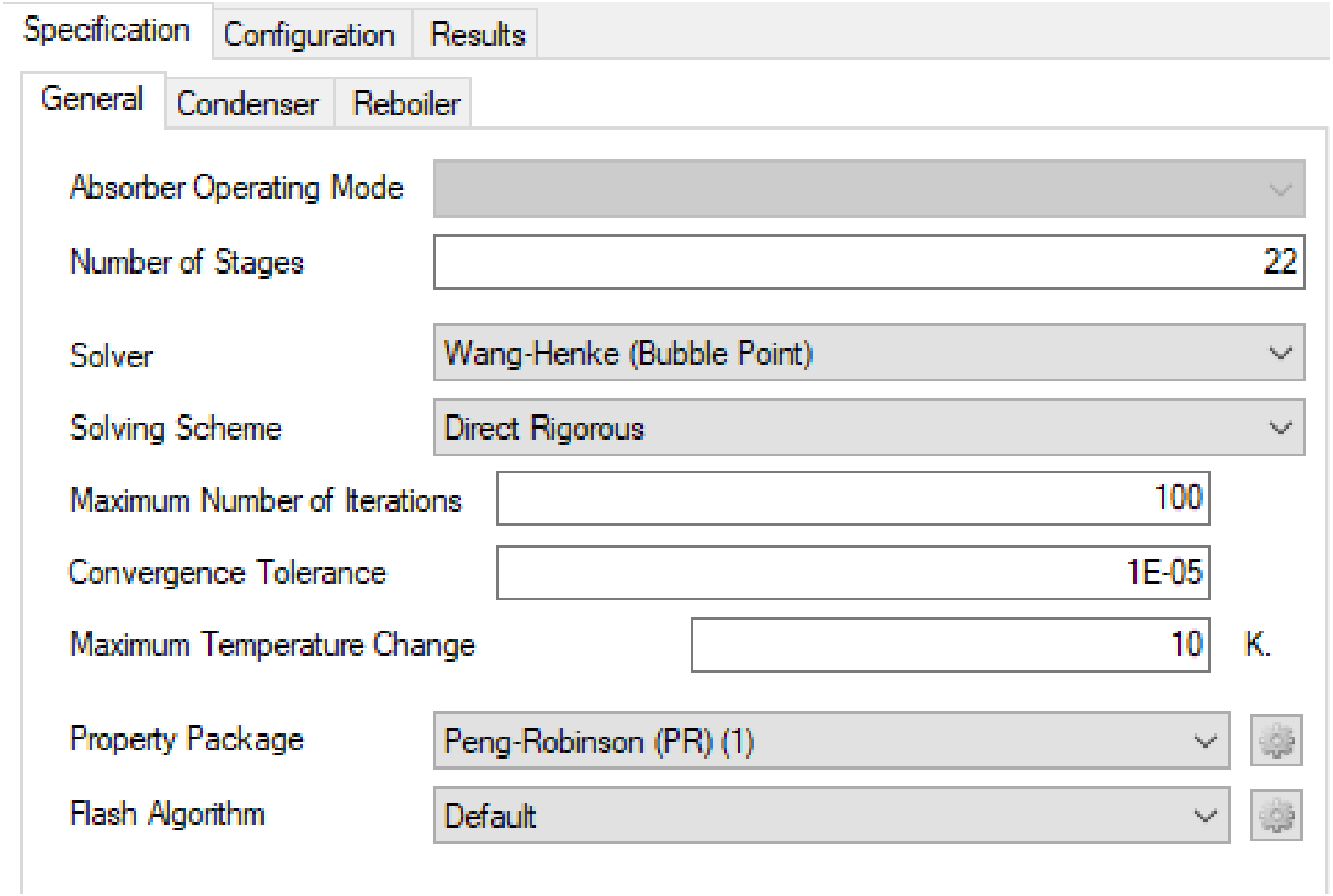
Destilação

Simulando a coluna de destilação (etapa de projeto/operação): A coluna shortcut nos fornece uma primeira aproximação não muito precisa do comportamento de uma coluna real, para simular o comportamento da coluna de forma mais precisa deve-se utilizar uma abordagem matemática mais rigorosa. A seguir serão apresentadas, a título de exemplo, a simulação da coluna de destilação com 22 estágios, fixando-se a razão de refluxo em 4,2 e a vazão do produto de fundo em 98,4 mol/s de resíduo. Para realizar a simulação pode-se substituir a coluna shortcut por uma coluna de destilação. Obs. Não é obrigatório realizar a simulação inicial na coluna shortcut, em especial se a configuração de uma coluna real já for conhecida.



