



XXXVII IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS
ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING
BRASÍLIA - DF - BRAZIL

O USO DA PLATAFORMA ASPEN DYNAMICS COMO FERRAMENTA COMPUTACIONAL NO PROCESSO DE PARTIDA DE COLUNAS EXTRATIVAS

Ícaro Cazé Nunes

icarocnunes@gmail.com

Ascendino Pereira de Araújo Neto

ntpeereira@gmail.com

Marcella Feitosa de Figueirêdo

marcellafeitosa@yahoo.com.br

Romildo Pereira Brito

brito.romildo@outlook.com

Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Química

Avenida Aprígio Veloso, 882, Bodocongó, 58109-970, Campina Grande, Paraíba, Brasil

Abstract. A partida para uma coluna de destilação pode ser compreendida pelo período que se inicia no momento em que a matéria-prima é introduzida no equipamento, até a completa estabilização do processo. O estudo da etapa de partida para os processos de separação vem, ao longo do tempo, se tornando cada vez mais importante, uma vez que essa operação representa um dos processos mais complexos observados na prática industrial. Por esta razão, a coluna extrativa utilizada no processo de desidratação do etanol utilizando etilenoglicol como solvente foi utilizada como estudo de caso. O presente trabalho teve como objetivo simular a etapa de partida para o sistema sob investigação, como também o de avaliar seu comportamento dinâmico, evidenciando a importância dessa ferramenta computacional no ensino de engenharia. As simulações foram desenvolvidas com o auxílio dos softwares computacionais *Aspen Plus* e *Aspen Plus Dynamics*. De forma geral, pode-se concluir que o respectivo trabalho evidenciou a importância da simulação computacional como ferramenta auxiliar na assimilação e na aprendizagem dos conceitos de engenharia.

Keywords: *Simulação, Partida, Coluna extrativa*

1 INTRODUÇÃO

De forma generalizada, a etapa de partida para uma coluna de destilação consiste em uma combinação de ações baseadas nas operações de abertura e fechamento de válvulas, de forma a conduzir as variáveis envolvidas no processo até seus respectivos valores nominais de operação (Ruiz et al., 1988).

De acordo com a literatura técnica especializada, devido à sua natureza de transição fortemente não linear, as modificações simultâneas observadas em diversas variáveis relevantes ao processo, ao elevado grau de acoplamento entre as variáveis e a sua vasta faixa de condições de funcionamento, a etapa de partida representa uma das operações mais difíceis e complexas na prática industrial além de ser considerado um desafio do ponto de vista de controle (Fieg et al., 1993; Barolo et al., 1994; Kruse et al., 1996; Han e Park, 1999; Wozny e Li, 2004; Woinaroschy e Isopescu, 2010).

Durante a etapa de partida, considera-se a coluna de destilação improdutiva, uma vez que a unidade trabalha muito longe das suas condições nominais de operação e produção, resultando em grande quantidade de produtos fora de especificação e elevado gasto energético, principalmente para colunas de destilação de alta pureza (Lowe et al., 2000).

Fatores como as limitações físicas do equipamento, as propriedades dos componentes na mistura, assim como as características de operação e produção têm impacto direto no tempo necessário para se alcançar o estado estacionário (Wozny e Li, 2004).

O estudo direcionado a partida dos processos químicos e dos equipamentos tem como principal finalidade a determinação do momento ideal de abertura e fechamento para as inúmeras válvulas envolvidas no processo, minimizando, desta forma, o tempo necessário para se alcançar o estado estacionário sem alterar as especificações dos produtos (Fieg et al., 1993).

Consequentemente, o desenvolvimento de estratégias de partida proporciona maior rapidez no alcance do estado estacionário, reduz gastos relacionados à matéria-prima, a formação de produtos fora de especificação e o consumo de utilidades, melhorando significativamente a eficiência do processo (Werle et al, 2007).

De acordo com Ruiz et al. (1988), a compreensão do comportamento dinâmico é indispensável no desenvolvimento de políticas de partida apropriadas. Além disso, o estudo do comportamento dinâmico desempenha função de valiosa ferramenta no planejamento e na tomada de decisão de qual sequência de ações adotar.

