

FACULDADES INTEGRADAS DE ARACRUZ  
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

**BRUNA BARBEITO COSTA**  
**FELIPE TESSAROLLO RAMOS**  
**IGOR FARONI LUCAS**  
**IGOR PETERLE DE MELO**

**UTILIZAÇÃO DE SOFTWARE GRATUITO DE SIMULAÇÃO PARA A  
RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE ENGENHARIA**

ARACRUZ  
2018

BRUNA BARBEITO COSTA

FELIPE TESSAROLO RAMOS

IGOR FARONI LUCAS

IGOR PETERLE DE MELO

**UTILIZAÇÃO DE SOFTWARE GRATUITO DE SIMULAÇÃO PARA A  
RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE ENGENHARIA**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à coordenadoria de Engenharia Química das Faculdades Integradas de Aracruz, como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador (a): Prof. DSc. Marcos Roberto Teixeira Halasz.

ARACRUZ

2018

**BRUNA BARBEITO COSTA  
FELIPE TESSAROLLO RAMOS  
IGOR FARONI LUCAS  
IGOR PERTELE DE MELO**

**UTILIZAÇÃO DE SOFTWARE GRATUITO DE SIMULAÇÃO PARA A RESOLUÇÃO  
DE PROBLEMAS DE ENGENHARIA**

Trabalho de conclusão de curso apresentado à  
coordenadoria do curso de Engenharia Química  
das Faculdades Integradas de Aracruz, como  
requisito parcial para a obtenção do título de  
Bacharel em Engenharia Química.

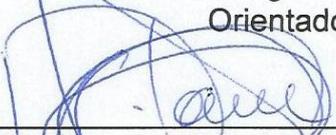
Aprovado em 06 de Setembro de 2018

**COMISSÃO EXAMINADORA**



---

Professor DSc. Marcos Roberto Teixeira Halasz (Orientador)  
Faculdades Integradas de Aracruz  
Orientador



---

Professor DSc. Harerton Oliveira Dourado (Examinador Interno)  
Faculdades Integradas de Aracruz  
Examinador interno



---

Professor MSc. Vital Pereira Batista Júnior (Examinador Interno)  
Faculdades Integradas de Aracruz  
Examinador interno

## **DEDICATÓRIA**

A todos os professores do curso, que foram tão importantes em nossa vida acadêmica e no desenvolvimento deste trabalho.

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus por ter nos concedido a oportunidade de chegar até aqui nos ajudando a superar as dificuldades.

Ao nosso professor Marcos Roberto Teixeira Halasz pela orientação.

Aos nossos familiares que sempre estiveram nos apoiando em nossa jornada acadêmica.

E uns aos outros pelo foco, esforço e dedicação no desenvolver deste trabalho.

“O sucesso é ir de fracasso em fracasso sem perder entusiasmo.”

Winston Churchill

## 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. Desta forma, o termo simulação vem crescendo muito dentro do meio industrial, em que resolver problemas e tomar decisões que sejam rápidas e economicamente viáveis fazem parte desde as ideias iniciais do projeto até sua concepção final. 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 e implementações de equipamentos realizadas no decorrer do processo. Simula-se inicialmente o processo de destilação multicomponentes e ao comprovar a eficácia do programa quanto a 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 simulação é uma ferramenta que auxilia a otimização do processo, sendo assim, três novas situações foram analisadas no processo sem a necessidade de implementá-las. As análises foram na 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. O propósito de realizar as alterações no sistema é verificar o comportamento do software mediante as modificações iniciais e analisar se o programa continuaria funcional mediante ao que foi alterado. Ao variar os parâmetros citados anteriormente, permite-se concluir que ao alterar as configurações iniciais o programa continuou funcional, levando-se em consideração as limitações presentes em um software gratuito tem-se que os resultados obtidos foram satisfatórios, agregando conhecimentos na área de simulação e contribuindo para estudos acadêmicos.

Palavras chave: Simulação. COCO. Destilação multicomponentes. Flexibilidade do programa.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Representação de um destilador flash .....	17
Figura 2 – Fluxograma dos passos metodológicos .....	19
Figura 3 – Interface do COFE .....	20
Figura 4 – Banco de dados do TEA .....	21
Figura 5 – Exemplo de um fluxograma.....	21
Figura 6 – Exemplo de edição do fluxo de alimentação .....	22
Figura 7 – Possíveis dados fornecidos pelo COFE para correntes .....	22
Figura 8 – Configuração inicial da coluna .....	23
Figura 9 – Interface do programa ChemSep .....	24
Figura 10 – Configuração de uma reação .....	25
Figura 11 – Configuração do reator.....	26
Figura 12 – Configuração do trocador de calor .....	27
Figura 13 – Configuração do misturador .....	27
Figura 14 – Configuração da bomba .....	28
Figura 15 – Configuração do resfriador.....	29
Figura 16 – Configuração do destilador flash.....	30
Figura 17 – Inicialização do programa após inserção dos dados.....	30
Figura 18 – Fluxograma final do processo .....	31
Gráfico 1 – Percentual de metano na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash .....	44
Gráfico 2 – Percentual de benzeno na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash .....	45
Gráfico 3 – Percentual de xileno na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash .....	45
Gráfico 4 – Percentual de tolueno na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash .....	46
Gráfico 5 - Variação do coeficiente de fluxo de fundo e topo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash .....	46

## LISTA DE TABELAS

Tabela 01 – Classificação de modelos de simulação.....	5
Tabela 02 – Componentes do Software COCO .....	7
Tabela 03 – Estudos sobre simulação de processos químicos.....	9
Tabela 04 – Tipos de trocadores de calor .....	16
Tabela 05 – Pressão, temperatura e composições das correntes da Coluna 1 .....	32
Tabela 06 – Modificações nas temperaturas ocasionadas pelo trocador de calor ....	33
Tabela 07 – Corrente de topo e de fundo.....	34
Tabela 08 – Pressão, temperatura e composições das correntes da Coluna 2 .....	34
Tabela 09 – Preparação dos reagentes para entrada no reator.....	35
Tabela 10 – Conversão dos reagentes em produtos.....	36
Tabela 11 – Correntes produzidas no reator flash .....	36
Tabela 12 – Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 13 com taxa de refluxo igual a 2 1/2 .....	37
Tabela 13 – Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 13 com taxa de refluxo igual a 2 2/2 .....	38
Tabela 14 – Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 16 com taxa de refluxo igual a 2 1/2 .....	39
Tabela 15 – Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 16 com taxa de refluxo igual a 2 2/2 .....	39
Tabela 16 – Diminuição da conversão de tolueno em benzeno de 0,99 para 0,5 e 0,25 .....	41
Tabela 17 – Mudança da temperatura da saída do flash de 298 K para 310 K .....	42
Tabela 18 – Mudança da temperatura da saída do flash de 298 K para 290 K .....	43
Tabela 19 – Mudança da temperatura da saída do flash de 298 K para 280 K .....	44

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>OBJETIVOS</b>	<b>4</b>
2.1	OBJETIVO GERAL	4
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	4
<b>3</b>	<b>REFERENCIAL TEÓRICO</b>	<b>5</b>
3.1	SIMULAÇÃO POR MEIO DO SOFTWARE COCO	6
3.2	PLATAFORMAS E BANCO DE DADOS DO SOFTWARE COCO	6
3.3	USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS POR OUTROS AUTORES	8
3.4	DESTILAÇÃO	10
3.5	COLUNA DE DESTILAÇÃO	10
3.5.1	<b>Pratos teóricos</b>	111
3.5.2	<b>Condensador</b>	111
3.5.3	<b>Refrervador</b>	111
3.6	PRINCÍPIOS DE CÁLCULOS	122
3.6.1	<b>Balanços materiais</b>	122
3.6.2	<b>Balanços de energia</b>	122
3.6.3	<b>Relações de equilíbrio</b>	133
3.6.4	<b>Equação de velocidade</b>	133
3.7	OPERAÇÃO DE DESTILAÇÃO	133
3.7.1	<b>Destilação fracionada</b>	133
3.8	OUTRAS OPERAÇÕES UNITÁRIAS	144
3.8.1	<b>Reator</b>	144
3.8.1.1	Reatores de Conversão	15
3.8.1.2	Hidroalquilação não catalítica do Tolueno a Benzeno	15
3.8.2	<b>Bomba</b>	15
3.8.3	<b>Trocador de calor</b>	16
3.8.4	<b>Misturador</b>	16
3.8.5	<b>Destilação flash</b>	17

<b>3.8.6</b>	<b>Aquecedor</b> .....	17
<b>4</b>	<b>METODOLOGIA</b> .....	19
4.1	DETERMINAÇÃO DO OBJETO DE ESTUDO.....	19
4.2	UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE COCO E ESTUDO DAS VARIÁVEIS .....	20
4.3	SIMULAÇÃO DO PROCESSO .....	21
<b>4.3.1</b>	<b>Configuração da coluna de destilação</b> .....	23
<b>4.3.2</b>	<b>Configuração do reator</b> .....	24
<b>4.3.3</b>	<b>Configuração de outras operações unitárias</b> .....	26
4.3.3.1	Trocador de calor.....	26
4.3.3.2	Misturador.....	27
4.3.3.3	Bomba .....	28
4.3.3.4	Resfriador .....	28
4.3.3.5	Flash.....	29
<b>4.3.4</b>	<b>Inicialização do programa</b> .....	30
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b> .....	31
<b>6</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	48
<b>7</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	49

## 1 INTRODUÇÃO

Atualmente uma das ferramentas mais importantes da Engenharia Química é a simulação de processos químicos visto que a tecnologia de processamento eletrônico contribui significativamente para a redução das funções de registro e recuperação manual de informações (STAMM, 1998). Os simuladores de processos são capazes de resolver balanços materiais e de energia mais complexos, mas a utilização desta ferramenta não retira dos usuários a necessidade de um estudo prévio minucioso da unidade do processamento e do problema em questão (ABEQ, 2018).

Os processos da indústria química podem ser constituídos por uma sequência de etapas distintas entre si, que têm princípios fundamentais independentes da substância que está em operação e outras características do sistema. Algumas dessas etapas são reações químicas, enquanto outras são modificações físicas e separações, como por exemplo, a destilação (FOUST et al., 2008).

A destilação é uma operação que se origina de uma característica geral de separação entre elementos que, na maioria das vezes, possuem similaridade entre si. É comum para este tipo de separação, uma divergência na composição entre as fases onde geralmente, o vapor formado é mais rico que o líquido quando se trata de componentes mais voláteis (NEDDERMAN, 2004).

Na destilação, a separação dos constituintes está baseada na diferença de volatilidade entre os compostos. Geralmente estes compostos possuem os mesmos componentes, mas em quantidades relativas diferentes. A separação ocorre quando uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida e ocorre transferência de massa do líquido para o vapor e vice-versa. O efeito final é o aumento da concentração do componente mais volátil no vapor e do menos volátil, no líquido (FOUST et al., 2008).

Segundo JUNIOR et al., (2012), 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).

Segundo PEGDEN (1990), “simulação é o processo de projetar um modelo computacional de um sistema real e conduzir experimentos com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação”. Sendo assim a simulação permite que o analisador realize estudos sobre os correspondentes sistemas modelados para a resposta de questões do tipo: “O que aconteceria se?”. O uso dessa ferramenta permite que questões como essa possam ser respondidas sem que os sistemas sob análise sofram qualquer tipo de perturbação, onde que os estudos são realizados no computador (FILHO, 2008).

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). Esta ferramenta vem sendo muito utilizada no meio industrial, pois permite realizar modificações buscando a melhor alternativa para solucionar um problema, otimizar a operação, aumentando assim a produção e diminuindo os custos, sem que seja necessário alterações no sistema real (FRANCISQUETTI, 2014 apud LIMA, 2015).

O estudo da destilação em colunas é um clássico exemplo da aplicabilidade das diferentes áreas de conhecimento da Engenharia Química. Nesse sentido, o presente trabalho se justifica por meio da exigência do mercado para previsão de implementação de processos ou modificações a serem realizadas em plantas industriais. Como a maioria dos parâmetros de entrada ou de operação de uma planta industrial não são controláveis e nem ao menos é possível prever a variação, uma análise de flexibilidade dos processos se faz necessária e pode ser realizada pelo software em estudo.

Este trabalho está estruturado em uma fundamentação teórica que se baseia em uma revisão bibliográfica abordando o tema e os parâmetros que serão analisados; uma metodologia que apresenta o estudo de simulação do processo de destilação, assim como os detalhes da simulação; resultados que apresentam os dados obtidos, superfícies projetadas e comparativos entre os resultados e a bibliografia

correspondente. Por fim, o trabalho apresenta as conclusões obtidas após análise dos resultados, seguido de sugestões para trabalhos futuros.

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 OBJETIVO GERAL

Simular por meio do software gratuito COCO um processo de destilação de mistura de Xileno, Tolueno e Benzeno e avaliar a funcionalidade do programa.

### 2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Utilizar o software para simular uma destilação multicomponente.
- Aferir a confiabilidade da simulação, através de dados disponíveis na bibliografia.
- Verificar as funções presentes no simulador.
- Maximizar a produção de benzeno no processo.

### 3 REFERENCIAL TEÓRICO

A simulação trata-se de uma ferramenta disponibilizada pela área de pesquisa operacional que permite a geração de cenários, a partir dos quais pode-se: orientar o processo de tomada de decisão, proceder análises e avaliações de sistemas e propor soluções para a melhoria de performance. Sendo que, todos estes procedimentos podem ter por conotação parâmetros técnicos e, ou, econômicos (MATOS, 2013).