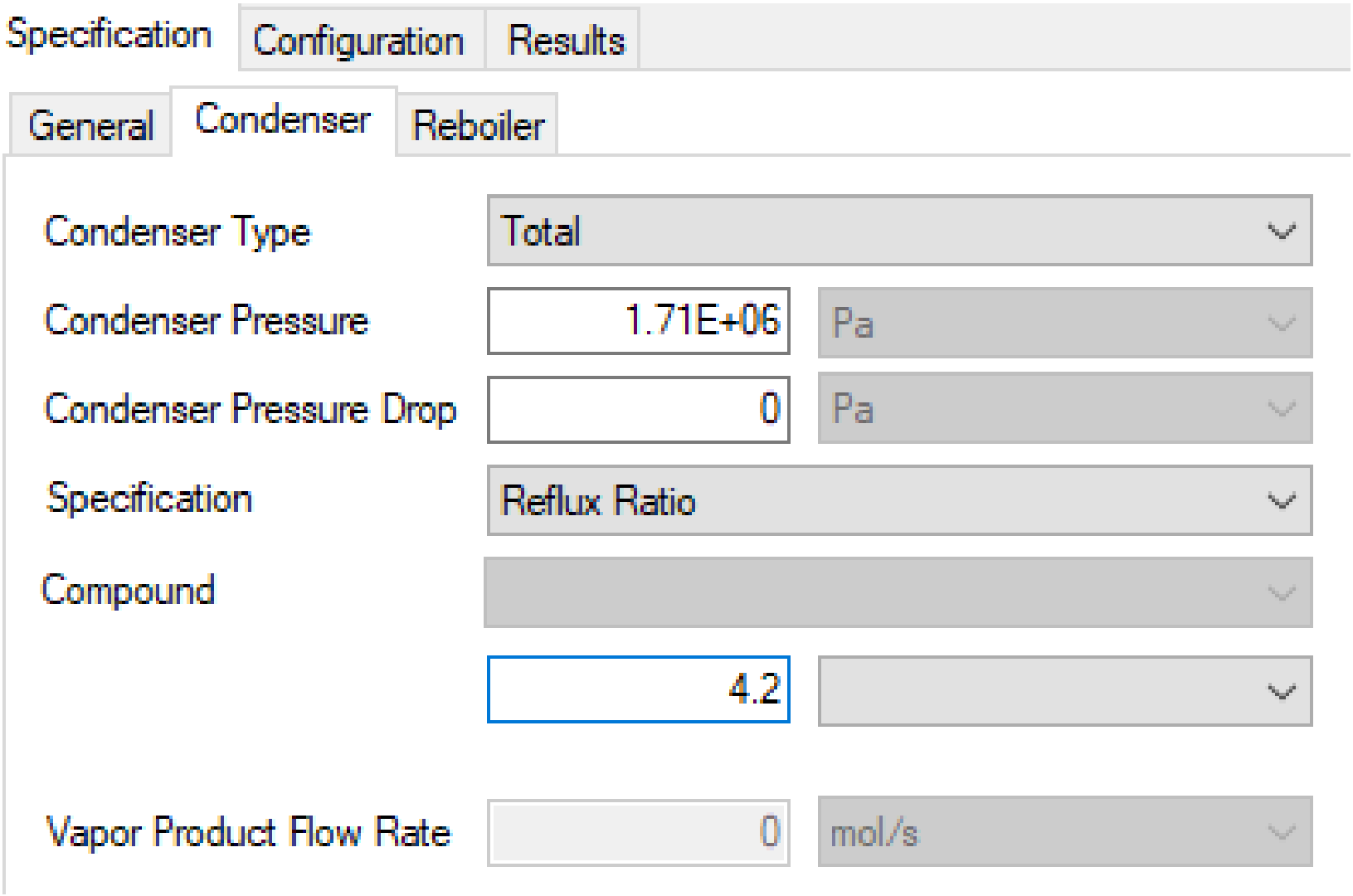
Destilação

Coluna de destilação – especificações gerais



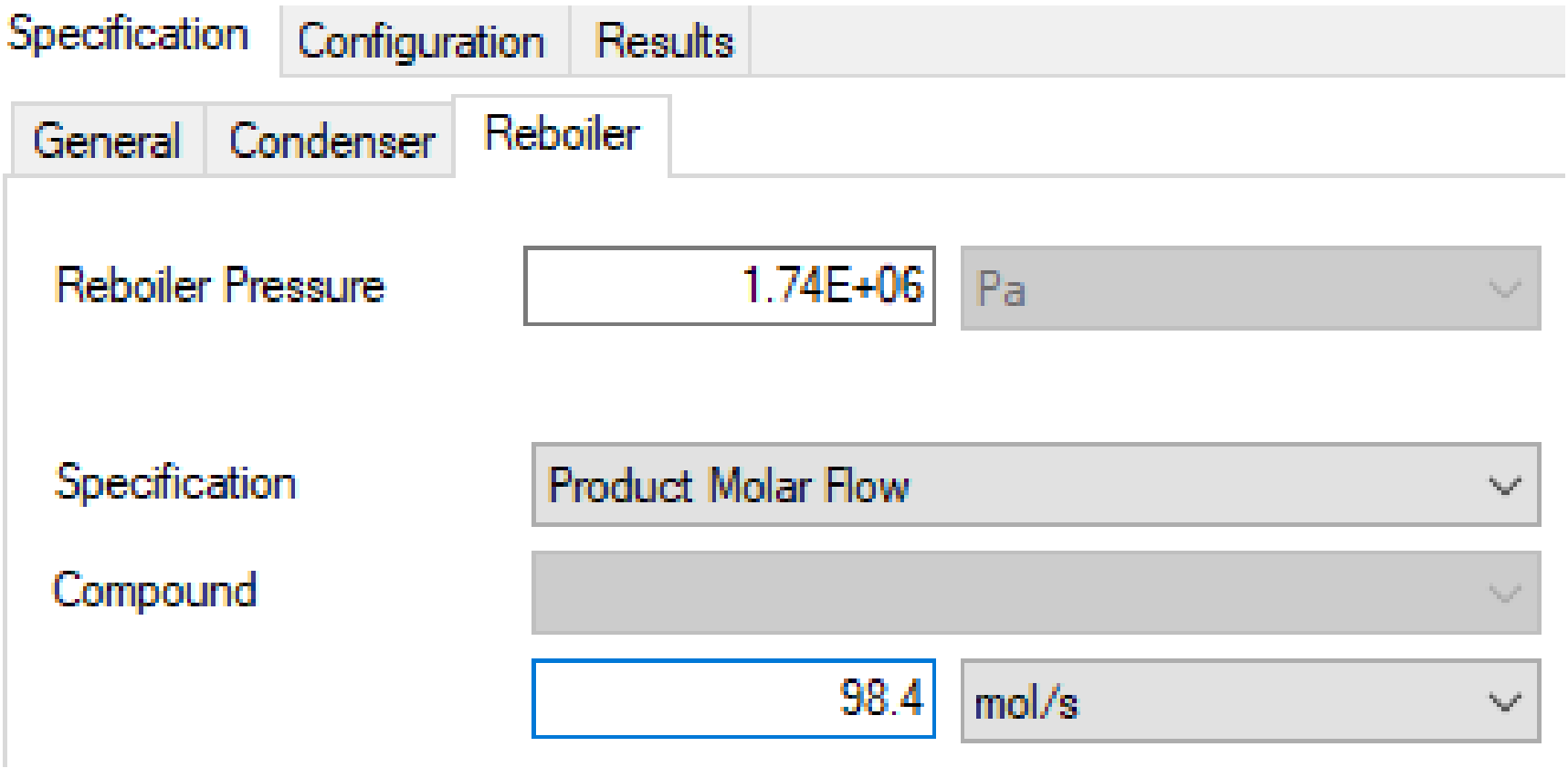
Destilação

Coluna de destilação – especificações do condensador



Destilação

Coluna de destilação – especificações do refervedor



Destilação