Embora vários estudos tenham reportado os mais diversos problemas relacionados com o comportamento dinâmico das colunas de destilação durante a partida, poucos trabalhos têm abordado o estudo das estratégias de partida direcionado a misturas azeotrópicas. Mais especificamente, de acordo com Weng e Lee (2014), antes deles, nenhum trabalho havia relatado estudos de partida direcionados a destilação extrativa.

A solução etanol-água é um exemplo de mistura azeotrópica de grande interesse na prática industrial devido à vasta gama de aplicações do etanol, que varia desde seu emprego como matéria prima na síntese de produtos químicos até sua utilidade como fonte de energia renovável (Gil et al., 2012).

Por esse motivo, a coluna extrativa utilizada no processo de desidratação do etanol anidro utilizando etilenoglicol como solvente foi escolhido como estudo de caso. O objetivo desse trabalho é realizar a partida do equipamento, evidenciando os benefícios do uso da simulação computacionais, como ferramenta auxiliar, na formação do engenheiro químico.

2 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O fluxograma elaborado para representar o modelo de destilação multicomponente utilizado no processo de desidratação do etanol anidro é apresentado na Fig. 1. Esse fluxograma foi desenvolvido através dos simuladores Aspen Plus e Aspen Plus Dynamics. Ambos aplicativos fazem parte do plataforma computacional Aspen Engineering Suit.

As condições operacionais utilizadas na separação da mistura azeotrópica etanol-água utilizando etilenoglicol como solvente foram baseadas no trabalho de Figueirêdo et al. (2015), como observado nas Tabelas 1 e 2.

Para o desenvolvimento da malha de controle, o modelo desenvolvido foi exportado para a plataforma *Aspen Plus Dynamics* como uma simulação do tipo *pressure-driven*. A Fig. 1 detalha esse esquema de controle. Após a implementação dos controladores, realizou-se o esvaziamento do sistema.

O procedimento de esvaziamento consiste em preencher os equipamentos com um determinado gás inerte a temperatura de 293 K e pressão de 10^5 Pa. Neste trabalho utilizou-se o nitrogênio como gás inerte. Essa condição é denominada estado vazio e frio e é concebida a partir de um script pré-construído pelo próprio *software*.

Tabela 1 – Condições de alimentação para a coluna extrativa

Corrente	Parâmetro	Especificação
Azeótropo (AZE0-1)	Temperatura, K	313.15
	Composição molar do etanol, -	0,85
	Vazão molar, kmol/h	100.0
Solvente (ENT-1)	Temperatura, K	353.15
	Composição molar do etilenoglicol, -	1
	Vazão molar, kmol/h	4655,13

Tabela 2 – Especificações de projeto para a coluna extrativa

Parâmetro	Especificação
Número de estágios, -	24
Razão de Refluxo, -	0.59
Estágio de alimentação (Azeótropo), -	18
Estágio de alimentação (Solvente), -	5
Pressão no topo da coluna, Pa	10^5

