

USO DE SOFTWARE GRATUITO DE SIMULAÇÃO EM PROBLEMAS DE ENGENHARIA

Igor Faroni Lucas (igorfaroni@hotmail.com)

Aluno de graduação do curso de Engenharia Química.

Bruna Barbeito Costa (brunabarbeito@hotmail.com)

Aluna de graduação do curso de Engenharia Química.

Felipe Tassarollo Ramos (felipetrpoke@hotmail.com)

Aluno de graduação do curso de Engenharia Química.

Igor Peterle de Melo (marm.igor@hotmail.com).

Aluno de graduação do curso de Engenharia Química.

Marcos Roberto Teixeira Halasz (halasz@fsjb.edu.br)

Professor do curso de Engenharia Química.

RESUMO

O termo simulação de processos consiste em um mecanismo altamente utilizado na indústria, de forma que permite representar um modelo computacional de um projeto real e conduzir experimentos com este modelo sem interferir diretamente no sistema em operação. Com este trabalho simula-se um processo de destilação multicomponentes da mistura BTX (Benzeno, Tolueno e Xileno) proposta inicialmente por GOMIDE (1988), através do software de código livre COCO e, em sequência busca-se avaliar a funcionalidade e flexibilidade do programa mediante as alterações realizadas no decorrer do processo. Simula-se inicialmente o processo de destilação multicomponentes e ao comprovar a eficácia do programa quanto à obtenção dos resultados, propõe-se alterações no estudo a fim de maximizar a produção de Benzeno por meio dos equipamentos e funções disponíveis no software. A fim de demonstrar os resultados obtidos, realizou-se alterações em três etapas do processo: Alteração do número de pratos na primeira coluna de destilação (Coluna 1), diminuição na conversão de Tolueno em Benzeno no reator e alterações de temperatura na saída do reator flash. Ao variar os parâmetros citados anteriormente, conclui-se que o programa continuou funcional e levando-se em consideração as limitações presentes no software gratuito tem-se que os resultados obtidos foram satisfatórios.

PALAVRAS-CHAVE: COCO, Destilação multicomponentes, Flexibilidade do programa, Otimização, Funcionalidade.

1 – INTRODUÇÃO

Segundo Law et al. (2015), a competitividade entre as empresas vem aumentando gradativamente tornando-se necessário que as empresas sejam mais flexíveis em relação a mudanças de cenários, mostrando rapidez na tomada das decisões e possíveis melhoras no processo de implementação das ações a serem tomadas. Nesse contexto surge a simulação de eventos que possibilitam uma análise virtual dos problemas de maneira independente do sistema real, permitindo que soluções sejam encontradas em menor tempo e que sejam economicamente viáveis (apud CALLEFI et al., 2015).

Um dos meios de simular um processo é por meio da utilização de softwares de simulação, como o software COCO (CAPE-OPEN to CAPE OPEN). Ferramentas de simulação vem sendo muito utilizadas no meio industrial, pois permitem realizar alterações buscando a melhor alternativa para solucionar um problema, aumentando assim a produção e diminuindo os custos, sem que seja necessário alterações no sistema real (FRANCISQUETTI, 2014 apud LIMA, 2015).

Desta forma, através do presente artigo, objetiva-se simular por meio do software COCO um processo de destilação de uma mistura envolvendo benzeno, tolueno e xileno, compostos provenientes de processos catalíticos da indústria de petróleo, a fim de avaliar a funcionalidade do programa. Para isso a simulação

será validada através de dados disponíveis na bibliografia, em que será verificado as funções presentes no simulador e com isso será maximizado a produção de benzeno no estudo.

2 – REFERENCIAL TEÓRICO

Simulação de processo é a solução de um sistema de equações de um modelo matemático que descreve um fenômeno físico. A simulação de processos químicos se divide em simulação nos estados estacionário e não estacionário. As simulações em estado estacionário consideram que não há variações no comportamento do sistema ao longo do tempo. Já as simulações em estado não estacionário, são consideradas as variações do sistema ao longo do tempo e, portanto, apresentam equações diferenciais na modelagem matemática (MATOS, 2013).

Um dos simuladores disponíveis e com código gratuito no mercado é o simulador de processos COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN), no qual o estudo será desenvolvido. CAPE é a abreviação de Computer Aided Process Engineering, ou seja, é uma norma para escrever as interfaces de software de simuladores de processos. A simulação de processos químicos pode ser feita através da modelagem do processo em determinada linguagem de programação ou com o uso de simuladores de processos disponíveis para isto (COCO, 2014).