Coluna de destilação – conectando a corrente de alimentação F (8° estágio).

Specification | Configuration | Results

Connections | Stages | Initial Estimates | BP Solver

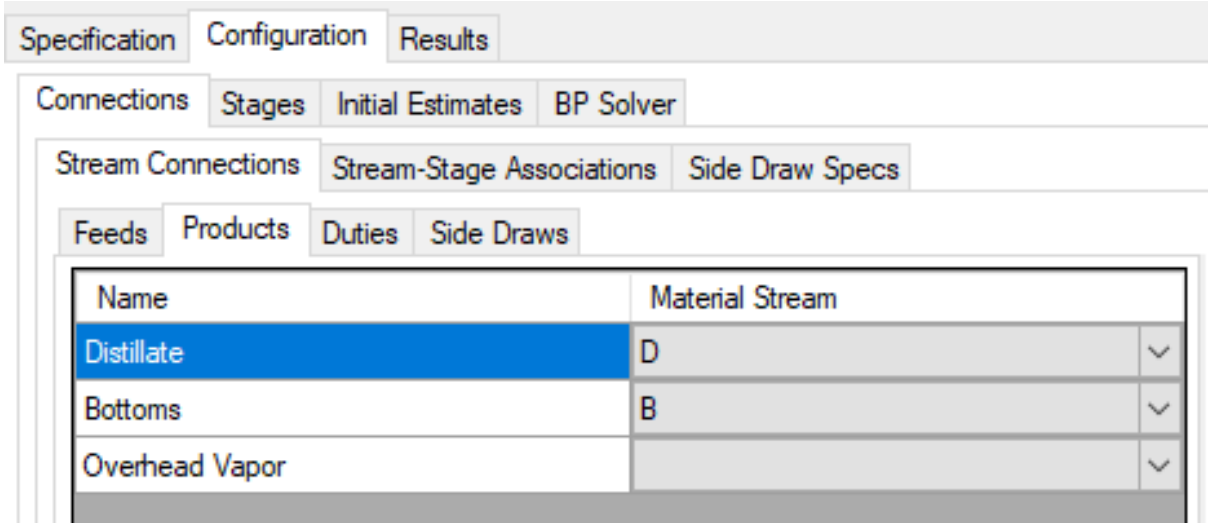
Stream Connections | Stream-Stage Associations | Side Draw Specs