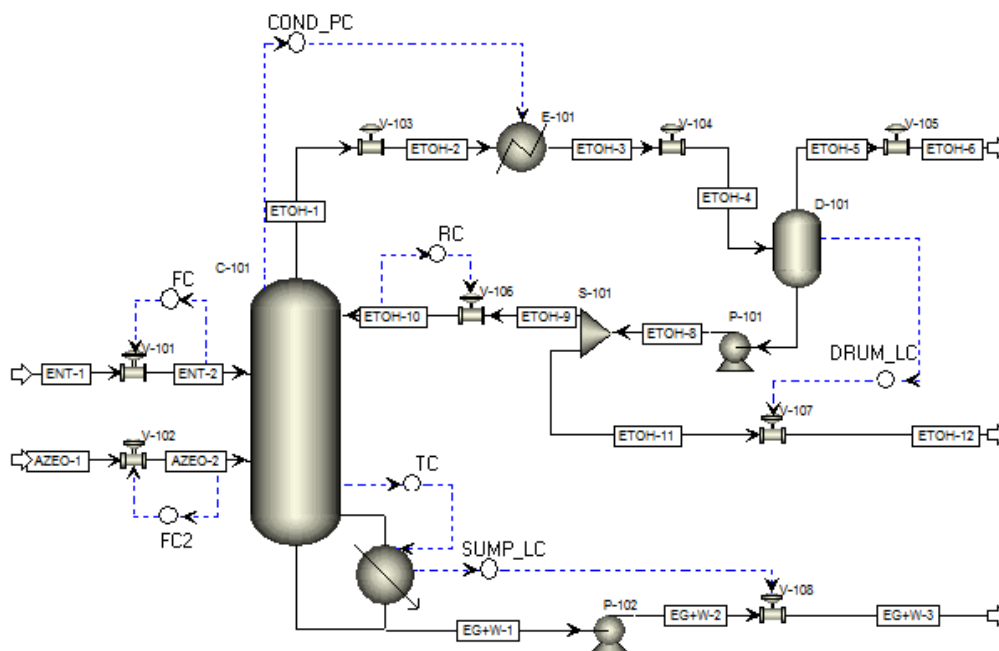


Figura 1. Fluxograma da coluna extrativa e sua configuração de controle

O procedimento de esvaziamento realizado para a coluna em estudo apresentou dados satisfatórios para a representação do modelo de uma coluna fria e vazia, pois foi possível a remoção de todos os componentes que faziam parte do processo com exceção do nitrogênio.

3 ESTRATÉGIA DE PARTIDA

Nessa etapa do trabalho foram desenvolvidas metodologias para formulação de um procedimento de partida, que atendesse aos interesses do mesmo. Para a formulação da rotina foi criado um Task no Aspen Dynamics. O Task pode ser definido como um conjunto de instruções definindo uma sequência de ações durante a simulação dinâmica. Esse conjunto de instruções foi construído através da linguagem Aspen Custom Modeler.

Neste trabalho, o procedimento responsável por conduzir a unidade em estudo ao estado estacionário baseou-se na sequência de ações adotada para a estratégia de partida com refluxo total, descrita por Ruiz et al., (1988).

Como o próprio nome sugere, essa estratégia consiste em iniciar uma coluna de destilação retornando todo o líquido condensado na forma de refluxo. O passo-a-passo para o procedimento de partida desenvolvido neste trabalho é descrito a seguir:

No tempo $t = 0$; a coluna extrativa encontra-se completamente vazia, isto é, preenchida com gás nitrogênio a temperatura de 293.15 K e pressão de $10^5 Pa$.

No tempo $t = t_1$; inicia-se a alimentação do fluido de refrigeração no condensador.

No tempo $t = t_2$; inicia-se a alimentação da coluna extrativa. Tanto a mistura etanol-água quanto o solvente, etilenoglicol, são introduzidos simultaneamente. Essa etapa é concluída ao atingir um nível mínimo de operação pré-determinado na base da coluna. As correntes de alimentação foram controladas a fim de garantir que a taxa de fluxo se mantivesse constante durante toda a operação.

No tempo $t = t_3$; inicia-se o aquecimento da coluna através da introdução de vapor à pressão constante no refeedor, localizado na base da coluna. A medida que a coluna é aquecida, o líquido no fundo da coluna começa a evaporar. Esse vapor, por sua vez, ascende ao longo de toda a coluna até alcançar o condensador que em seguida é coletado pelo vaso de refluxo. Salienta-se que nesse momento inicial não há retirada de destilado no topo da coluna, isto é, todo o produto é retornado para a coluna.

No tempo $t = t_4$; inicia-se o controle da pressão com a finalidade de evitar mudanças na pressão interna do sistema, pois a medida que a temperatura da coluna aumenta, sua pressão interna também começa a aumentar. A pressão do condensador é controlada através da manipulação do fluxo de fluido refrigerante que o alimenta.

No tempo $t = t_5$; abre-se a válvula de purga, localizada no topo do vaso de refluxo, iniciando assim, o processo de remoção de todo o nitrogênio. Após a completa eliminação do nitrogênio essa válvula é fechada, sendo mantida nessa posição durante todo o resto da operação.