COCO é um ambiente de simulação livre compatível com o estado estacionário, composto pelos componentes COFE (CAPEN-OPEN Flowsheet Environment), onde apresenta um ambiente com uma interface intuitiva para fluxogramas de plantas químicas. O sistema também faz uso de propriedades de corrente, conversão de unidades além de uma facilidade na geração de gráficos. O componente TEA contém um pacote termodinâmico. COUSCOUS proporciona um pacote de operações unitárias (COCO, 2014).

3 – METODOLOGIA DO TRABALHO

Para o início do estudo utilizou-se como base o software gratuito COCO, no qual buscou-se simular uma coluna de destilação com uma mistura de xileno, tolueno e benzeno, a fim de avaliar a confiabilidade da simulação ao comparar os valores obtidos experimentalmente com os valores encontrados na bibliografia. A partir de levantamentos bibliográficos realizados, optou-se por estudar uma coluna de destilação fracionada proposta por Gomide (1988), em que com a utilização de um software de simulação a visualização do processo tornaria-se mais clara e permitiria que alterações fossem realizadas de acordo com a necessidade do estudo.

O processo de destilação estudado é composto por um destilador multicomponente de 17 pratos teóricos, apresentando uma alimentação e duas correntes de saída, sendo uma de topo (destilado) e uma corrente de fundo (líquido). Este estudo busca calcular condições de operação para destilar uma mistura líquida contendo 60 mol% de benzeno, 30 mol% de tolueno e 10 mol% de xileno que alimenta a coluna, de modo a produzir um destilado com menos de 0,5 mol% de tolueno e um produto de fundo com menos de 0,5 mol% de benzeno. A alimentação do sistema será líquido-saturado com pressão de 1 atm e apresentará uma taxa de refluxo igual a 2.

Realizado os testes iniciais com a coluna de destilação, buscou-se maximizar a produção de benzeno, desta forma para garantir que o sistema possuísse dados suficientes para o prosseguimento do estudo, implementou-se ao sistema equipamentos como bomba, misturador, resfriador, reator e coluna de destilação flash a fim de garantir condições adequadas e propiciar a máxima separação do produto de interesse.

De acordo com Douglas (1988) O processo e topologias principais para a hidroalquilação de tolueno estão bem estudados e existe uma quantidade significativa de dados termodinâmicos e cinéticos referentes a esse processo. As correntes de alimentação contêm tolueno e hidrogênio que entrarão no

reator são mantidos a uma pressão de $3,964 \times 10^6$ Pa e a temperatura de 303,2 K que são normalmente utilizadas na indústria, pretendendo-se obter benzeno com elevada pureza (0,9997).

Desta forma configurou-se cada equipamento utilizado no processo e verificou-se se o simulador seria capaz de operar nas condições indicadas. Sendo assim, os resultados obtidos foram analisados e apresentou-se os mesmos sob a forma de tabelas, as quais serão discutidas com maior enfoque nos tópicos seguintes do artigo.

4 – RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foi obtido como resultado da simulação o fluxograma apresentado na Figura 1, com as composições, temperaturas e pressões de cada corrente/equipamentos envolvidos no estudo. A análise do fluxograma revela que o sistema proposto é funcional, de modo que as correntes verdes indicam que o balanço global está adequado e o programa não apresentou erros que impedissem o funcionamento do mesmo.