Feeds | Products | Duties | Side Draws

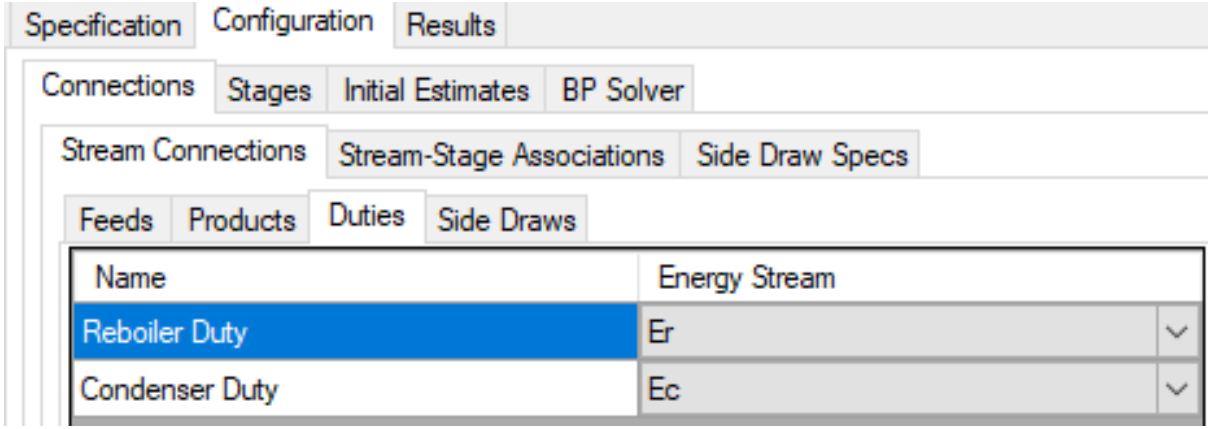
Name	Material Stream
Column Feed Port #1	
Column Feed Port #2	
Column Feed Port #3	
Column Feed Port #4	
Column Feed Port #5	
Column Feed Port #6	
Column Feed Port #7	
Column Feed Port #8	F
Column Feed Port #9	
Column Feed Port #10	

Destilação

Coluna de destilação – conectando as correntes de produto.



Coluna de destilação – conectando as correntes de energia..



Destilação

Coluna de destilação – associando as correntes

Specification | Configuration | Results

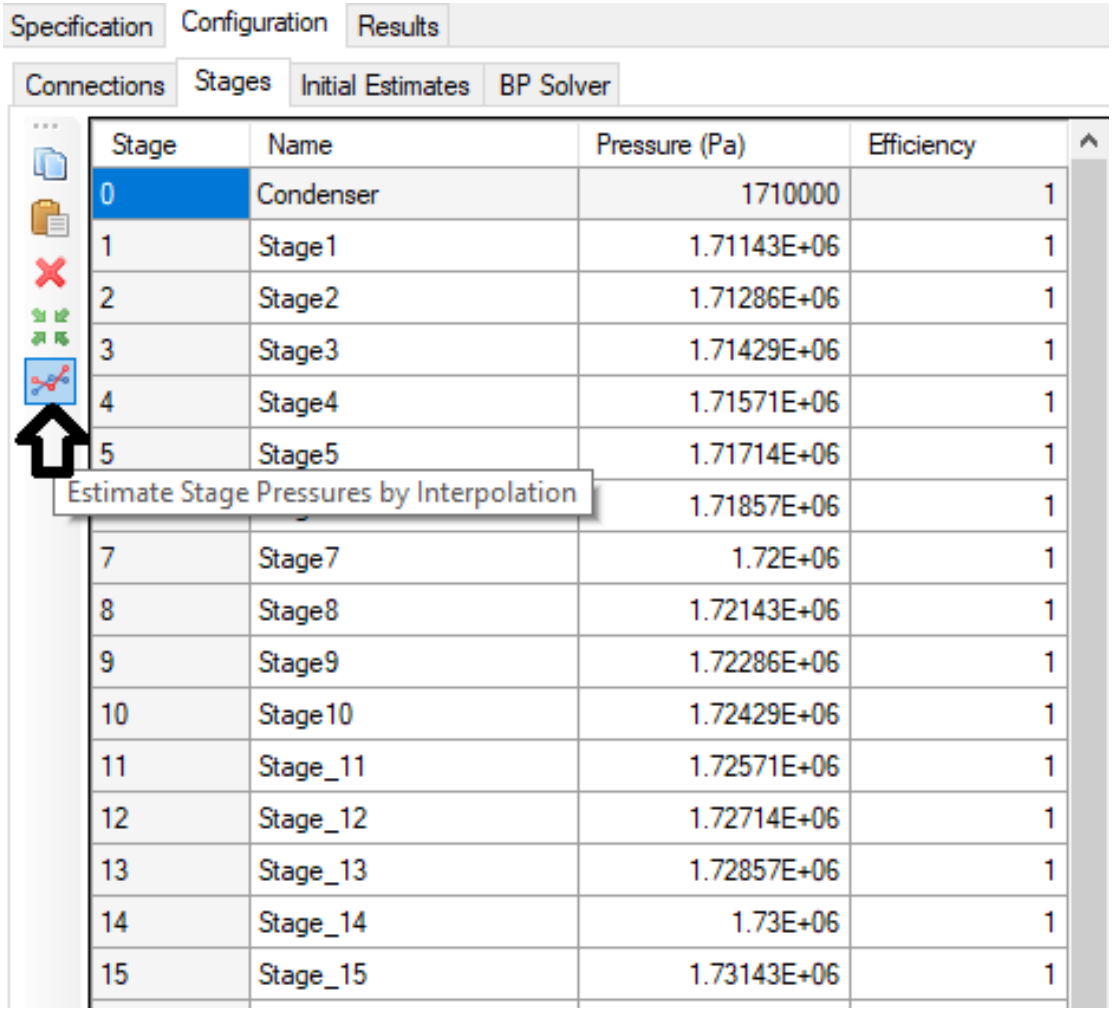
Connections | Stages | Initial Estimates | BP Solver