No tempo $t = t_6$; o refluxo é fixado em seu valor nominal de operação, enquanto que o controle de nível para o vaso de refluxo é alterado para o modo automático. A modificação do modo de operação desse controlador ocorre após a especificação de produção no topo da coluna ser alcançada. O nível do vaso de refluxo é controlado através do fluxo de destilado no topo que deixa a coluna.

No tempo $t = t_7$; inicia-se o controle de nível para o fundo da coluna alterando o controlador para o modo automático, dando início a retirada de produto na base da coluna. Deve-se então operar a coluna sem modificar as condições de operação até que o sistema atinja a condição de equilíbrio.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

De acordo com Yasouka *et al.* (1987), em geral, o período de partida estará concluído quando as composições dos produtos satisfizerem a condição descrita pela Eq. (1). Essa função representa a soma das diferenças entre a composição atual e a composição em regime estacionário para os componentes nas correntes de produto.

Em conformidade com esta equação, considera-se alcançado o regime estacionário quando a respectiva função apresenta valor igual ou menor que 0.001.

$$MX = |X_{p,i} - X_{p,i}^{st}| \leq 0,001. \quad (1)$$

Onde, $X_{p,i}$ é a fração mássica do componente i na corrente de produto e $X_{p,i}^{st}$ é a fração mássica do componente i na corrente de produto em regime estacionário.

A Fig. 2 representa o momento em que a composição dos principais produtos alcança seus respectivos valores nominais, estabelecendo, por sua vez, o regime estacionário. Observa-se que o etanol, no topo da coluna, alcança a condição imposta pela Eq. (1) no tempo $t = 0,7 h$, enquanto que o etilenoglicol, localizado na base da coluna extrativa, alcança essa mesma condição no tempo $t = 1,61 h$.

A determinação do tempo de partida total para o respectivo procedimento foi estipulada a partir do tempo de partida para o produto de base, uma vez que demanda maior lapso temporal para alcançar a condição em regime estacionário. Portanto, o tempo de partida para a primeira coluna é de $1,61 h$.

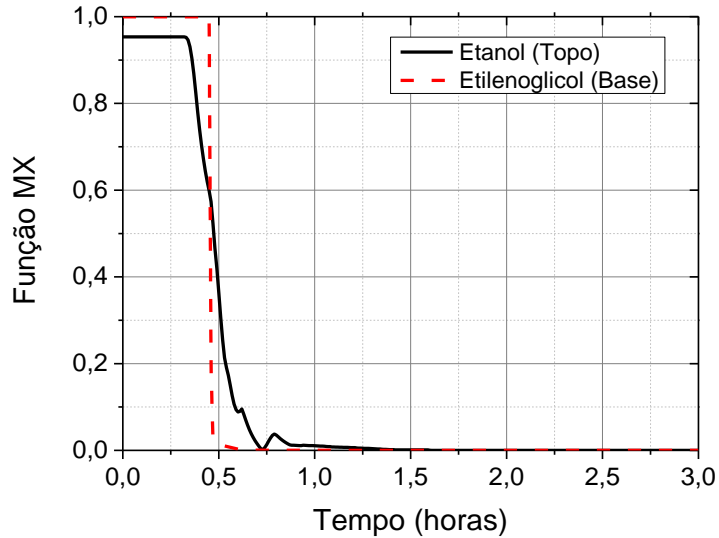


Figura 2. Determinação do tempo de partida para o procedimento desenvolvido

A Fig. 3 demonstra o comportamento dinâmico para as vazões de alimentação ao longo da etapa de partida. Como descrito pelo procedimento de partida, as vazões de alimentação são iniciadas simultaneamente e ajustadas gradativamente ao longo da operação até atingirem seu valor desejado. Verifica-se ainda uma queda abrupta na vazão de alimentação, próximo a 0.5 h, que logo em seguida é corrigida.