Diversos são os tipos de simulação existentes e softwares no mercado, com código gratuito ou pago (BRIGHENTI, 2006). Os modelos matemáticos de simulação, ou simplesmente modelos de simulação, podem ser classificados de acordo com a Tabela 01.

**Tabela 01 - Classificação de modelos de simulação**

<b>ESTÁTICOS OU DINÂMICOS</b>	Denominam-se como modelos estatísticos os que visam representar o estado de um sistema em um instante ou que em suas formulações não se leva em conta a variável tempo, enquanto os modelos dinâmicos são formulados para representarem as alterações de estado do sistema ao longo da contagem do tempo de simulação.
<b>DETERMINÍSTICO OU ESTOCÁSTICO</b>	São modelos determinísticos os que em suas formulações não faz em uso de variáveis aleatórias enquanto os estocásticos podem empregar uma ou mais variáveis.
<b>DISCRETOS OU CONTÍNUOS</b>	São modelos discretos aqueles em que o avanço da contagem de tempo na simulação se dá na forma de incrementos cujos valores podem ser definidos em função da ocorrência dos eventos ou pela determinação de um valor fixo, nesses casos só é possível determinar os valores das variações de estado do sistema nos instantes de atualização de contagem de tempo.

### 3.1 SIMULAÇÃO POR MEIO DO SOFTWARE COCO

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 (MATOS, 2013). 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), com o qual o presente 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).

Normalmente, um processo é modelado e suas flexibilidades são analisadas usando equações algébricas empíricas e fenomenológicas para tratar as incertezas de modo probabilístico e apresentar um modelo de resultado proposto. O conjunto de equações é então posto como um problema de otimização complexo usando fatores de correção e propondo valores de sistema (DOUGLAS, 1988).

COCO é um ambiente de simulação livre compatível com o estado estacionário, composto pelos componentes COFE (CAPEN-OPEN Flowsheet Environment), o qual 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).

### 3.2 PLATAFORMAS E BANCO DE DADOS DO SOFTWARE COCO

Os experimentos são realizados por meio do software e os dados são coletados em um processo previamente definido. A simulação realizada obtém assim os dados de desempenho do processo. Antes, porém, o processo simulado é validado com dados operacionais de um processo real a fim de garantir a confiabilidade dos resultados obtidos (DOUGLAS, 1988).

De acordo com AMSTERCHEM (2006), o software COCO é um ambiente gratuito de simulação no estado estacionário, modular e sequencial, e seus componentes estão dispostos na Tabela02.

**Tabela 02 - Componentes do Software COCO**

<b>COFE</b>	O ambiente de fluxogramas (Flowsheet Environment) CAPE-OPEN é uma interface intuitiva à fluxograma de plantas químicas com o usuário. O COFE possui algoritmos de solução sequenciais que usam a abertura automática de correntes, lida com a conversão de unidades e provê funcionalidades de realizar gráficos. Fluxogramas COFE podem ser usados como uma operação unitária CAPE-OPEN, portanto pode-se utilizar fluxogramas COFE como uma operação unitária dentro de outro fluxograma COFE (fluxograma dentro de um fluxograma) ou dentro de outros simuladores.
<b>TEA</b>	Pacote termodinâmico disponível no COCO para aplicação em engenharia baseado no código da biblioteca termodinâmica disponível no CHEMSEP e inclui um pacote de dados com mais de 430 compostos químicos mais comumente utilizados. O pacote ainda exibe mais de 100 métodos de cálculos de propriedades com suas derivadas e analíticas numéricas.
<b>COUSCOUS</b>	Consiste em um pacote de operações unitárias simples CAPE-OPEN que acompanha o COCO. Apresenta um divisor de correntes (splitter), um misturador de correntes (mixer), trocadores de calor (heat-exchangers), bombas (pumps), dentre outras operações unitárias.
<b>CORN</b>	É um pacote numérico de reações CAPE-OPEN que acompanha o simulador COCO e irá facilitar a especificação de qualquer tipo e cinética ou de reação no equilíbrio. Unidades simples de reação, como reatores de equilíbrio, mistura perfeita (CSTR) e reatores de escoamento pistonado (PFR) que podem usar o pacote CORN acompanhando o pacote COUSCOUS.
<b>CHEMSEP</b>	CHEMSEP é o simulador de colunas de destilação, de absorção e operações que envolve extração. O simulador combina o modelo clássico empregado em colunas de estágio de equilíbrio com um modelo de coluna de não equilíbrio (baseado em taxa) em uma interface fácil e intuitiva. O software permite simular colunas com até 40 componentes e até 300 estágios de equilíbrio.

Existem programas auxiliares que podem maximizar e facilitar a utilização dos programas do pacote CAPE-OPEN, entre eles pode-se citar a utilização do ChemSep (AMSTERCHEM, 2006).

ChemSep é um simulador de colunas de destilação, de absorção e operações que envolve extração. O simulador combina o modelo clássico empregado em colunas de estágios de equilíbrio com um modelo de coluna de não equilíbrio (baseado em taxa) em uma interface fácil e intuitiva. O software em questão apresenta certo custo, porém há uma versão gratuita chamada de ChemSep LITE que permite simular colunas com até 40 componentes e até 300 estágios de equilíbrio (ASSIS, 2005).

O banco de dados do ChemSep LITE possui mais de 400 compostos químicos classificados pelo CAS (Chemical Abstracts Service), fórmula química, nomes usuais etc. Os modelos termodinâmicos disponíveis são os mais usuais na Engenharia Química, tanto para a fase gasosa, quanto para a fase líquida. Após a coluna ser corretamente configurada e convergida, diversas análises numéricas e gráficas, incluindo o diagrama de McCabe-Thiele, podem ser efetuadas (ASSIS, 2005).

O ChemSep pode ser instalado e utilizado de modo individual, com colunas independentes, ou ser executado dentro de outros ambientes de simulação, usando o protocolo CAPE-OPEN, tal como o simulador gratuito COCO. Além dos pacotes de propriedades termodinâmicas e físicas existentes no ChemSep, o usuário pode também usar qualquer pacote e compostos compatível com o protocolo CAPE-OPEN (ASSIS, 2005).

### 3.3 USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS POR OUTROS AUTORES

O avanço da tecnologia, a facilidade de acesso à mesma, e a necessidade de realização de estudos avançados e detalhados envolvendo problemas de simulação matemática ou por interface dinâmica (software em estudo), com eficiência e confiabilidade, fizeram com que a simulação passasse a ser uma ferramenta útil, pois com ela é possível prever conflitos referentes ao sistema em questão, bem como maneiras de minimizá-los e otimizar o processo (BELHOT, 2001).

Existem variadas ferramentas que possibilitam a simulação de um processo

industrial, sejam de origem matemática (GNU Octave, Scilab) ou por plataformas interativas (EMSO e COCO). Embora a existência dos softwares citados, o presente trabalho explora o uso do Software COCO para estudo das simulações, avaliando sua confiabilidade.

Dessa maneira, observa-se a importância do estudo de simulação e viabilização das projeções nos processos industriais. Inúmeros estudos vêm explorando estas ferramentas, obtendo resultados excelentes, conforme apresentado na Tabela 03.

**Tabela 03 - Estudos sobre simulação de processos químicos**

<b>Autor</b>	<b>Ano</b>	<b>Título</b>	<b>Assunto</b>
Tiverios e Van Brunt	2000	Destilação Extrativa de Metilciclohexano/Tolueno	Separação de uma mistura equimolar de metilciclohexano e tolueno, por destilação extrativa com fenol como o solvente, por meio do Software COCO.
William L. Luyben	2010	Projeto e Controle de um Processo de Reator/Coluna de Metanol	Projeto economicamente ideal de um sistema de coluna de destilação e reator de metanol com três fluxos de reciclagem de gás para produzir metanol de alta pureza a partir do gás de síntese. O gás de síntese oriundo da oxidação de biomassa, por meio do Software COCO.
William L. Luyben	2010	Projeto e Controle do Processo Cumeno	Simulação da química do processo de cumeno, apresentando a reação desejada de benzeno com propileno para formar cumeno e a reação indesejada de cumeno com propileno para formar p-diisopropilbenzeno, por meio do Software COCO.
Lenise Bissi, Maria Angélica Malta, Mariana Cometti e Rayane Botan	2017	Simulação e Otimização de Reatores Utilizando Softwares Livres	Simulação do esquema reacional de Van de Vusse em um reator CSTR, através do uso dos softwares livres - EMSO e GNU Octave – e, posteriormente, avalia-se o comportamento do sistema diante das modificações realizadas afim de propor melhores condições de operação

### 3.4 DESTILAÇÃO

É importante conhecer os princípios de um processo de destilação, para modelar uma simulação. Quando existe o contato de duas fases de composições diferentes, pode ocorrer a transferência de componentes de uma fase para outra ou vice-versa, sendo esta a base física das operações de transferência de massa. Se as duas fases permanecerem em contato por um intervalo de tempo suficiente, elas irão atingir um estado de equilíbrio e daí por diante não ocorrerá mais transferência material entre elas (FOUST et al., 2008).

O processo de separação mais amplamente utilizado na indústria química é a destilação. Desta forma, a destilação consiste em uma operação unitária que visa separar os componentes de uma fase líquida através de sua vaporização parcial, sendo uma operação de transferência de massa entre uma fase líquida e uma fase vapor (KISTER, 1992).

Em linhas gerais as destilações industriais envolvem misturas multicomponentes, porém a compreensão dos princípios da destilação de misturas binárias é de grande importância sob o ponto de vista didático, pois ela constitui a base de operações que trabalham com compostos mais complexos. Desta forma, cria-se a necessidade de focar os estudos em misturas mais simples para processos iniciais de destilação (GOMIDE, 1988).

### 3.5 COLUNA DE DESTILAÇÃO

Em situações mais simples o destilador consiste apenas em um tanque aquecido e equipado por um condensador, mas geralmente para processos mais complexos faz-se o uso de colunas de destilação. Uma coluna de destilação é composta de um tubo cilíndrico vertical, cujo material utilizado em sua construção depende das substâncias a serem separadas, da pressão e temperatura do processo. A coluna é planejada de modo a promover maior contato e transferência de massa e calor entre as fases (FOUST et al., 2008).

Além do cilindro vertical, um refeedor na base da coluna que promove a vaporização da mistura e um condensador que realiza a condensação do vapor, fazem parte da coluna de destilação. Um tambor de refluxo também pode ser

acoplado ao condensador para armazenar o vapor condensado e bombear parte dele de volta ao topo da coluna como refluxo. As informações essenciais de interesse concentram-se como correntes do condensador e refeedor, e frações de componentes nos pratos teóricos formados no equipamento (GILLILAND, 1950).

### **3.5.1 Pratos teóricos**

Um prato teórico é definido pela norma ASTM Method D 2892 (Method for Distillation of Crude Petroleum – Método de Destilação Para Petróleo Bruto), de 2003, como sendo “a seção de uma coluna requerida para conseguir o equilíbrio termodinâmico entre o líquido e o vapor”. A eficiência de pratos ou recheios é um fator crucial no projeto e na análise de colunas de destilação porque relaciona o número de estágios (pratos) teóricos com o número de estágios reais necessários para uma determinada separação (CALDAS et al., 2007).

### **3.5.2 Condensador**

Os condensadores são trocadores de calor utilizados para resfriar o produto do topo de uma coluna de destilação. O vapor quente que deixa o topo da coluna passa pelo dispositivo de troca térmica e perde calor para a corrente de fluido de resfriamento que passa por tubos internos no equipamento. O fluido de resfriamento absorve o calor da corrente de vapor até que ela sofra condensação total ou parcial (SILVA, 2014).

Os condensadores são geralmente tubulares contendo certo número de tubos internos utilizados para a passagem do fluido de resfriamento que promoverá a transferência de calor e posterior condensação da corrente quente. Os fluidos de resfriamento comumente utilizados para realizar essa tarefa são a água e o ar, podendo ainda ser empregados diversos tipos de substâncias, a depender das condições do processo (SILVA, 2014).

### **3.5.3 Refeedor**

O refeedor tem o papel de fornecer calor para aquecer a corrente líquida proveniente da base da coluna e vaporizá-la. Assim como os condensadores, o refeedor também é considerado um trocador de calor, no qual, o líquido oriundo da

base da coluna sofre vaporização total ou parcial ao ser aquecido pelo vapor utilizado pelo refeedor (SILVA, 2014).

Como mencionado acima, o refeedor pode vaporizar o líquido de forma total ou parcial. No primeiro caso, todo o líquido que vem da base da coluna é transformado em vapor, e nesse caso, o refeedor é chamado de refeedor total. Quando o líquido é parcialmente vaporizado, forma-se uma mistura de líquido e vapor e o refeedor é chamado de refeedor parcial, geralmente considerado como um estágio ideal da coluna (SILVA, 2014).

### 3.6 PRINCÍPIOS DE CÁLCULOS

Segundo GOMIDE (1988), os cálculos de destilação são feitos através da aplicação de balanços materiais, balanços de energia, relações de equilíbrio e equações de velocidade. Desta forma, torna-se fundamental conhecer todos os parâmetros que podem influenciar um processo de destilação e aplicá-los na metodologia de determinação de pratos teóricos de um processo de destilação. Dessa maneira, as frações, vazões de correntes, propriedades termodinâmicas e químicas se encontram interligadas.