Stream Connections | Stream-Stage Associations | Side Draw Specs

Port Type	Stream Name	Stage Location
Feed	F	Stage8
Distillate	D	Condenser
Bottoms Product	B	Reboiler
Reboiler Duty	Er	Condenser
Condenser Duty	Ec	Reboiler

Destilação

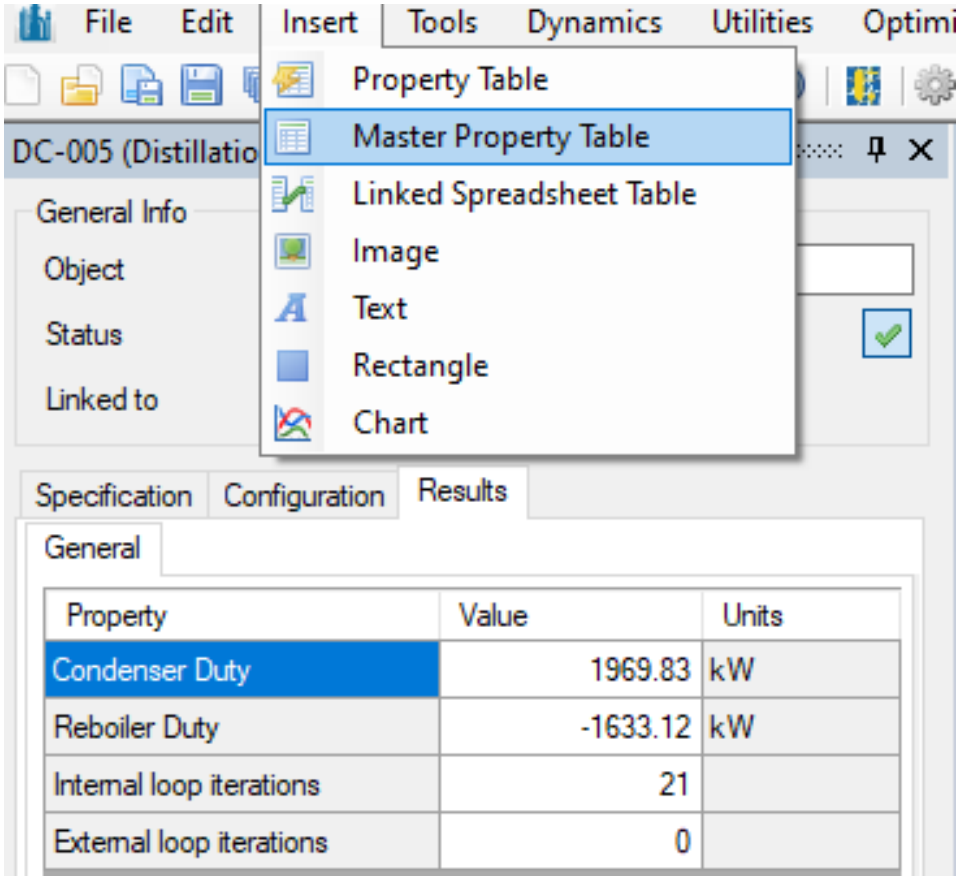
Coluna de destilação – estimando a pressão nos estágios por interpolação e executando a simulação (F5).



Stage	Name	Pressure (Pa)	Efficiency
0	Condenser	1710000	1
1	Stage1	1.71143E+06	1
2	Stage2	1.71286E+06	1
3	Stage3	1.71429E+06	1
4	Stage4	1.71571E+06	1
5	Stage5	1.71714E+06	1
[illegible]	[illegible]	1.71857E+06	1
7	Stage7	1.72E+06	1
8	Stage8	1.72143E+06	1
9	Stage9	1.72286E+06	1
10	Stage10	1.72429E+06	1
11	Stage_11	1.72571E+06	1
12	Stage_12	1.72714E+06	1
13	Stage_13	1.72857E+06	1
14	Stage_14	1.73E+06	1
15	Stage_15	1.73143E+06	1

Destilação

Coluna de destilação – visualizando os resultados (inserindo uma master propertie table), com um duplo clique do mouse sobre a tabela que abrir no flowsheet, selecione as propriedades que quiser.