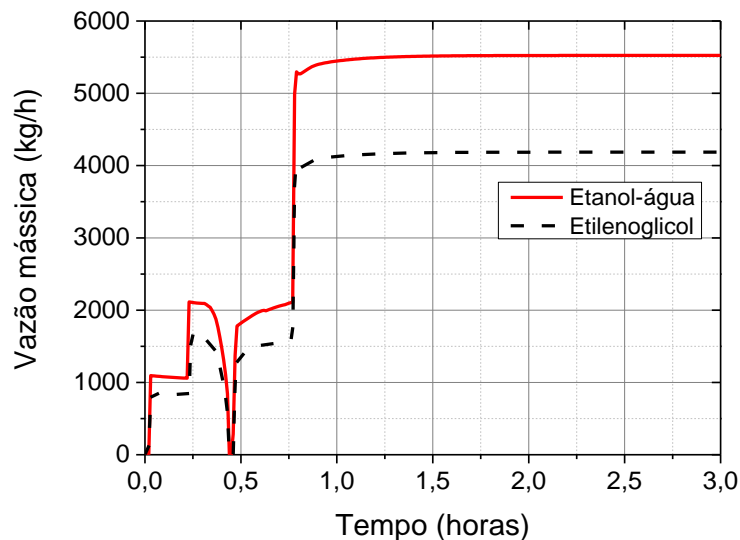


Figura 3. Comportamento dinâmico para a carga de alimentação durante a partida

Tal acontecimento fundamenta-se nos conhecimentos básicos da engenharia de processo podendo ser compreendido pelo aumento da pressão interna do sistema que, por sua vez, torna-se maior que a pressão das correntes de alimentação, interferindo diretamente na alimentação do sistema, como pode ser observado na Fig. 4.

A Fig. 4 ilustra o comportamento dinâmico para a pressão de alguns estágios durante a operação de partida.

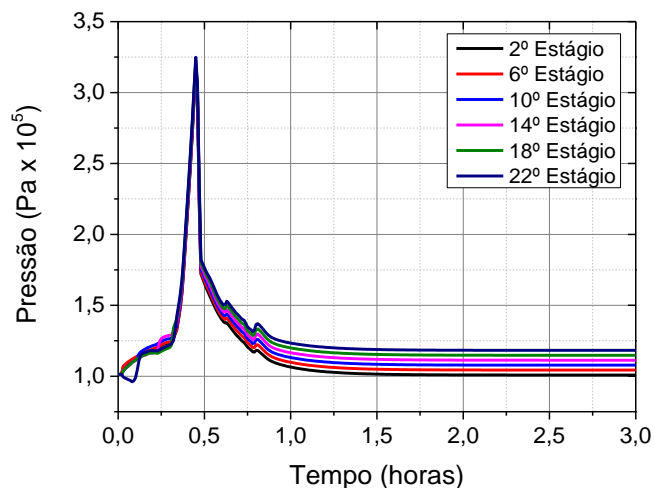


Figura 4. Comportamento dinâmico para a pressão do sistema durante a partida

O comportamento dinâmico para temperatura de alguns estágios da coluna extrativa é representado pela Fig. 5. Observa-se que no início da operação de partida a temperatura do estágio localizado abaixo do prato de alimentação da mistura azeotrópica, estágio 22, sofre uma brusca queda de temperatura seguido de um aumento gradativo.

De acordo com Kister (1990), quando a carga de alimentação é introduzida na coluna vazia e fria ocorre uma queda de temperatura nos estágios da coluna até que o líquido em ebulição atinja as condições de equilíbrio com o vapor em condensação.

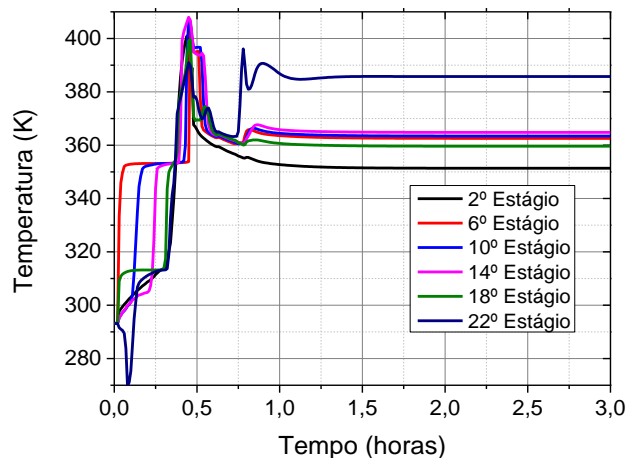


Figura 5. Comportamento dinâmico para temperatura do sistema durante a partida

Através das Fig. 4 e 5 verifica-se a relação termodinâmica entre a pressão e a temperatura do sistema em estudo. A medida que a pressão do sistema aumenta, observa-se também um aumento na temperatura para os respectivos estágios.