#### 3.6.1 Balanços materiais

O balanço material baseia-se no princípio de conservação de massa, sendo realizado através da contabilidade de matéria que entra e deixa um sistema determinado por uma fronteira, seja ela uma corrente, um equipamento ou um processo. A aplicação do balanço depende do contexto em análise, mas é regido pelo fato de que a matéria não pode ser criada tão pouco pode desaparecer. Aplica-se para relacionar as diversas correntes que circulam no interior do equipamento e que constituem elementos importantes do projeto (JUNIOR et al., 2010).

#### 3.6.2 Balanços de energia

Estudos termodinâmicos são de suma importância para a consolidação dos balanços de energia, uma vez que o principal fundamento do balanço de energia está na primeira lei da termodinâmica, na qual é dito que embora a energia assuma várias formas, a sua quantidade é constante e, quando a energia em uma forma desaparece, ela reaparece simultaneamente em outras formas, sendo contabilizada

pela diferença entre trabalho realizado e o calor fornecido ao mesmo, sendo responsáveis por calcular as cargas térmicas dos aquecedores na alimentação, condensadores e refeedores em uma coluna de destilação (BRASIL, 2004; FELDER, 2005).

### **3.6.3 Relações de equilíbrio**

Operações de destilação são realizadas em estágios nos quais duas correntes entram em contato para produzir duas outras correntes diferentes das originais. De forma geral, o vapor que sai de um estágio encontra-se enriquecido nos componentes mais voláteis. Por sua vez, o líquido sai com menor quantidade de voláteis do que o líquido inicialmente alimentado. Desta forma, relações de equilíbrio são fundamentais nos cálculos de transferência de massa influenciando diretamente na determinação dos pratos teóricos do equipamento (CALDAS et al., 2003).

### **3.6.4 Equação de velocidade**

Os dados de velocidade são utilizados para calcular o equipamento necessário para realizar a operação. Para a destilação, a equação da velocidade permite obter o número de estágios reais a partir do número de estágios teóricos. Em uma coluna de placas isto irá significar o número de placas reais, já para uma coluna de enchimento representará a altura do recheio (GOMIDE, 1988).

## **3.7 OPERAÇÃO DE DESTILAÇÃO**

Segundo CHEREMISINOFF (2000), um processo de destilação pode ser conduzido de diversos modos distintos, sendo a mais utilizada a destilação fracionada de componentes.

### **3.7.1 Destilação fracionada**

Durante o processo de destilação simples, as frações iniciais do destilado, ricas no componente mais volátil irão se enriquecer com as frações menos voláteis. Desta forma, com a finalidade de aumentar a eficiência do equipamento tem-se como solução ideal, destilar várias vezes a fração do composto de maneira que possa ser obtido apenas o componente mais volátil nas primeiras frações. Para a realização deste processo com várias etapas de destilação, utiliza-se uma coluna de

fracionamento que irá proporcionar em uma única destilação uma série de estágios de equilíbrio no interior da coluna (GILLILAND, 1950).

As colunas de fracionamento existentes podem ser de pratos e de enchimento. Na primeira, a coluna tem um casco cilíndrico vertical alongado, no interior da qual existe certa quantidade de bandejas horizontais ou pratos. O composto é alimentado em um ponto intermediário da coluna e desta maneira o líquido irá descer de um prato para o outro através dos canais de descida. Neste tipo de coluna, o líquido vai de um lado para o outro nas bandejas e o vapor produzido sobe pela coluna borbulhando. O escoamento é dito cruzado, porém existem colunas sem canais de descida e subida e nesta situação as fases irão escoar em contracorrente (GOMIDE, 1988).

Nas colunas de recheio, líquido e vapor percorrem a coluna através de um enchimento inerte cuja função é promover o contato eficiente das fases. O fluxo de líquido e vapor ocorre apenas no sentido vertical. A corrente gasosa se desloca no sentido ascendente, e a corrente líquida no sentido descendente não ocorrendo de forma completa em uma coluna de pratos (ANTUNES, 2011).

### 3.8 OUTRAS OPERAÇÕES UNITÁRIAS

#### 3.8.1 Reator

Cada processo químico industrial é projetado para produzir economicamente um produto desejado, a partir de uma variedade de matérias-primas, através de uma sucessão de etapas de tratamento. As matérias-primas são submetidas a um determinado número de etapas de tratamento físico de modo a torná-las aptas a reagir quimicamente no interior do reator. Os produtos da reação devem então ser submetidos a tratamentos físicos subsequentes (LEVENSPIEL, 2000).

O equipamento no qual as informações empíricas são obtidas e inseridas pode ser dividido em dois tipos, os reatores descontínuos (batelada) e os reatores contínuos. O reator em batelada consiste em um tanque que contém os reagentes enquanto eles reagem. O reator contínuo é usado principalmente no estudo da cinética de reações heterogêneas (LEVENSPIEL, 2000).

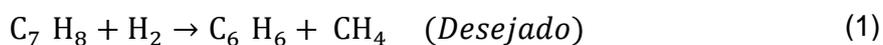
### 3.8.2 Reatores de Conversão

Consiste em um tipo de reator mais simples, no qual fornece-se a conversão e a taxa de reação ao simulador, sendo os produtos consequência direta destas informações. Reatores de conversão simples existem apenas em ambientes de simulação e servem para simular plantas inteiras, envolvendo reação de separação, quando não se tem a preocupação com a análise do reator, garantindo apenas que a conversão fornecida seja capaz de ser atingida em um reator real independentemente do seu tipo de operação ou construção (COCO, 2014).

#### 3.8.1.2 Hidroalquilação não catalítica do Tolueno a Benzeno.

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 (DOUGLAS, 1988).

As reações químicas de interesse do processo de hidroalquilação não catalítica do tolueno a benzeno seguem nas equações 1 e 2.



As correntes de alimentação contêm tolueno e hidrogênio que 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 (0,999) (DOUGLAS, 1988).

### 3.8.2 Bomba

Em um sistema com escoamento é usualmente necessário adicionar energia ao fluido para manter o seu escoamento. A energia é gerada por um equipamento motriz do fluido, como uma bomba ou um compressor (FOUST et. al., 2008).

A grande parte de energia suprida aos dispositivos motrizes de fluidos em um processo químico constitui, muitas vezes, a parcela mais importante do consumo de energia do processo. Para conservar as condições necessárias é importante escolher bombas e equipamentos apropriadamente dimensionados no processo

(FOUST et. al., 2008).

### 3.8.3 Trocador de calor

Trocadores ou permutadores de calor são equipamentos para a transferência de calor de um meio para o outro. Possuem como função transferir calor de uma fase quente para uma fase fria. Os meios podem estar separados por uma fronteira sólida garantindo com que os fluidos não se misturem, ou podem estar em contato direto (KAKAÇ, 2002).

Os trocadores de calor não podem ser caracterizados por um único modelo e na realidade, a variedade deste equipamento é bem ampla, desta forma os trocadores existentes podem ser estudados e classificados separadamente (FOUST et. al., 2008).

Segundo INCROPERA, (2002) os trocadores de calor podem ser separados de acordo com seu tipo de escoamento e seu tipo de construção, podendo ser classificados de acordo com a Tabela 04.

**Tabela 04 - Tipos de trocadores de calor**

<b>Trocador de tubos concêntricos</b>	Os fluidos quente e frio se movem no mesmo sentido (paralelo) ou no sentido contrário (contracorrente) em dois tubos concêntricos.
<b>Trocador de calor em escoamento cruzado</b>	Um fluido esco perpendicularmente ao outro. Geralmente o fluido quente encontra-se dentro de tubos e o fluido frio está no escoamento cruzado ao mesmo.
<b>Trocador de calor casco e tubo</b>	Possui uma série de tubos dentro de um casco. O tubo geralmente possui chicanas a fim de orientar o escoamento, causando turbulência ao mesmo e assim aumentando seu coeficiente de transferência de calor.
<b>Trocador de calor compacto</b>	Apresenta densa matriz de tubos aletados ou placas e são utilizados quando se precisa atingir superfícies de transferência de calor muito grandes.

Fonte: INCROPERA, 2002.

### 3.8.4 Misturador

Segundo a fabricante de misturadores industriais CONSOLID (2018), os

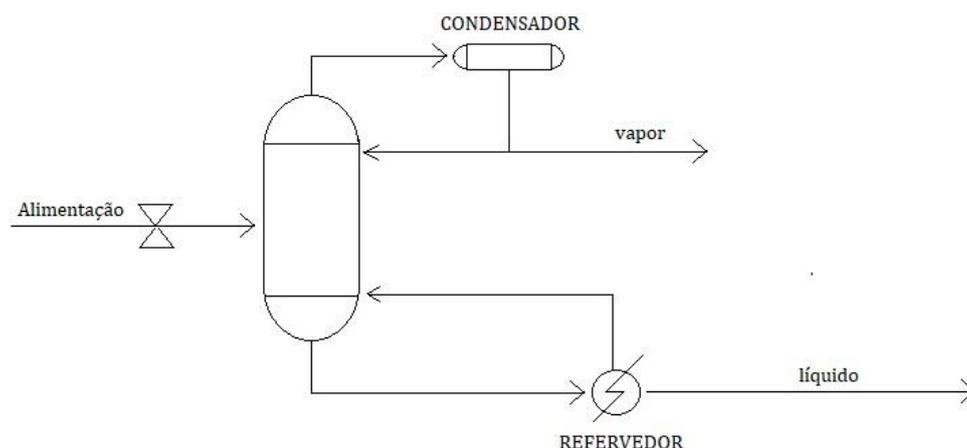
misturadores industriais são equipamentos compactos, de alta robustez, utilizados em processos industriais de mistura e homogeneização de soluções, com ou sem presença de materias suspensos. Os misturadores, industriais possuem um controle de mistura que ocorre através da interação de elementos de mistura, especialmente desenvolvidos para cada aplicação. Além disso, os misturadores permitem a realização de processos em um único equipamento, com várias formas de dosagem e alto rendimento operacional em diversas aplicações.

### 3.8.5 Destilação flash

É o caso mais comum de destilação, também conhecido por destilação simples. A utilização da destilação flash é restrita, pois permite somente um grau de separação elevado se a diferença de volatilidade entre os componentes envolvidos for elevada (FOUST et. al., 2008).

Consiste em um processo de destilação de um único estágio (Figura 1). É obtida diante do aquecimento prévio da mistura alimentada e sua posterior passagem por válvulas redutoras de pressão. A pressão da mistura é levada para um valor menor que sua pressão de vapor naquela temperatura e ocorre a vaporização parcial, separando os componentes da mistura (ANTUNES, 2011).

Figura 1 - Representação de um destilador flash



Fonte: ANTUNES, 2011.

### 3.8.6 Aquecedor

Segundo a fabricante MAZE (2018), aquecedores industriais são equipamentos

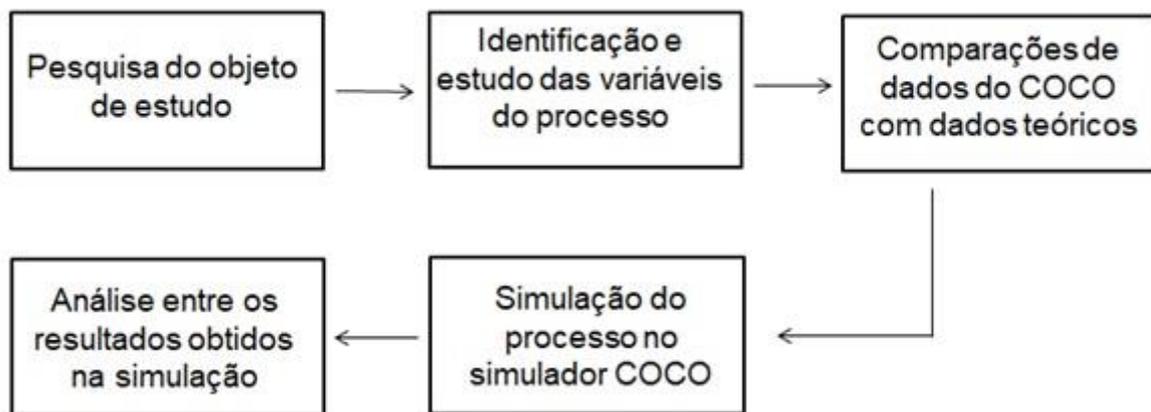
largamente utilizados nas indústrias químicas, metalúrgicas e petroquímicas. Os aquecedores são equipamentos que realizam a mudança e o controle de temperatura das substâncias que serão incluídas no processo de fabricação.

Aquecedores industriais são produtos que apresentam alta capacidade de controle, segurança e eficiência. São projetados e construídos com materiais que facilitam sua capacidade de aquecimento. Existem vários modelos de aquecedores industriais sendo necessário verificar onde serão aplicados, além dos cuidados com limpeza e manutenção que são inerentes ao produto (MAZE, 2018).

## 4 METODOLOGIA

O presente trabalho busca simular uma coluna de destilação com uma mistura de xileno, tolueno e benzeno e avaliar a confiabilidade da simulação por meio do software proposto COCO. As etapas de planejamento e metodologias de trabalho estão dispostas na Figura 2.

Figura 2 - Fluxograma dos passos metodológicos



Fonte: Arquivo pessoal.