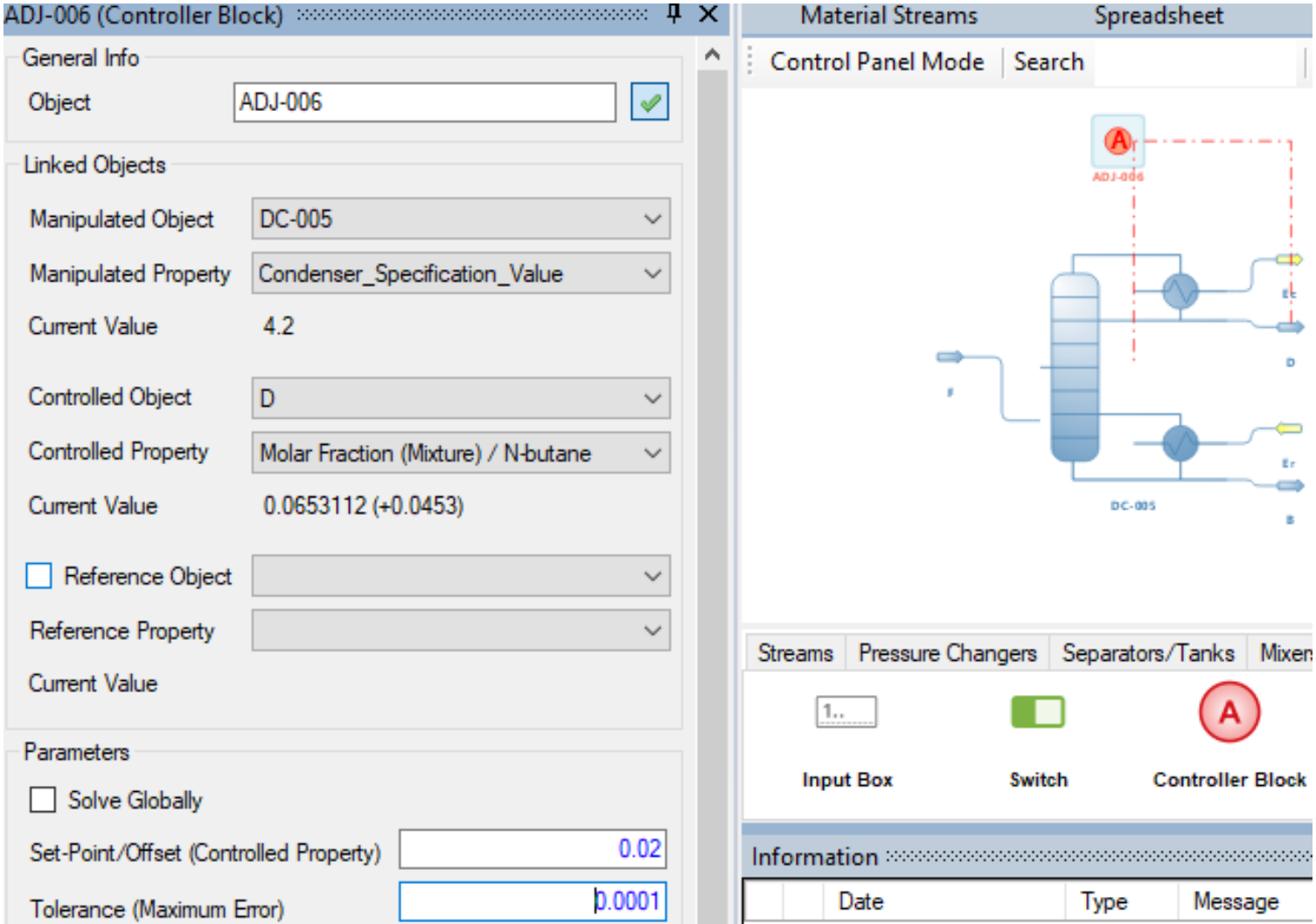
Destilação

Coluna de destilação – observe que na tabela as especificações de frações molares de 0.02 de butano em D e 0.02 de propano em B não são respeitadas.

Correntes de Matéria			
Object	F	D	B
Temperature	380	312.511	398.661
Pressure	1.72E+06	1.71E+06	1.74E+06
Molar Flow	126	27.5995	98.4
Molar Fraction (Mixture) / Ethane	0.0301587	0.137676	3.21879E-06
Molar Fraction (Mixture) / Propane	0.2	0.796597	0.0326774
Molar Fraction (Mixture) / N-butane	0.369841	0.0653112	0.455251
Molar Fraction (Mixture) / N-pentane	0.35	0.000415124	0.448045
Molar Fraction (Mixture) / N-hexane	0.05	5.24611E-08	0.0640231