O momento em que se inicia a purga do sistema é fundamental para realização dessa etapa com sucesso. A Fig. 6 representa o posicionamento da válvula de purga durante a etapa de partida. Através da Fig. 6 pode-se visualizar o período em que essa válvula fica aberta. Observa-se também que essa operação está diretamente relacionada ao aumento abrupto das pressões e temperaturas do sistema.

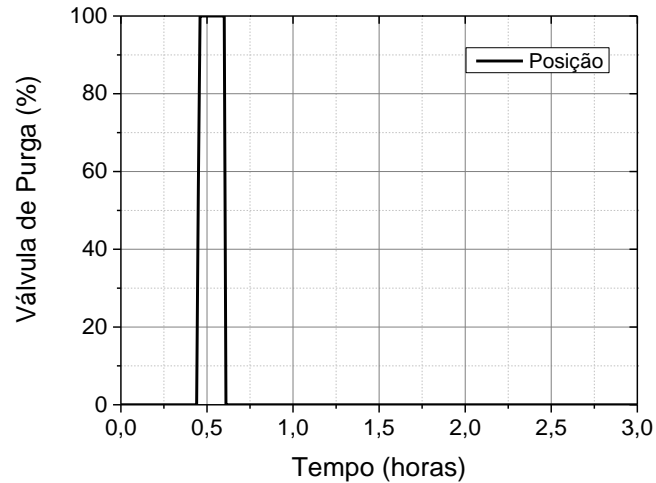


Figura 6. Posicionamento da válvula de purga durante a partida

A Fig. 7 apresenta o comportamento dinâmico da vazão de líquido nos orifícios de alguns estágios durante a operação de partida. A partir do momento em que as cargas de mistura azeotrópica e de solvente são introduzidas na coluna, inicia-se o preenchimento dos respectivos pratos de alimentação com as suas respectivas misturas em estado líquido. Em seguida, inicia-se o processo de preenchimento dos outros estágios através do gotejamento desse líquido por meio de seus orifícios, como ilustrado na Fig. 7.

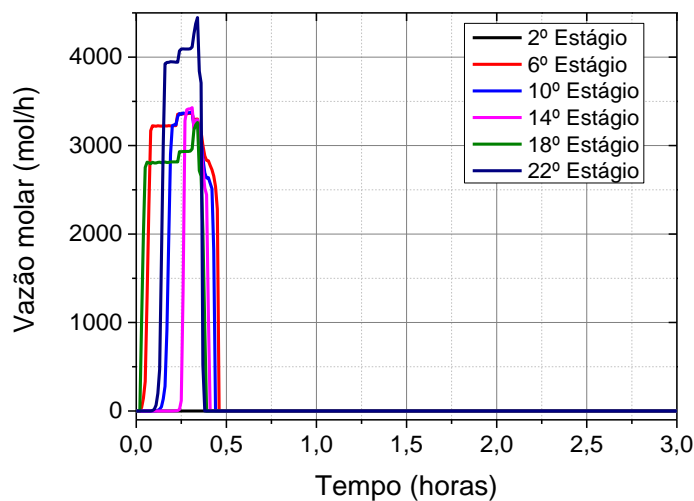


Figura 7. Comportamento dinâmico para a vazão de líquido por meio dos orifícios de alguns estágios

Fundamentado na Fig. 7, visualiza-se que a medida que a coluna começa a ser aquecida, dá-se início a formação de vapor no fundo da coluna, estabelecendo dessa forma o estado de transição. Em um determinado momento, a pressão de vapor torna-se suficientemente alta a ponto de evitar o escoamento do líquido através dos orifícios do prato.