### 4.1 DETERMINAÇÃO DO OBJETO DE ESTUDO

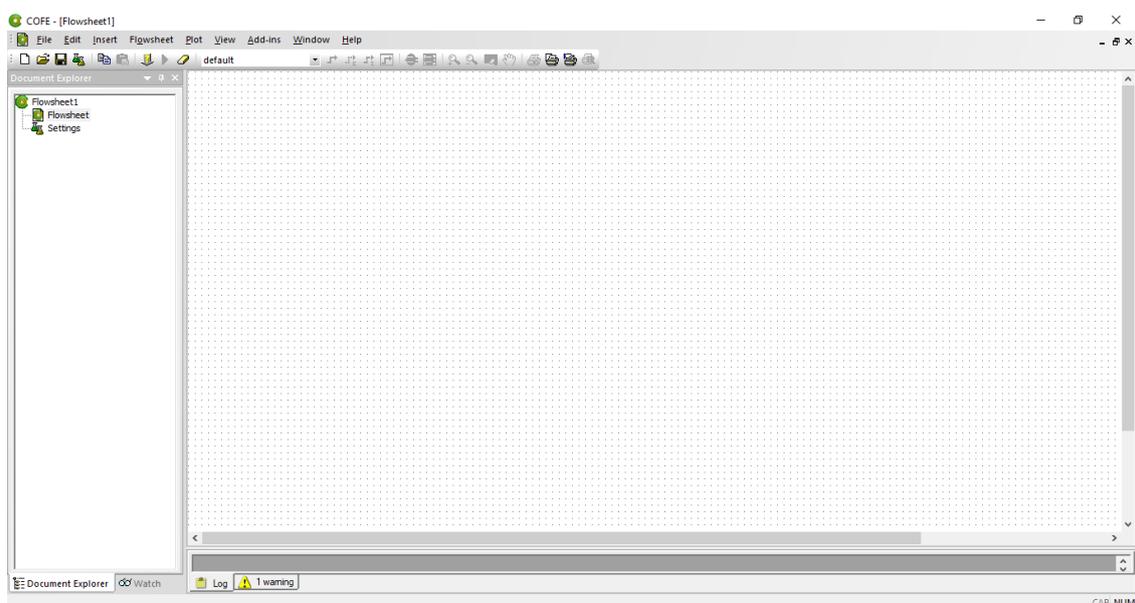
A partir de levantamentos bibliográficos realizados, optou-se por estudar uma coluna de destilação fracionada proposta por GOMIDE (1988). A utilização de um software de modelagem de processos industriais possibilita visualizar de forma mais clara o processo em análise, assim como as características de cada prato teórico envolvido.

O processo de destilação em questão é composto por um destilador multicomponente composto por 17 pratos teóricos, com 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.

## 4.2 UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE COCO E ESTUDO DAS VARIÁVEIS

O simulador de processos COCO foi escolhido como ferramenta para a realização das análises por meio de uma linguagem interativa e plataformas de acesso gratuito. Para iniciar o simulador é necessário abrir o componente COFE e assim é possível visualizar a sua interface (Figura 3). Esta interface é utilizada para a montagem da coluna de destilação com seus componentes necessários para operação (condensador e refeedor, por exemplo) e para a inserção do fluxo das correntes de alimentação bem como outros equipamentos que irão compor a simulação. O conjunto coluna, correntes e demais equipamentos será denominado fluxograma do processo.

Figura 3 - Interface do COFE



Fonte: Arquivo pessoal.

Para que a formulação do processo tenha início no fluxograma, insere-se os compostos utilizados na simulação. A inserção destes compostos utilizará outro componente do COCO, o TEA que engloba todo o banco de dados de termodinâmica do simulador. Para sua utilização, na barra de ferramentas, seleciona-se as seguintes opções em sequência: Flowsheet > Configure > Propertypackages > Add > TEA > New e assim abrirá o banco de dados do TEA, mostrado na Figura 4 e com isto é feita a escolha dos compostos utilizados no processo.



O fluxo da (s) corrente (s) de alimentação pode ser editado da maneira que for necessária modificando informações que forem pertinentes (a interface de edição pode ser vista na Figura 6).

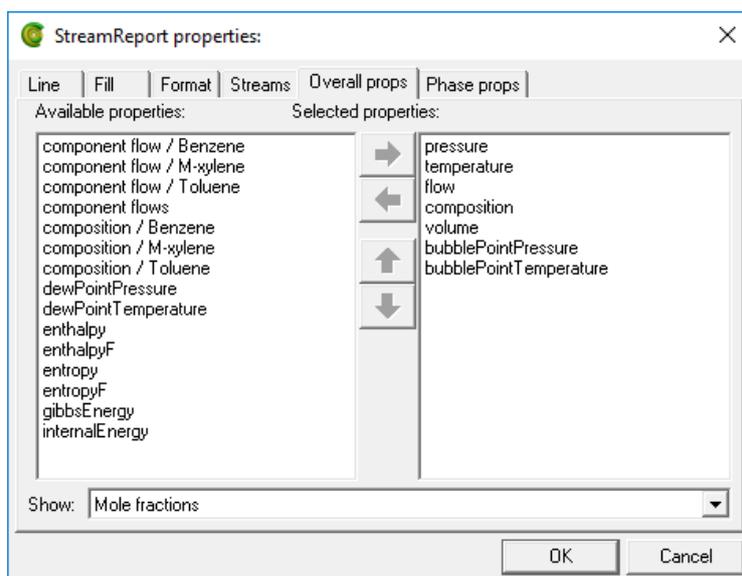
Figura 6 - Exemplo de edição do fluxo de alimentação

name	alimentação	unit
<b>Stream</b>		
name	alimentação	
description		
type	default	
<b>Connections</b>		
from	<FEED STREAM>	
to	Column_1/Feed1_stage8	
<b>Overall</b>		
pressure	1	atm
temperature	310	K
mole fraction [Benzene]	0.6	
mole fraction [M-xylene]	0.1	
mole fraction [Toluene]	0.3	
flow	100	mol / s
MW	0.085127399	kg / mol
<b>Compound flows</b>		
Benzene	60	mol / s
M-xylene	10	mol / s
Toluene	30	mol / s
<b>Phase Fractions</b>		
<b>Liquid composition</b>		
mole fraction [Benzene]	0.6	
mole fraction [M-xylene]	0.1	
mole fraction [Toluene]	0.3	
<b>Overall properties</b>		
<b>Liquid properties</b>		

Fonte: Arquivo pessoal.

É possível também no que diz respeito as correntes, especificar a composição das mesmas que irão fazer parte da coluna. Essas especificações de composição estão dispostas em um banco de dados existente mostrado pelo COFE (Figura 7).

Figura 7 - Possíveis dados fornecidos pelo COFE para correntes



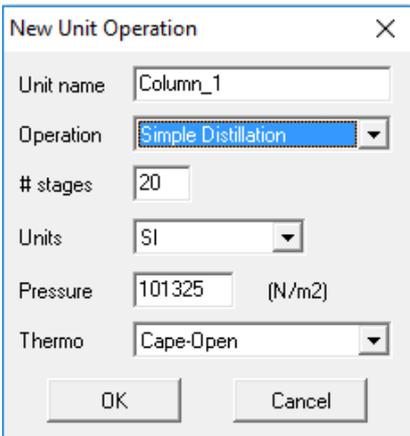
Fonte: Arquivo pessoal.

### 4.3.1 Configuração da coluna de destilação

Com o fluxograma montado, se faz necessária a configuração da coluna de destilação inserida, para isso utilizará um programa integrado ao COCO, o ChemSep. O ChemSep é um programa para a montagem de colunas de destilação, absorção e extração.

Para dar início ao ChemSep é necessário inserir uma coluna de destilação no COFE e dar um duplo clique nela. Após isto, será aberta uma janela para a configuração inicial da coluna, solicitando informações (Figura 8) como o tipo de destilação (operation), o número de estágios (#stages), a pressão (pressure), entre outros.

Figura 8 - Configuração inicial da coluna



The image shows a dialog box titled "New Unit Operation" with a close button (X) in the top right corner. It contains several input fields and dropdown menus:

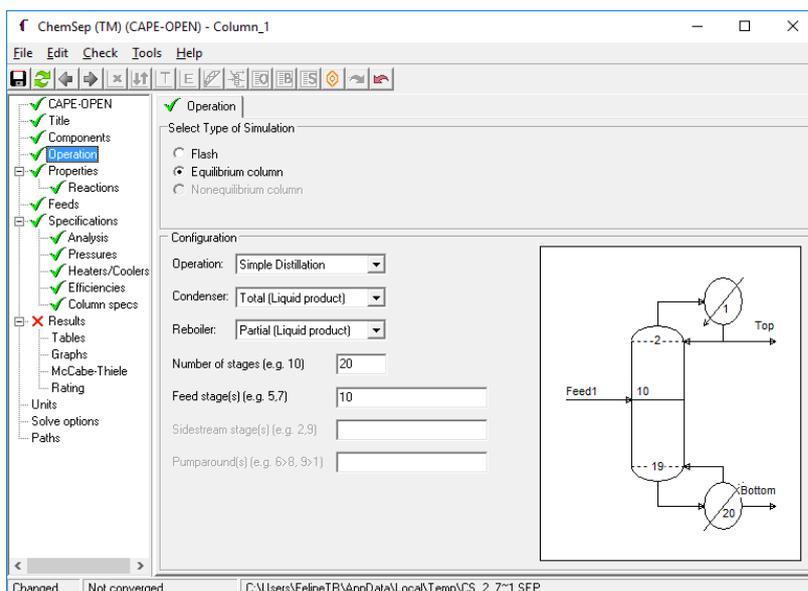
- Unit name: Column\_1
- Operation: Simple Distillation (selected in a dropdown menu)
- # stages: 20
- Units: SI (selected in a dropdown menu)
- Pressure: 101325 (N/m<sup>2</sup>)
- Thermo: Cape-Open (selected in a dropdown menu)

At the bottom of the dialog box, there are two buttons: "OK" and "Cancel".

Fonte: Arquivo pessoal.

Após a inserção dos dados necessários, a interface do ChemSep será aberta (Figura 9), onde é possível configurar a coluna por completo, podendo inserir a quantidade de correntes de entradas que se fizerem necessárias e as correntes de saída e especificar uma condição do refeedor e do condensador.

Figura 9 - Interface do programa ChemSep



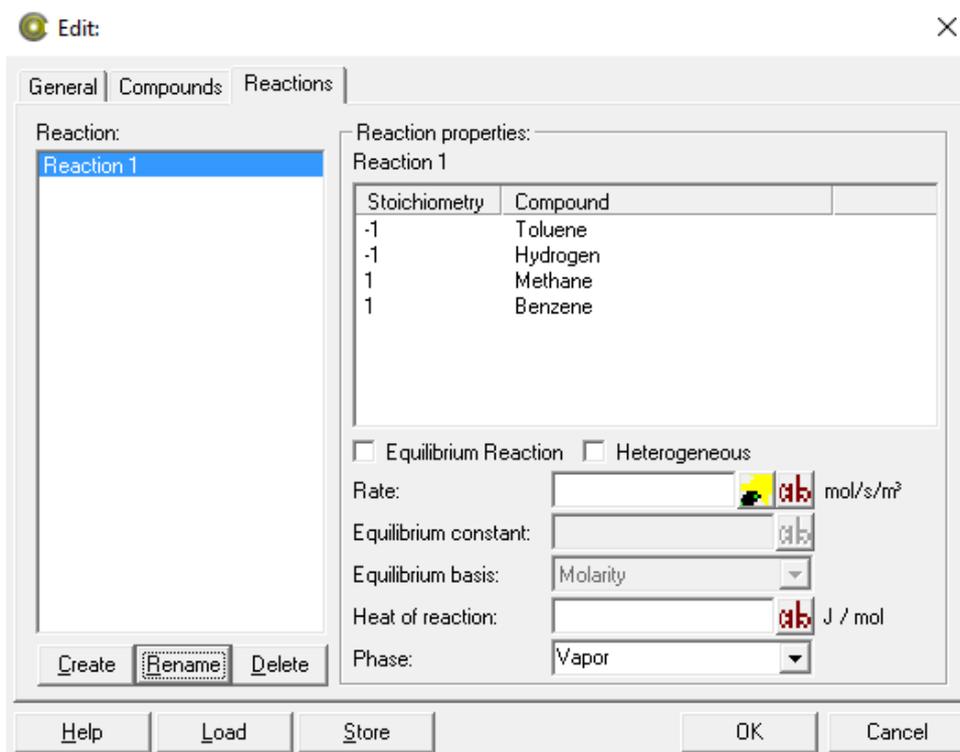
Fonte: Arquivo pessoal.

A partir da destilação fracionada proposta por GOMIDE (1988), buscou-se analisar o uso de outros equipamentos que compõem o estudo das operações unitárias adaptando-os à proposta inicial buscando fazer com que os dados dos equipamentos adicionados fossem capazes de promover a máxima obtenção de benzeno.

#### 4.3.2 Configuração do reator

É necessário configurar o reator colocado no processo e para isso utilizou-se um componente do COCO, o CORN. O CORN simplifica a simulação de reações dentro do programa. Para a utilização do CORN, na barra de ferramentas, seleciona-se as seguintes opções em sequência: Flowsheet > Configure > Reactionpackages > Add > CORN > Compounds onde os compostos que participarão da reação podem ser inseridos, por meio do banco de dados do TEA (Figura 4), logo após, na mesma janela deve-se configurar a reação na aba “Reactions” (Figura 10).