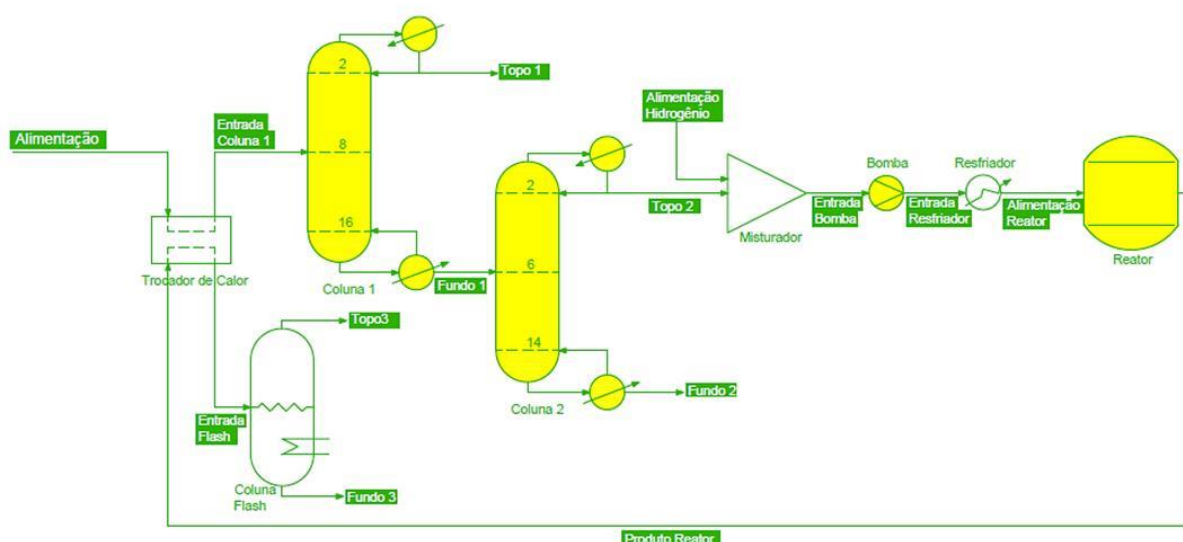


Figura 1: Fluxograma final da simulação.

Analisando os resultados obtidos ao final da simulação foi visto que o modelo de destilação proposto por Gomide foi atendido e então se propôs a modificação na quantidade de pratos teóricos da coluna de destilação 1. Os 17 pratos da proposta foram sendo reduzidos e os resultados foram avaliados e um ponto que pode ser levado em consideração é que sempre que diminuía a quantidade de pratos teóricos da coluna a eficiência da mesma também reduzia. Sendo assim o ideal foi manter a quantidade de pratos próximo ou igual ao que foi proposto pois assim se obteve a máxima eficiência no processo.

Outro ponto em que houve proposta de mudança foi no equipamento reator onde que foi modificada a taxa de conversão de 0,99 para 0,5 e 0,25. A reação em estudo é de ordem 1, no entanto, não foi possível diminuir a conversão a partir da diminuição do percentual molar de entrada de hidrogênio no reator. O software permite modificar a conversão de Tolueno em Benzeno apenas pela programação do equipamento, e não por quantidade de Hidrogênio entrando no reator, sendo assim, não gera tabela de resultados. De forma teórica, obter-se-ia um efeito semelhante, com ambas as modificações, mas há uma limitação do software em gerar resultados com quantidades em excesso ou em falta do reagente limitante da reação.

5 – CONSIDERAÇÕES FINAIS

Através do simulador COCO foi possível fazer a modelagem desejada do processo e com isso simular o mesmo nas condições apresentadas durante o estudo, sendo plausível alterar as variáveis e analisar as condições operacionais, demonstrando as influências individuais de cada alteração no processo.

Demonstrou-se de maneira eficaz o desempenho de colunas de destilação, reator e trocador de calor inclusos no processo, maximizando a produção de benzeno, como produto de interesse, ficando evidente o potencial do simulador COCO como ferramenta computacional de ensino para resolução de problemas de engenharia química. O uso do software faz com que um processo seja visualizado de forma clara e possibilite um melhor entendimento físico e químico de um sistema.

Software de simulação pode ser empregado, portanto, como ferramenta alternativa na solução de problemas envolvendo reatores e demais equipamentos do banco de dados do simulador, sem a necessidade de interromper um processo em operação, auxiliando o engenheiro a definir melhores condições de trabalho e prever as flexibilidades de uma planta química.

6 – REFERÊNCIAS

1. CALLEFI, M. H. B. M.; BARBOSA, W. P.; GERÔNIMO, B. M.; RAMOS, D. V.; SILVA, R. V. B. Modelagem e Simulação de Processos Aplicados em Uma Indústria de Comunicação Visual. Maringá. 12f. 2015. Disponível em: <<http://www.dep.uem.br/simepro/anais/index.php/simepro/simepro/paper/viewFile/158/100>>. Acesso em: 23 abr. 2018.
2. LIMA, R. M.; POUBEL, W. M. Importância do Uso do Software Livre Aplicado à Engenharia Química. Campinas. 5f. 2015. Disponível em: <<http://www.proceedings.blucher.com.br/article-details/importancia-do-uso-do-software-livre-aplicado-engenharia-quimica-20030>>. Acesso em: 23 abr. 2018.
3. COCO – Cape-Open to Cape-Open Simulation Environment. Disponível em <<https://www.cocosimulator.org/>>. Acesso em: 23 Abr. 2018.
4. MATOS, R. Projeto Auxiliado por Computador de Processos Industriais: Análise de Flexibilidade. 2013. Disponível em: <<https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/15229/1/ProjetoAuxiliadoComputador.pdf>>. Acesso em: 05 mai. 2018.