Neste momento, diz que o estado de equilíbrio entre as fases foi alcançado e a temperatura da mistura encontra-se no ponto de bolha. Como observado na Fig. 7, o 2º estágio e conseqüentemente os outros que se localizam acima do estágio de alimentação do solvente não apresentam fluxo de líquido através dos orifícios dos pratos, uma vez que eles só recebem o líquido proveniente do refluxo.

A Fig. 8 representa o comportamento dinâmico da composição para o produto de topo durante a operação de partida. Ao analisar a Fig. 8 verifica-se inicialmente um aumento na concentração de solvente no topo da coluna.

Esse aumento é provocado devido ao aumento abrupto da pressão do sistema havendo arraste do solvente enquanto o nitrogênio é removido. Após o fechamento da válvula de purga e normalização do sistema, como apresentado nas Figs. 4, 5 e 6, a fração de solvente decaiu dando início assim a separação do azeótropo etanol-água, aumentando a composição do etanol no topo e diminuindo a composição da água e do etilenoglicol.

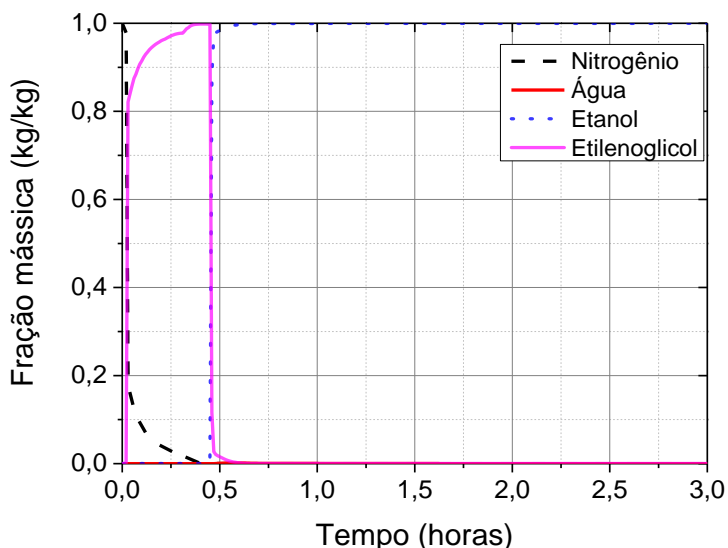


Figura 8. Comportamento dinâmico para a fração mássica dos componentes no topo da coluna

A Fig. 9 representa o comportamento dinâmico da composição do produto de base da coluna de destilação durante a operação de partida.

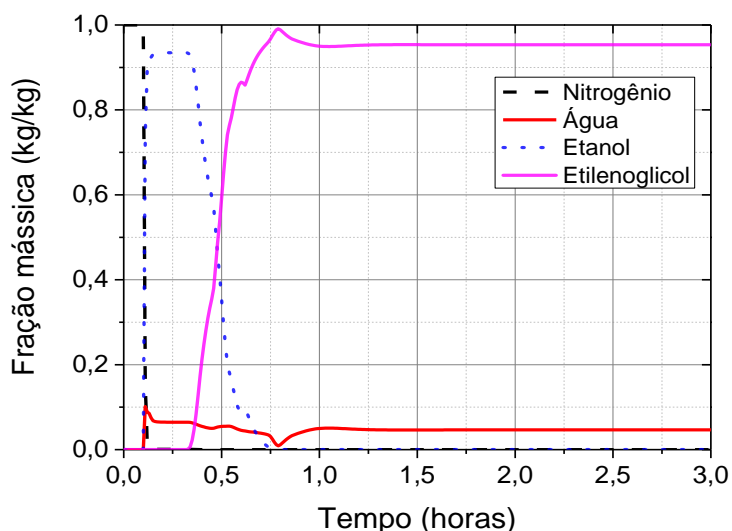


Figura 9. Comportamento dinâmico para a fração mássica dos componentes no fundo da coluna

Pode-se visualizar na Fig. 9 a deposição da mistura etanol-água na base da coluna no início do procedimento. Esse quadro se inverte a medida que a temperatura de operação da

coluna aumenta, fazendo com que o componente mais volátil, no caso o etanol, sofra vaporização, iniciando o processo de separação. A partir dos resultados obtidos observa-se que existe um grande acoplamento entre as variáveis do sistema.