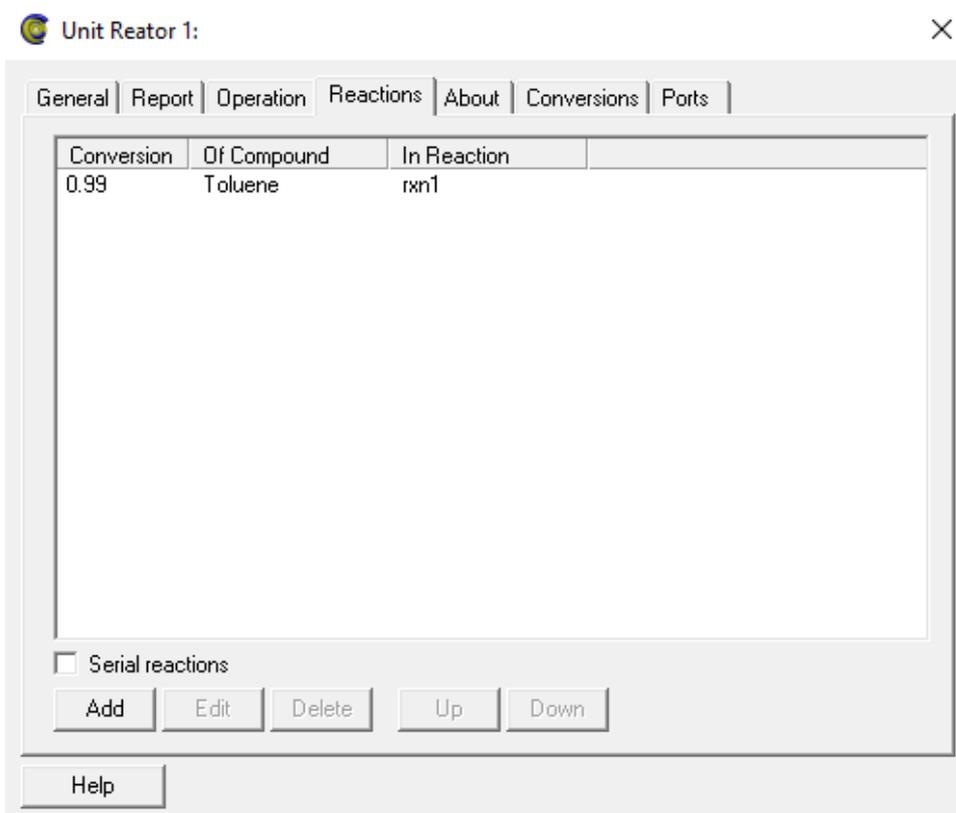
Figura 10 - Configuração de uma reação



Fonte: Arquivo pessoal.

Após a reação ser inserida, o reator é então configurado pelo componente COUSCOUS, utilizado para configurar as operações unitárias (exceto as colunas de destilação), seguindo os passos supracitados pode-se colocar os dados de conversão da reação, a diferença de pressão e a diferença de temperatura que ocorrem dentro do reator (Figura 11).

Figura 11 - Configuração do reator



Fonte: Arquivo pessoal.

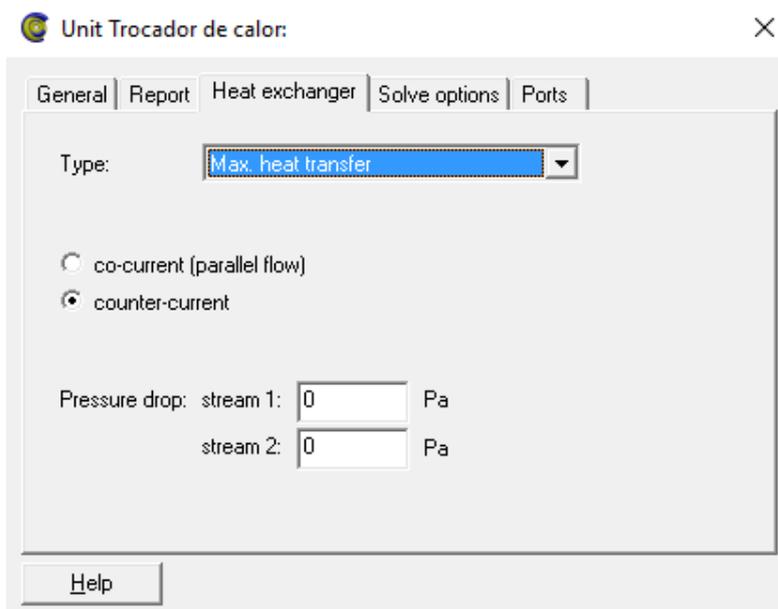
### 4.3.3 Configuração de outras operações unitárias

Para as demais operações unitárias as configurações são simples e não demandam de muitos dados para o funcionamento no simulador.

#### 4.3.3.1 Trocador de calor

Para a configuração do trocador de calor não é necessário o tipo de trocador utilizado e se há queda de pressão em alguma das entradas, ilustrado na Figura 12.

Figura 12 - Configuração do trocador de calor

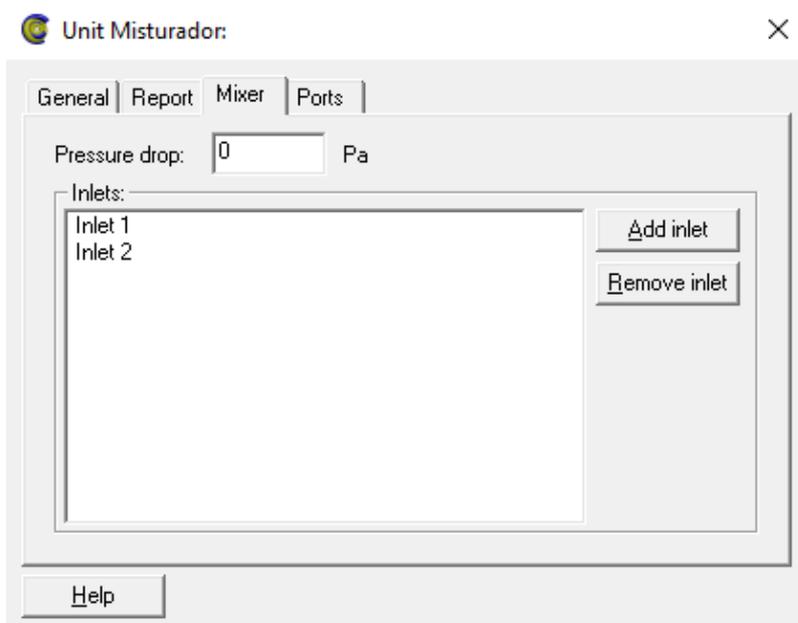


Fonte: Arquivo pessoal

#### 4.3.3.2 Misturador

Para a configuração do misturador são necessárias somente as informações de queda de pressão e o número de fluxos que serão misturados, ilustrado na Figura 13.

Figura 13 - Configuração do misturador

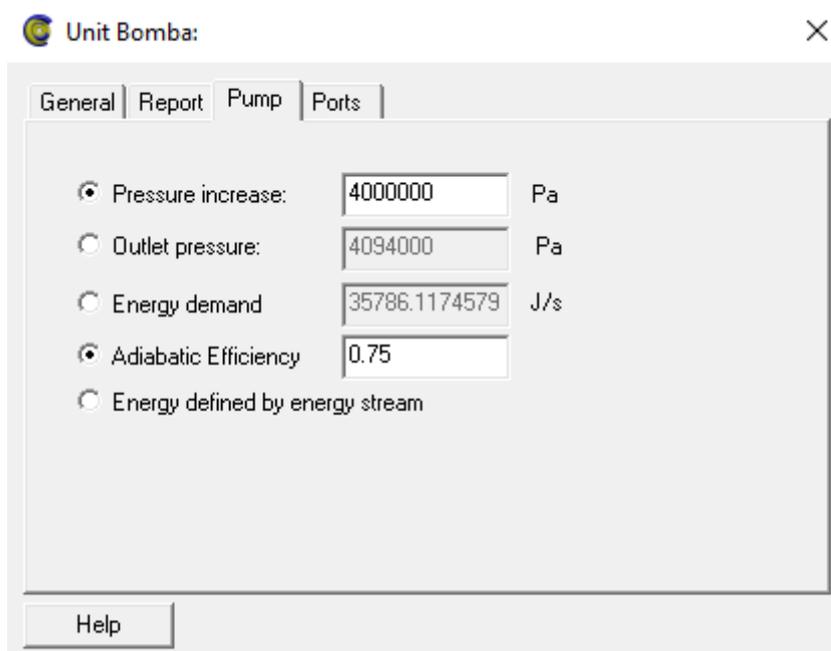


Fonte: Arquivo pessoal

#### 4.3.3.3 Bomba

Para a configuração da bomba pode-se escolher entre inserir os dados de aumento de pressão, a pressão de saída ou a energia gasta na bomba, e por fim indicar a eficiência adiabática da bomba, ilustrado na Figura 14.

Figura 14 - Configuração da bomba

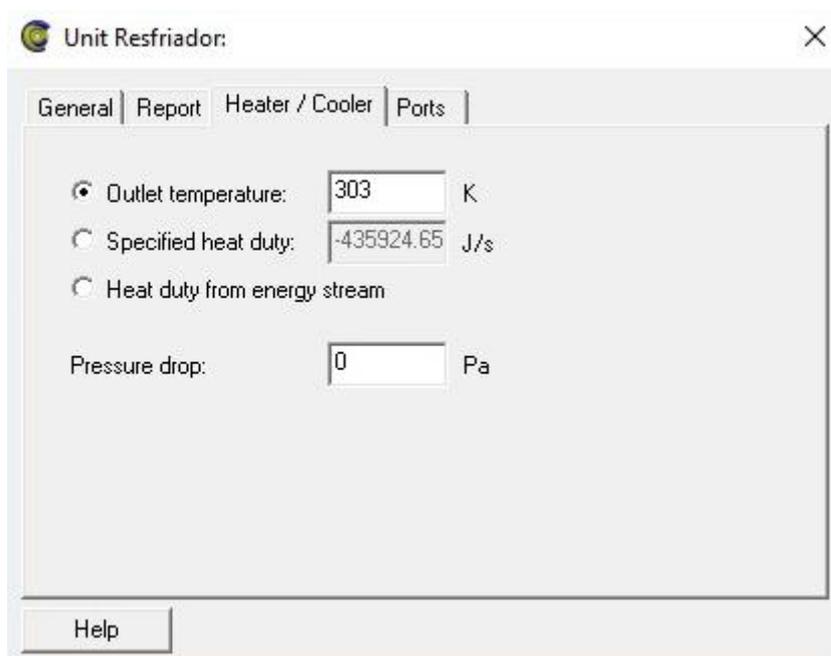


Fonte: Arquivo pessoal

#### 4.3.3.4 Resfriador

Para a configuração do resfriador é necessário fornecer a temperatura de saída do fluido ou fornecer a quantidade de calor retirado do fluido pelo resfriador no processo, por fim, indicar a queda de pressão ocorrida no equipamento, ilustrado na Figura 15.

Figura 15 - Configuração do resfriador

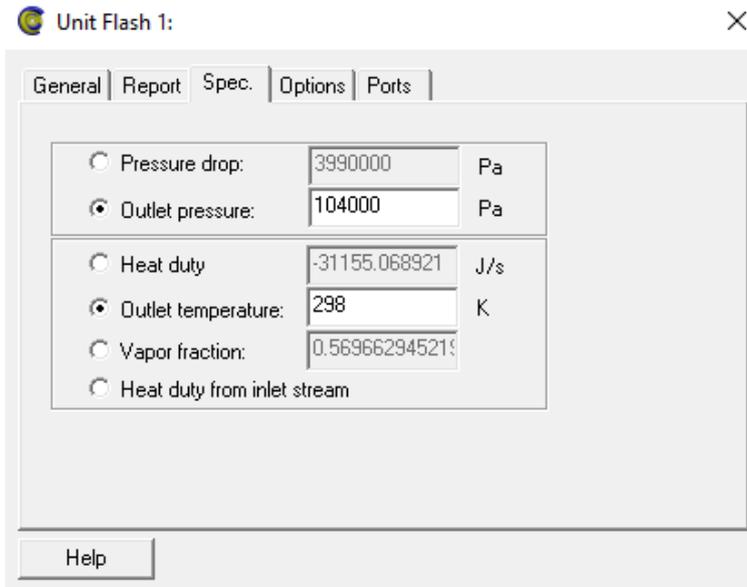


Fonte: Arquivo pessoal

#### 4.3.3.5 Flash

Para a configuração do destilador flash é necessário que seja especificar as informações para a pressão do equipamento, podendo ser escolhida entre a queda de pressão do equipamento ou a pressão final dos fluidos, e também as informações referentes a temperatura, podendo ser escolhida entre a quantidade de calor utilizado no equipamento, a temperatura de saída dos fluídos ou a fração do vapor da mistura, ilustrada na Figura 16.