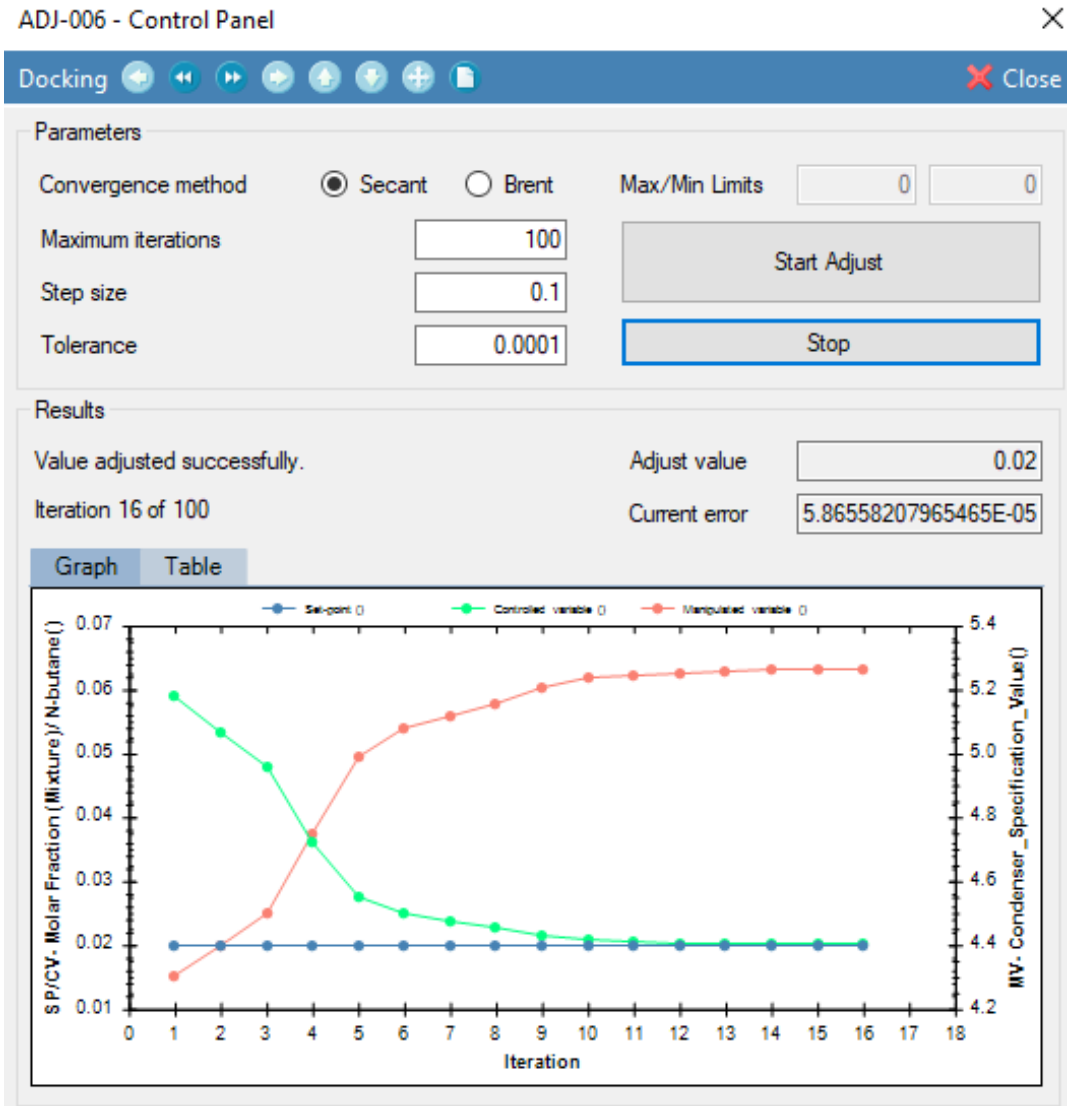
Destilação

Coluna de destilação – para atingir a especificação, pode-se aumentar a razão de reciclo. Pode-se fazer isso utilizando uma operação lógica de ajuste.

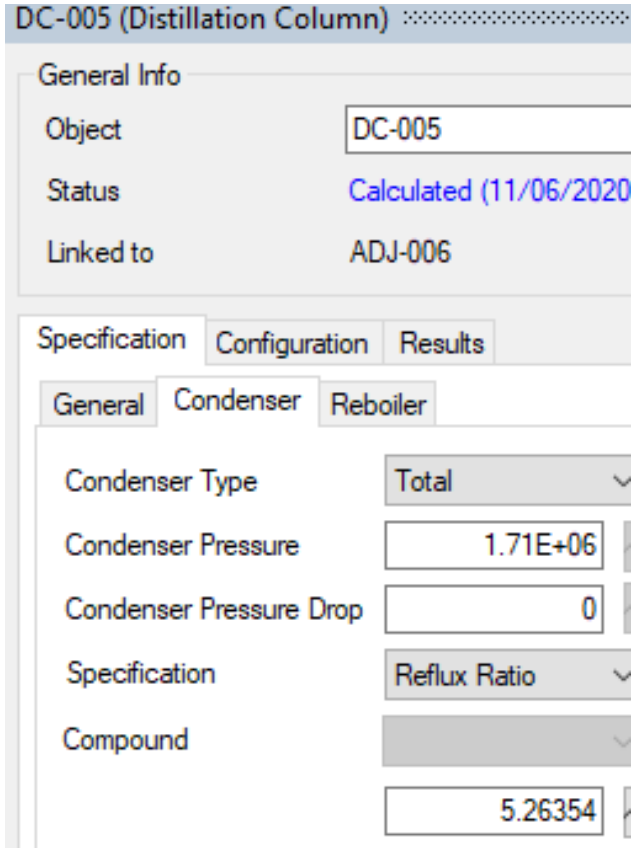


Destilação

Coluna de destilação – ajustando no painel de controle:

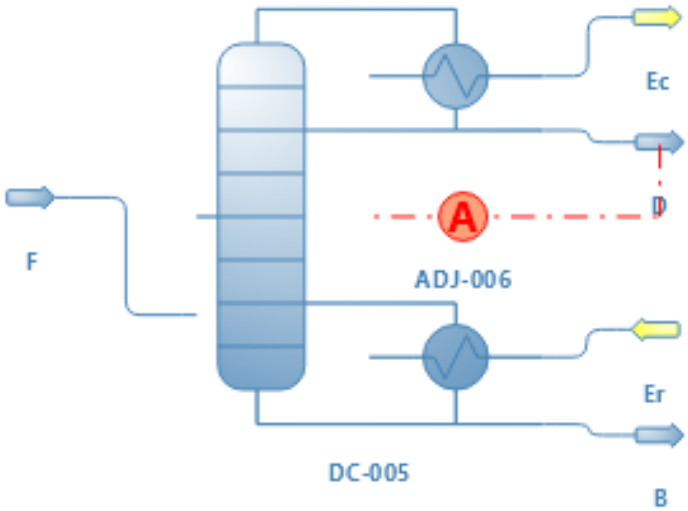


Razão de refluxo estimada:



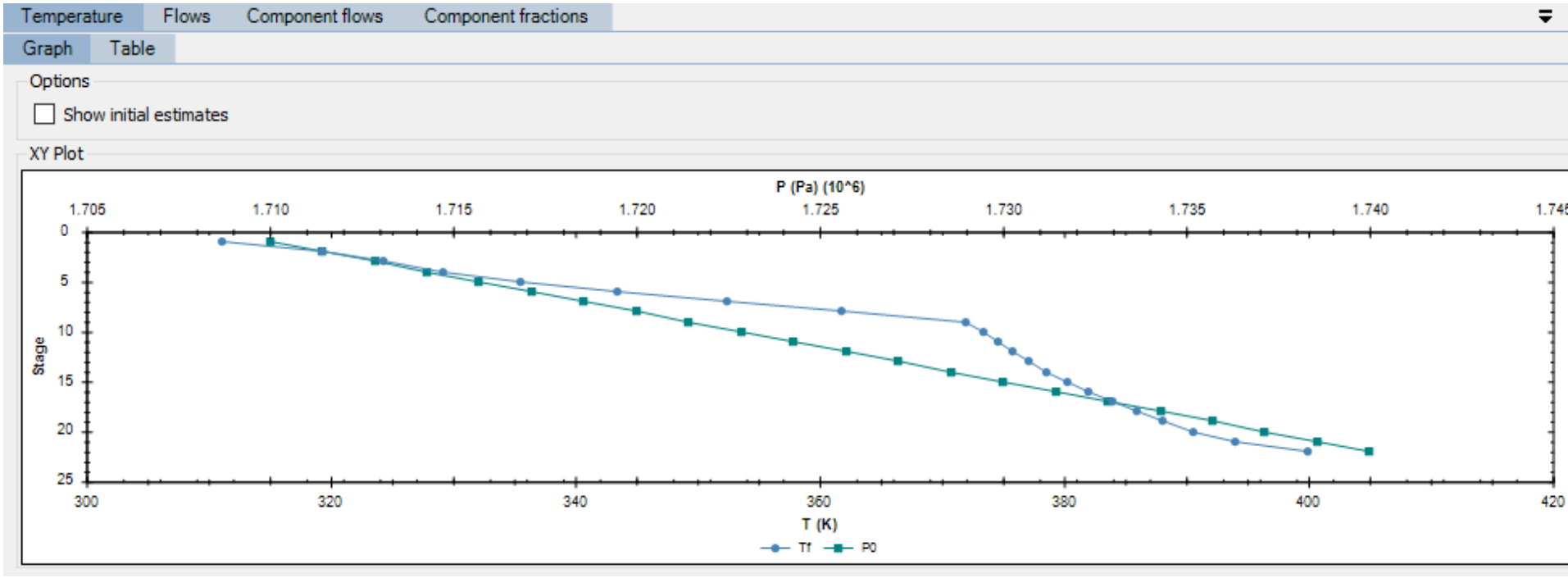
Destilação

Coluna de destilação – visualizando os resultados na tabela observa-se que a especificação foi satisfeita para a razão de refluxo de 5.26.



Correntes de Matéria				
Object	F	D	B	
Temperature	380	311.029	399.889	K
Pressure	1.72E+06	1.71E+06	1.74E+06	Pa
Molar Flow	126	27.5995	98.4	mol/s
Molar Fraction (Mixture) / Ethane	0.0301587	0.137665	8.31526E-07	
Molar Fraction (Mixture) / Propane	0.2	0.842204	0.0198523	
Molar Fraction (Mixture) / N-butane	0.369841	0.020037	0.467967	
Molar Fraction (Mixture) / N-pentane	0.35	9.46156E-05	0.448154	
Molar Fraction (Mixture) / N-hexane	0.05	8.24951E-09	0.0640258	

Correntes de Energia			
Object	Er	Ec	
Energy Flow	1988	2300.76	kW

Destilação

Edite os perfis da coluna para verificar as variações de Temperatura, pressão, fluxos e composições em cada estágio.