5 CONCLUSÕES

A partir da modelagem e simulação da coluna de destilação extrativa para obtenção do etanol anidro foi possível desenvolver um procedimento de partida adequado para o sistema e analisar o comportamento dinâmico das principais variáveis durante a operação de partida.

Do ponto de vista técnico, os resultados demonstraram que o uso do software Aspen Dynamics adjunto aos princípios da engenharia química permitiu o estudo da etapa de partida para um processo de destilação extrativa, proporcionando informações inerentes a escolha da melhor forma de executar tal procedimento, de forma rápida e com baixo custo.

Do ponto de vista acadêmico, observa-se que o uso do software se mostra de extrema importância para a formação do engenheiro pois o mesmo, permite melhor entendimento e até mesmo um aprofundamento dos fenômenos envolvidos.

De forma geral, pode-se concluir que o respectivo trabalho evidenciou a importância da simulação computacional como ferramenta auxiliar na assimilação e na aprendizagem dos conceitos de engenharia.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Comissão de Aperfeiçoamento de Pessoal do Nível Superior – CAPES, o apoio recebido para o desenvolvimento deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- Barolo, M., Guarise, G. B., Rienzi, S. A., Trotta, A., 1994. Nonlinear Model-Based Startup and Operation Control of a Distillation Column: An Experimental Study. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 33, 3160-3167
- Fieg, G., Wozny, G., 1993 Experimental and theoretical studies of the dynamics of startup and product switchover operations of distillation columns. *Chemical Engineering and Processing*, v.32, p. 283-290, 1993.
- Figueirêdo, M. F., Brito, K. D., Ramos, W. B., Vasconcelos, L. G. S., Brito, R. P., 2015, Optimization of the Design and Operation of Extractive Distillation Processes, *Separation Science and Technology*, v. 50, p. 2238-2247
- Gil, I. D., Gómez, J. M., Rodríguez G., 2012. Control of an extractive distillation process to dehydrate ethanol Using glycerol as entrainer. *Computers & Chemical Engineering*, 39 (6): 129.
- Han, M., Park, S., 1999, Startup of distillation columns using profile position control based on a nonlinear wave model, *Ind. Eng. Chem. Res.* vol. 38, pp. 1565-1574.
- Kister, H. Z., 1990, *Distillation Operation*. McGraw-Hill, Inc.
- Kruse, C., G. Fieg, Wozny, G., 1996. A new time-optimal strategy for column startup and product changeover. *Journal of Process Control* 6 (2–3): 187-193.

- Lowe, K., Li, P., & Wozny, G., 2000. Development and experimental verification of a time-optimal startup strategy for a high purity distillation column. *Chemical Engineering Technology* 23, 841.
- Ruiz, C. A., Cameron, I. T., Gani, R., 1988. A generalized dynamic model for distillation columns—III. Study of startup operations. *Computers & Chemical Engineering* **12**(1): 1-14.
- Weng, K., Lee, H., 2014. Dynamic start-up policies of extractive distillation for dehydration of iso-propyl alcohol process. *The 5th International Symposium on Advanced Control of Industrial Processes*.
- Werle, L. O., Marangoni, C., Steinmacher, F. R., Araújo, P. H. H., Machado, R. A. F., Sayer, C., 2007. Estudo da etapa de aquecimento na partida de uma coluna de destilação comparando os efeitos da ação distribuída de calor com a convencional. 4^o PDPETRO, Campinas – São Paulo.
- Woinaroschy, A., Isopescu, R., 2010, Time-optimal control of dividing-wall distillation columns. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(19), 9195–9208.
- Wozny, G, Li, P., 2004, Optimization and experimental verification of startup policies for distillation columns, *Computers Chemical Engineering*, v. 28, p. 253–265.