Figura 16 - Configuração do destilador flash

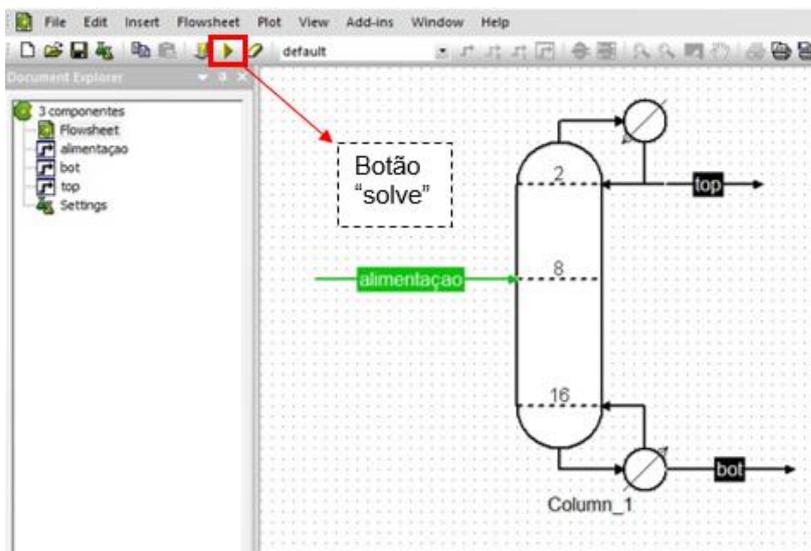


Fonte: Arquivo pessoal

#### 4.3.4 Inicialização do programa

Finalizando a configuração das operações unitárias e das correntes o programa pode ser inicializado clicando no botão “solve” (Figura 17) ou apenas apertando a tecla F5 no teclado. O COFE fornece os resultados de acordo com o que deseja ser analisado.

Figura 17 - Inicialização do programa após inserção dos dados



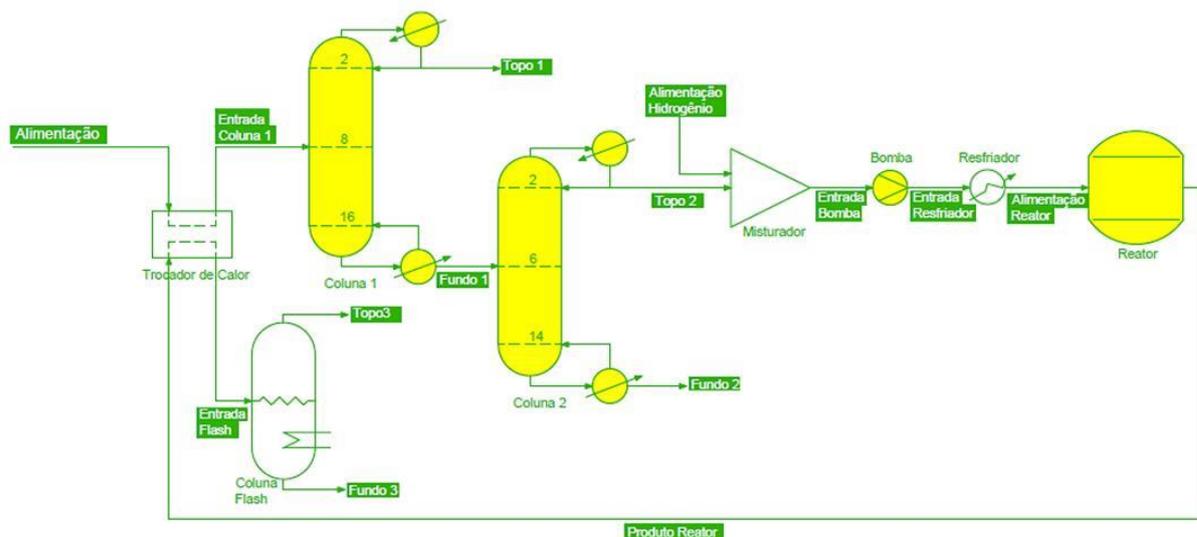
Fonte: Arquivo pessoal

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Após inserção de todos os dados segundo a metodologia proposta e seguindo o modelo de coluna de destilação de Gomide (1988) e o modelo de reator de Douglas (1988) o simulador foi executado.

Como resultado da simulação foi obtido o fluxograma apresentado na Figura 18, 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 18 - Fluxograma final do processo



Fonte: Software COCO.

Para melhor visualização dos resultados e assim ser possível analisar cada situação, os dados dispostos nas tabelas 05 a 19 possuem valores com um número não padronizado de casas decimais pois foram obtidos diretamente do simulador.

Afim de testar e viabilizar o software COCO, tomou-se como ponto de partida o processo de destilação multicomponentes definido por GOMIDE (1988) e citado anteriormente no objeto de estudo. As condições iniciais propostas pelo autor foram inseridas na corrente de alimentação, obtendo-se como resultado para a Coluna 1 a Tabela 5.

**Tabela 05 - Pressão, temperatura e composições das correntes da Coluna 1**

Corrente	Alimentação	Entrada	Topo 1	Fundo 1
Coluna 1				
Pressão (atm)	1	1	1	1
Temperatura (°C)	60	52,2861	79,6858	116,091
Taxa de fluxo (mol/s)	100	100	60,02	39,98
Fração molar de Benzeno	0,6	0,6	0,999	0,001
Fração molar de Xileno	0,1	0,1	4,56368e-08	0,250125
Fração molar de Tolueno	0,3	0,3	0,000999954	0,748875

Fonte: Software COCO.

De acordo com GOMIDE (1988) o processo de destilação da mistura BTX (Benzeno, Tolueno e Xileno) deve produzir uma corrente de destilado com menos de 0,5% de tolueno e um produto de fundo com menos de 0,5% de benzeno, de modo que ao atingir estas condições o programa torna-se apto para o estudo proposto.

Ao observar a Tabela 05 pode-se notar que as condições de destilação determinadas pelo autor foram alcançadas, obtendo-se valores menores do que foi estabelecido inicialmente. O resultado obtido para a corrente de destilado foi de 0,0999954% de tolueno e 0,1% de benzeno indicando que o software COCO foi eficiente para a simulação da separação dos compostos.

Feito o primeiro teste na Coluna 1 e identificado a eficácia do programa para a resolução de problemas envolvendo colunas de destilação, implementou-se os demais equipamentos e observou-se o comportamento do software diante das alterações realizadas. Desta forma, a segunda corrente que alimenta o fluxograma denominada de “Produto Reator”, provém de um processo de reforma catalítica oriunda da reação de hidroalquilação de Tolueno e Hidrogênio. A corrente originada irá auxiliar no processo de transferência de calor com a corrente de alimentação, contribuindo para a redução na temperatura de entrada na Coluna 1 e garantindo que a mistura BTX entre no processo na forma líquida.

Para a realização da troca térmica no sistema o equipamento utilizado (Trocador de Calor Casco-Tubo) mostrou-se adequado para o sistema no qual a partir da análise da Tabela 06, observa-se a redução/aumento de temperatura nas correntes analisadas.

**Tabela 06 - Modificações nas temperaturas ocasionadas pelo trocador de calor**

<b>Corrente</b>	<b>Alimentação</b>	<b>Entrada</b>	<b>Topo 1</b>	<b>Fundo 1</b>
		<b>Coluna 1</b>		
Pressão (atm)		1	1	1
Temperatura (°C)		60	52,2861	36,85
Fração molar de Benzeno		0,6	0,6	0,489403
Fração molar de Xileno		0,1	0,1	0,00941373
Fração molar de Tolueno		0,3	0,3	0,00493678
Fração molar de Hidrogênio		0	0	0,00750534
Fração molar de Metano		0	0	0,488741

Fonte: Software COCO.

A partir da análise da Tabela 06 é possível verificar que o trocador de calor empregado no sistema realizou sua função, diminuindo a temperatura da alimentação, de 60 °C para 52,2861 °C, temperatura observada na entrada da Coluna 1, auxiliando no controle de temperatura da mistura BTX e contribuindo para que os componentes estivessem presentes na forma líquida dentro do sistema. De maneira análoga foi observada o aumento de temperatura de 36,85 °C na corrente “Produto do Reator” para 56,8851°C na entrada do flash evidenciando a funcionalidade do trocador proposto ao sistema.

Realizado a troca térmica a mistura foi inserida no primeiro destilador (Coluna 1), este segundo GOMIDE (1988) deve apresentar 17 pratos teóricos a fim de retirar 99,5% de benzeno na corrente de destilado, concentrando Tolueno e Xileno na corrente do fundo conforme mostrado na Tabela 07.

**Tabela 07 - Corrente de topo e de fundo**

<b>Corrente</b>	<b>Alimentação</b>	<b>Entrada</b>	<b>Topo 1</b>	<b>Fundo 1</b>
<b>Coluna 1</b>				
Pressão (atm)	1	1	1	1
Temperatura (°C)	60	52,2861	79,6858	116,091
Taxa de fluxo (mol/s)	100	100	60,02	39,98
Fração molar de Benzeno	0,6	0,6	0,999	0,001
Fração molar de Xileno	0,1	0,1	4,56368e-08	0,250125
Fração molar de Tolueno	0,3	0,3	0,000999954	0,748875

Fonte: Software COCO.

Analisando a Tabela 07, nota-se que a corrente de Fundo 1 apresenta-se concentrada com os produtos Tolueno e Xileno conforme era desejado. Desta forma, com o objetivo de proporcionar maior separação dos componentes da corrente de Fundo 1 é inserido no sistema um segundo destilador multicomponente (Coluna 2), este com 15 pratos teóricos, resultando nos dados expostos na Tabela 08.

**Tabela 08 - Pressão, temperatura e composições das correntes da Coluna 2**

<b>Corrente</b>	<b>Alimentação</b>	<b>Entrada</b>	<b>Topo 1</b>	<b>Fundo 1</b>
<b>Coluna 1</b>				
Pressão (atm)	1	1	1	1
Temperatura (°C)	79,6858	116,091	110,998	138,879
Fração molar de Benzeno	0,999	0,001	0,00131281	2,95097e-08
Fração molar de Xileno	4,56368e-08	0,250125	0,0186872	0,99
Fração molar de Tolueno	0,000999954	0,748875	0,98	0,01

Fonte: Software COCO.

Ao analisar, observa-se que 98% de tolueno foi retirado na corrente "Topo 2" e 99% de xileno na corrente "Fundo 2". Com os produtos devidamente separados, a fim de maximizar a produção de benzeno, realizou-se um processo de hidroalquilação

convertendo o Tolueno (produto comercialmente mais rentável) presente na corrente de “Topo 2” no produto de interesse para a sistema.

Para o processo de hidroalquilação do Tolueno algumas medidas foram adotadas a fim de garantir condições adequadas ao meio reacional, estas condições foram definidas e citadas anteriormente por DOUGLAS (1988), no qual os parâmetros temperatura, pressão e pureza foram previamente definidos.

Com a inserção de uma corrente de Hidrogênio, a pressão e temperatura em que o gás é industrialmente comercializado, em um misturador juntamente com a corrente de topo 2 tem-se o início do processo para que a reação de hidroalquilação ocorra. A inserção da bomba juntamente com o resfriador garante as condições ideais para que os valores bibliográficos de pressão (40 atm) e temperatura (30 °C) sejam atingidos no sistema (Tabela 09).

**Tabela 09 - Preparação dos reagentes para entrada no reator**

<b>Corrente</b>	<b>Alimentação Hidrogênio</b>	<b>Alimentação Reator</b>	<b>Produto Reator</b>	<b>Topo 2</b>	<b>Unidade</b>
Pressão	0,927708	40,4046	40,4046	1	atm
Temperatura	41	29,85	36,85	110,998	°C
Taxa de fluxo	30	60,4538	60,4538	30,4538	mol/s
Fração molar de Hidrogênio	1	0,496247	0,00750534	0	
Fração molar de Benzeno	0	0,00066133	0,489403	0,00131281	
Fração molar de Xileno	0	0,00941373	0,00941373	0,0186872	%
Fração molar de Tolueno	0	0,496247	0,00496247	0,98	

Fonte: Software COCO.

Ao obter os parâmetros de temperatura e pressão, a mistura de Tolueno e Hidrogênio é inserida em um reator de conversão simples, no qual fornece-se a conversão e a reação ao simulador e os produtos serão consequências diretas destas informações. O processo de hidroalquilação ocorre no reator e como resultado da reação tem-se a Tabela 10.

**Tabela 10 - Conversão dos reagentes em produtos**

<b>Corrente</b>	<b>Alimentação</b>	<b>Produto</b>
	<b>Reator</b>	<b>Reator</b>
Pressão (atm)	40,4046	40,4046
Temperatura (°C)	29,85	36,85
Taxa de fluxo (mol/s)	60,4538	60,4538
Fração molar de Hidrogênio	0,496247	0,00750534
Fração molar de Benzeno	0,00066133	0,489403
Fração molar de Xileno	0,00941373	0,00941373
Fração molar de Tolueno	0,493678	0,00493678
Fração molar de Metano	0	0,488741

Fonte: Software COCO.

Através da análise da Tabela 10 verifica-se que os reagentes Tolueno e Hidrogênio foram consumidos em 98,5% e 99% respectivamente, produzindo uma corrente de 0,489403 de benzeno e 0,488741 do subproduto metano. Com a finalidade de atender 99,97% de pureza definida inicialmente por DOUGLAS (1988), inseriu-se a corrente “Produto Reator” em um sistema de destilação flash a fim de separar os componentes Benzeno e Metano, maximizando a produção do produto de interesse e resfriando a corrente de alimentação.

Com a inserção do destilador flash no processo, torna-se possível a separação dos compostos, maximizando a produção de Metano na corrente de topo 3 e Benzeno na corrente de fundo 3, através da Tabela 11 observa-se os valores encontrados.

**Tabela 11 - Correntes produzidas no reator flash**

<b>Corrente</b>	<b>Produto</b>	<b>Entrada</b>	<b>Topo 3</b>	<b>Fundo 3</b>
	<b>Reator</b>	<b>Flash</b>		
Pressão (atm)	40,4046	40,4046	1,0264	1,0264
Temperatura (°C)	36,85	56,8851	24,85	24,85
Taxa de fluxo (mol/s)	60,4538	60,4538	34,4019	26,0519
Fração molar de Hidrogênio	0,00750534	0,00750534	0,013184	6,58399e-06

**Tabela 11 - Correntes produzidas no reator flash**

Corrente			Produto	Entrada	Topo 3	Fundo 3
			Reator	Flash		
Fração	molar	de	0,489403	0,489403	0,128803	0,965581
Benzeno						
Fração	molar	de	0,00941373	0,00941373	0,000255981	0,021567
Xileno						
Fração	molar	de	0,00493678	0,00493678	0,000431993	0,0108854
Tolueno						
Fração	molar	de	0,488741	0,488741	0,857325	0,00202052
Metano						

Fonte: Software COCO.

Ao analisar a Tabela 11 observa-se que duas correntes distintas são produzidas, no qual a corrente de topo está concentrada no subproduto metano em 0,857325 e a corrente de fundo com o produto de interesse Benzeno com 0,965581.

Apesar do valor encontrado para a produção de Benzeno ser 3,42% menor ao que foi proposto inicialmente por DOUGLAS (1988) observa-se que o programa apresentou resultado satisfatório para o processo de destilação na coluna de destilação flash, visto que o programa apresenta limitações quanto a configuração de alguns parâmetros operacionais.

Efetuada a simulação da redução no número de pratos teóricos da coluna 1 de 17 pratos para 13, uma pequena diminuição na eficiência de destilação é observada, uma vez que ocorre a redução da fração molar de Benzeno que sai da coluna 1, 0,999 para 0,928, e a redução da fração do Tolueno que entra na coluna 2, 0,748 para 0,716 (Tabela 12). Apesar da redução da fração de tolueno citada anteriormente, a mesma não afeta a fração que entra no misturador.

**Tabela 12 - Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 13 com taxa de refluxo igual a 2 1/2**

Corrente	Alimentação	Entrada	Topo 1	Fundo 1	Topo 2	Fundo 2
Coluna 1						
Pressão (atm)	1	1	1	1	1	1
Temperatura (°C)	60	52,2861	81,1869	116,861	110,994	138,879

**Tabela 12 - Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 13 com taxa de refluxo igual a 2 1/2**

Corrente	Alimentação	Entrada	Topo 1	Fundo 1	Topo 2	Fundo 2
Coluna 1						
Taxa de fluxo (mol/s)	100	100	64,6169	35,3831	25,7697	9,61347
Fração molar Benzeno	0,6	0,6	0,928003	0,001	0,00137305	2,62033e-09
Fração molar Xileno	0,1	0,1	4,1142e-05	0,282545	0,0186269	0,99
Fração molar Tolueno	0,3	0,3	0,0719561	0,716455	0,98	0,01
Fração molar Hidrogênio	0	0	0	0	0	0
Fração molar Metano	0	0	0	0	0	0

Fonte: Software COCO.

Existe uma pequena redução na fração de Tolueno na alimentação do reator de 0,493 para 0,452, mas que não influencia significativamente a obtenção do benzeno ao final da separação no destilador flash, como pode ser observado na Tabela 13.

**Tabela 13 - Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 13 com taxa de refluxo igual a 2 2/2**

Corrente	Alimentação	Alimentação	Produto	Entrada	Topo 3	Fundo 3
	Hidrogênio	Reator	do Reator	Flash		
Pressão (atm)	0,927708	40,4046	40,4046	40,4046	1,0264	1,0264
Temperatura (°C)	41	29,85	36,85	59,5567	24,85	24,85
Taxa de fluxo (mol/s)	30	55,7697	55,7697	55,7697	34,4103	21,3594
Fração molar Benzeno	0	0,000634451	0,448938	0,448938	0,128572	0,965053
Fração molar Xileno	0	0,00860702	0,00860702	0,00860702	0,000261934	0,0220511
Fração molar Tolueno	0	0,452832	0,00452832	0,00452832	0,000440633	0,0111137
Fração molar Hidrogênio	1	0,537927	0,0896232	0,0896232	0,14521	7,24916e-05
Fração molar Metano	0	0	0,448304	0,448304	0,725516	0,00170951

Fonte: Software COCO.

De maneira semelhante, ao diminuir apenas 1 prato teórico, ocorre a redução nas frações de Benzeno que sai da coluna 1 (Tabela 14), assim como a de Tolueno que entra na coluna 2, no reator, e por fim do Benzeno que sai da coluna de destilação flash. Nessas modificações, as reduções são mínimas e não alteram a destilação de benzeno na primeira etapa, como pode-se observar na Tabela 15.

**Tabela 14 - Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 16 com taxa de refluxo igual a 2 1/2**

Corrente	Alimentação	Entrada	Topo 1	Fundo 1	Topo 2	Fundo 2
Coluna 1						
Pressão (atm)	1	1	1	1	1	1
Temperatura (°C)	60	52,2861	79,7521	116,119	110,998	138,879
Taxa de fluxo (mol/s)	100	100	60,2134	39,7866	30,2567	9,52993
Fração molar Benzeno	0,6	0,6	0,995795	0,001	0,00131497	2,9504e-09
Fração molar Xileno	0,1	0,1	4,39228e-07	0,25134	0,018685	0,99
Fração molar Tolueno	0,3	0,3	0,00420441	0,74766	0,98	0,01
Fração molar Hidrogênio	0	0	0	0	0	0
Fração molar Metano	0	0	0	0	0	0

Fonte: Software COCO.

**Tabela 15 - Alteração do número de pratos teóricos de 17 para 16 com taxa de refluxo igual a 2 2/2**

Corrente	Alimentação Hidrogênio	Alimentação Reator	Produto do Reator	Entrada Flash	Topo 3	Fundo 3
Pressão (atm)	0,927708	40,4046	40,4046	40,4046	1,0264	1,0264
Temperatura (°C)	41	29,85	36,85	59,5567	24,85	24,85
Taxa de fluxo (mol/s)	30	60,2567	60,2567	60,2567	34,4024	25,8543
Fração molar Benzeno	0	0,000660285	0,487827	0,487827	0,128794	0,965564
Fração molar Xileno	0	0,00938231	0,00938231	0,00938231	0,000256186	0,0215257
Fração molar Tolueno	0	0,492087	0,00492087	0,00492087	0,000432296	0,0108935
Fração molar Hidrogênio	1	0,49787	0,0107038	0,0107038	0,018741	9,35894e-06
Fração molar Metano	0	0	0,487166	0,487166	0,851777	0,00200742

Fonte: Software COCO.

O reator possibilita algumas modificações para análise de resultados de simulações. A propriedade que permite alteração nesta etapa do processo é a conversão de

Tolueno em Benzeno. É essencial ressaltar que não se pode alterar a temperatura de saída da corrente que deixa o reator, pois o sistema todo seria influenciado, uma vez que esta corrente é utilizada no trocador de calor para resfriamento da corrente de entrada da coluna de destilação 1.

Analisando as tabelas 12 a 15 é possível verificar que a redução no número de pratos teóricos da coluna de destilação 1 de 17 pratos, proposto por Gomide (1988), para 13 pratos teóricos, primeiramente, foi visto que a eficiência na quantidade de Benzeno obtido era reduzida e posteriormente com a redução de apenas 1 prato teórico foi visto que a eficiência também era afetada, mas não de maneira significativa. Com isso é possível verificar que o ideal foi manter a quantidade de pratos teóricos próximo ou igual ao proposto. Vale ressaltar que não foi feita análise com quantidades de pratos superior ao que foi proposto pois ao inserir as informações propostas no simulador o mesmo atingiu uma eficiência maior do que Gomide (1988) previu que aconteceria.

Tratando-se inicialmente de uma conversão ideal de Tolueno em Benzeno (99%), foi proposto duas outras conversões menores, de 50% e 25%. A reação em estudo é de ordem 1, no entanto, não é 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.

Os efeitos das modificações de conversão de Tolueno em Benzeno no reator, resultou no aumento da quantidade de Tolueno e Metano saindo do reator, uma vez que Benzeno deixou de ser produzido da forma inicialmente determinada (Tabela 16).

**Tabela 16 - Diminuição da conversão de tolueno em benzeno de 0,99 para 0,5 e 0,25**

Corrente	Alimentação Hidrogênio	Alimentação Reator	Produto Reator *	Produto Reator **	Produto Reator ***
Pressão (atm)	0,927708	40,4046	40,4046	40,4046	40,4046
Temperatura (°C)	41	29,85	36,5	36,85	36,85
Taxa de fluxo (mol/s)	30	60,4538	60,4538	60,4538	60,4538
Fração molar Benzeno	0	0,00066133	0,489403	0,2475	0,124081
Fração molar Xileno	0	0,00941373	0,00941373	0,00941373	0,00941373
Fração molar Tolueno	0	0,493678	0,00493678	0,246839	0,370259
Fração molar Hidrogênio	1	0,496247	0,00750534	0,249408	0,372827
Fração molar Metano	0	0	0,488741	0,246839	0,2342

Fonte: Software COCO.

\* - conversão de 0,99; \*\* - conversão de 0,50; \*\*\* - conversão de 0,25.

Na busca de se obter resultados variados no destilador flash, observou-se que a temperatura é um aspecto bastante influente. Tem-se inicialmente uma temperatura de saída com o valor de 298 K, com modificação proposta para 310 K (Tabela 17). Observou-se o aumento das frações molares dos principais componentes de topo da coluna de destilação. O Benzeno, na corrente de topo, passou de 0,1288 para 0,213, Xileno de 0,000256 para 0,00056, Tolueno de 0,000432 para 0,00084. No entanto, observa-se a redução percentual de Hidrogênio de 0,0132 para 0,0119 e Metano de 0,8573 para 0,7737. O coeficiente de vazão de topo teve acréscimo de aproximadamente 3,70 mol/s.

De forma semelhante, mas pouco acentuada, os componentes de fundo também sofreram alterações de suas frações molares na corrente de saída. O Benzeno, na corrente de fundo, passou de 0,9656 para 0,9617, Hidrogênio de  $6,58 \cdot 10^{-4}$  para  $6,38 \cdot 10^{-4}$  e Metano de 0,202 para 0,17. No entanto, o percentual de Xileno passou de 0,0215 para 0,0245, Tolueno de 0,0109 para 0,012. O coeficiente de vazão de fundo reduziu aproximadamente 3,70 mols/s.

**Tabela 17 - Mudança da temperatura da saída do flash de 298 K para 310 K**

Corrente	Entrada Destilador Flash	Topo (298 K)	Topo (310 K)	Fundo (298 K)	Fundo (310 K)
Pressão (atm)	40,4046	1,0264	1,0264	1,0264	1,0264
Temperatura (°C)	56,8851	24,85	36,85	24,85	36,85
Taxa de fluxo (mol/s)	60,4538	34,4019	38,1381	26,0519	22,3157
Fração molar Benzeno	0,489403	0,128803	0,213011	0,965581	0,961762
Fração molar Xileno	0,0041373	0,000255981	0,000560161	0,0215067	0,0245447
Fração molar Tolueno	0,00493678	0,000431996	0,000843622	0,0108854	0,011932
Fração molar Hidrogênio	0,00750534	0,013184	0,0118932	$6,58399 \cdot 10^{-6}$	$6,3855 \cdot 10^{-6}$
Fração molar Metano	0,488741	0,857325	0,773692	0,00202052	0,0017544

Fonte: Software COCO.

Foi simulada a redução de temperatura de saída do destilador flash, de 298 K para 290 K (Tabela 18). Observou-se uma redução das frações molares dos principais componentes de topo da coluna de destilação. O Benzeno, na corrente de topo, passou de 0,1288 para 0,0895, Xileno de 0,000256 para 0,0001525, Tolueno de 0,000432 para 0,000275. No entanto, observa-se o aumento percentual de Hidrogênio de 0,0132 para 0,0138 e Metano de 0,8573 para 0,8962. O coeficiente de vazão de topo teve redução de aproximadamente 1,5 mol/s.

De forma semelhante, porém um pouco mais acentuada, os componentes de fundo também sofreram alterações de seus percentuais molares na corrente de saída. Benzeno, na corrente de fundo, passou de 0,9656 para 0,9668 e Metano de 0,202 para 0,218. No entanto, o percentual de Xileno passou de 0,0215 para 0,0205, do Tolueno de 0,0109 para 0,0105 e o do Hidrogênio  $6,58 \cdot 10^{-4}$  para  $6,56 \cdot 10^{-4}$ . O coeficiente de vazão de fundo teve aumento de aproximadamente 1,5 mol/s.

**Tabela 18 - Mudança da temperatura da saída do flash de 298 K para 290 K**

Corrente	Entrada Destilador Flash	Topo (298 K)	Topo (290 K)	Fundo (298 K)	Fundo (290 K)
Pressão (atm)	40,4046	1,0264	1,0264	1,0264	1,0264
Temperatura (°C)	56,8851	24,85	16,85	24,85	16,85
Taxa de fluxo (mol/s)	60,4538	34,4019	32,9001	26,0519	27,5537
Fração molar Benzeno	0,489403	0,128803	0,0895501	0,965581	0,96684
Fração molar Xileno	0,0041373	0,000255981	0,000152561	0,0215067	0,0204719
Fração molar Tolueno	0,00493678	0,000431996	0,000275142	0,0108854	0,0105029
Fração molar Hidrogênio	0,00750534	0,013184	0,0137855	$6,58399 \cdot 10^{-6}$	$6,55842 \cdot 10^{-6}$
Fração molar Metano	0,488741	0,857325	0,896237	0,00202052	0,00217873

Fonte: Software COCO.

Foi simulada a redução de temperatura de saída do destilador flash, de 298 K para 280 K (Tabela 19). Notou-se uma redução das frações molares dos principais componentes de topo da coluna de destilação. Benzeno, na corrente de topo, passou de 0,1288 para 0,0549, Xileno de 0,000256 para  $7,83031 \cdot 10^{-5}$ , Tolueno de 0,000432 para 0,000153. No entanto, observa-se o aumento percentual de Hidrogênio de 0,0132 para 0,0143 e Metano de 0,8573 para 0,9305. O coeficiente de vazão de topo teve redução de aproximadamente 2,7 mol/s.

De forma semelhante, os componentes de fundo também sofreram alterações de seus percentuais molares na corrente de saída. Benzeno, na corrente de fundo, passou de 0,9656 para 0,9677 e Metano de 0,202 para 0,236. No entanto, o percentual de Xileno passou de 0,0215 para 0,0197, o Tolueno de 0,0109 para 0,0102 e o Hidrogênio  $6,58 \cdot 10^{-4}$  para  $6,40 \cdot 10^{-4}$ . O coeficiente de vazão de fundo teve aumento de aproximadamente 2,7 mol/s.

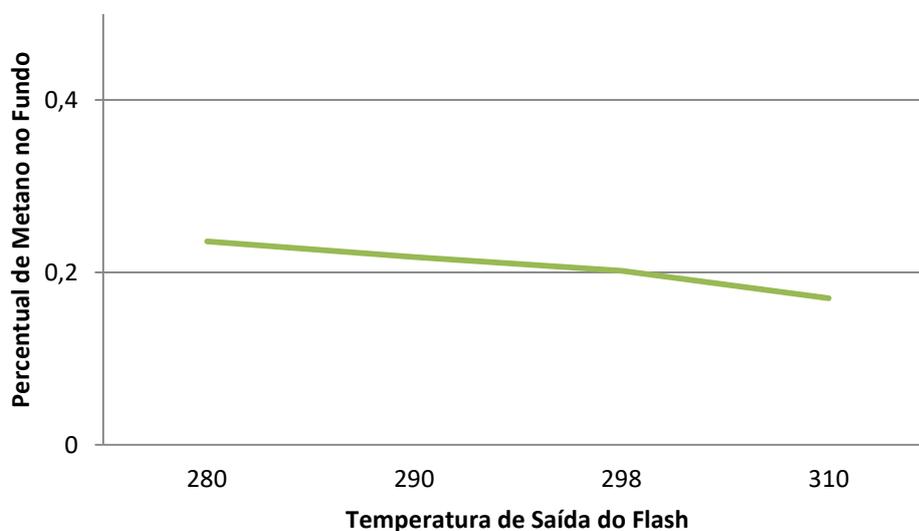
**Tabela 19 - Mudança da temperatura da saída do flash de 298 K para 280 K**

Corrente	Entrada Destilador Flash	Topo (298 K)	Topo (280 K)	Fundo (298 K)	Fundo (280 K)
Pressão (atm)	40,4046	1,0264	1,0264	1,0264	1,0264
Temperatura (°C)	56,8851	24,85	6,85	24,85	6,85
Taxa de fluxo (mol/s)	60,4538	34,4019	31,6796	26,0519	28,7742
Fração molar Benzeno	0,489403	0,128803	0,0549408	0,965581	0,967732
Fração molar Xileno	0,0041373	0,000255981	$7,83031 \cdot 10^{-5}$	0,0215067	0,0196918
Fração molar Tolueno	0,00493678	0,000431996	0,000153115	0,0108854	0,0102035
Fração molar Hidrogênio	0,00750534	0,013184	0,0143165	$6,58399 \cdot 10^{-6}$	$6,4037 \cdot 10^{-6}$
Fração molar Metano	0,488741	0,857325	0,930511	0,00202052	0,00236587

Fonte: Software COCO.

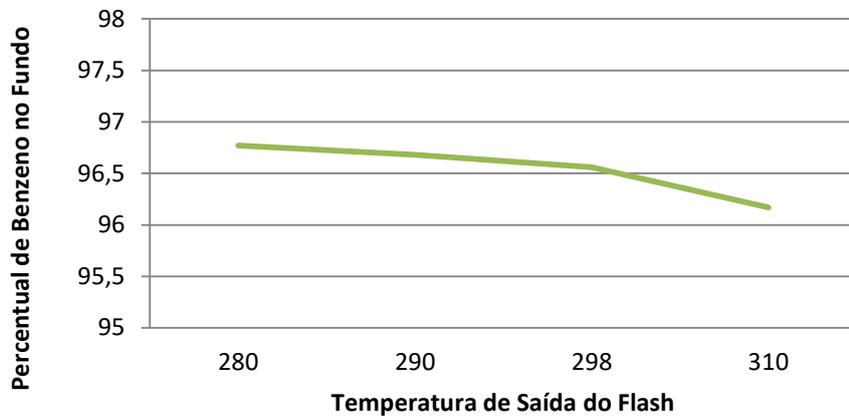
Pode-se observar amplamente o comportamento de todas as alterações descritas acima, por meio dos gráficos 1 a 5.

Gráfico 1 - Percentual de metano na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash



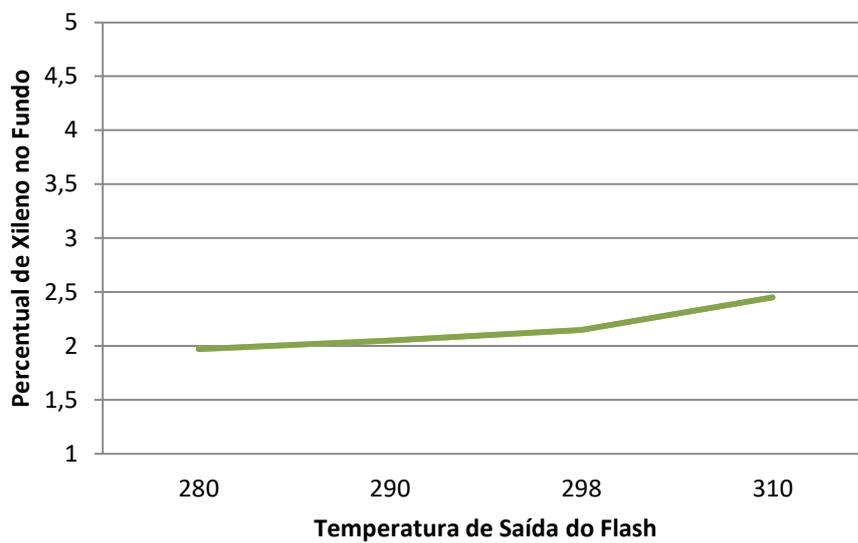
Fonte: Dados do software COCO.

Gráfico 2 - Percentual de benzeno na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash



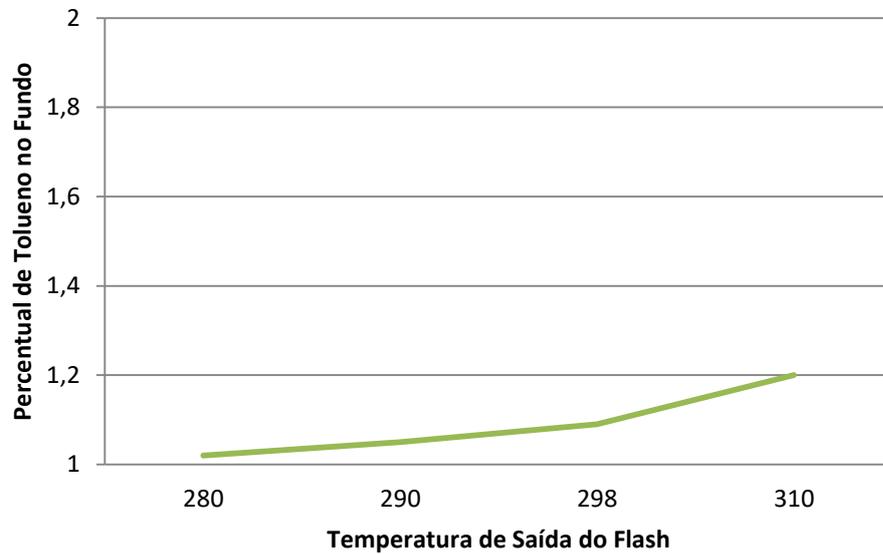
Fonte: Dados do software COCO.

Gráfico 3 - Percentual de xileno na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash



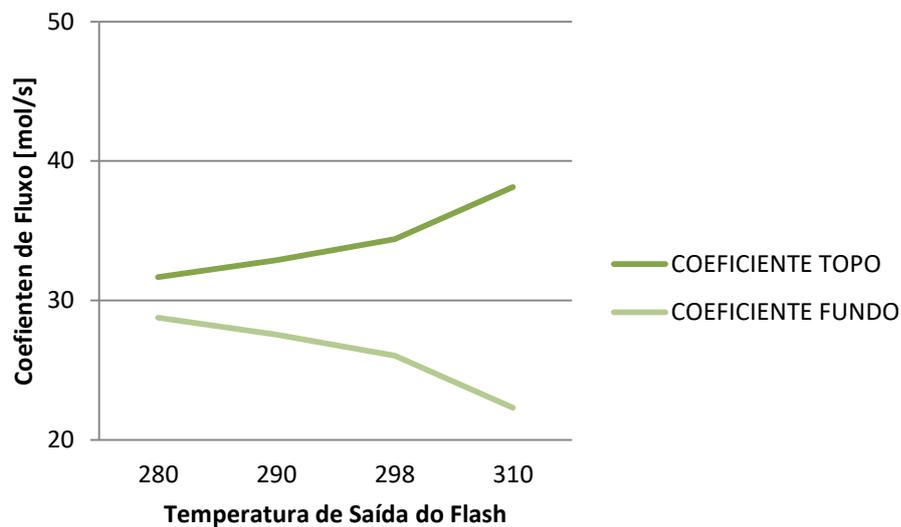
Fonte: Dados do software COCO.

Gráfico 4 - Percentual de tolueno na corrente de fundo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash



Fonte: Dados do software COCO.

Gráfico 5 - Variação do coeficiente de fluxo de fundo e topo em função da variação de temperatura de saída do destilador flash



Fonte: Dados do software COCO.

Observou-se o comportamento da mistura Benzeno, Tolueno e Xileno com o aumento da temperatura de saída do destilador flash, tendendo a diminuir a quantidade de Benzeno e Metano na corrente de saída do destilador flash e

aumentar a quantidade de Xileno e Tolueno na mesma corrente. Os coeficientes de fluxo e a corrente de destilado tendem a aumentar com o aumento de temperatura e, como esperado, o coeficiente de fundo tende a diminuir nas mesmas condições.

## 6 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.

Ficou 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.

Recomenda-se para trabalhos futuros a validação dos demais equipamentos disponíveis no software, de modo que todos os equipamentos possam ser utilizados de forma conjunta otimizando ainda mais o processo.

## 7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENGENHARIA QUÍMICA - ABEQ. **Simulação de Processos: Ferramentas, Fronteiras e Desafios**. Vol. 34. nº 1. São Paulo: 2018. Disponível em: <[https://www.abeq.org.br/sms/files/rebeq\\_Simulacao\\_final.pdf](https://www.abeq.org.br/sms/files/rebeq_Simulacao_final.pdf)>. Acesso em: 27 nov. 2018.

AMSTERCHEM. **COCO – Cape Open to Cape Open Simulation Environment**. Disponível em: <<https://www.amsterchem.com>>. Acesso em: 11 jun. 2018.

ANTUNES, M.G; ROSA, G.R. **Processos e Operações Unitárias da Indústria Química**. Rio de Janeiro: Editora Ciência Moderna Ltda, 2011. p.110.

ASSIS, A. J.; OLIVEIRA, L. C. **Free Software for Chemical Engineer's Educational Needs**. Rio de Janeiro, 2005.

ASTM Method D 2892-03a. Standard Test **Method for Distillation of Crude Petroleum**. (15-Theoretical Plate Column), West Conshohocken, PA, USA: American Society for Testing and Materials, 2003.

BELHOT, R. V.; FIGUEIREDO, R. S.; MALAVÉ, C. O. **O Uso da Simulação no Ensino de Engenharia**. In: **Congresso Brasileiro de Ensino de Engenharia**, Porto Alegre. PUCs, 2001. p. 445 - 451. Disponível em: <<http://www.pp.ufu.br/Cobenge2001/trabalhos/NTM093.pdf>>. Acesso em: 05 mai. 2018.

BRASIL, N. I. **Introdução à Engenharia Química**. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2004.

BRIGHENTI, J. R. N. **Simulação e Otimização de uma linha de manufatura em Fase de Projeto**. Disponível em <<http://www.iepg.unifei.edu.br/arnaldo/download/dissertacoes/Renato%20Brighenti.pdf>>Acesso em:15 mai. 2018.

CALDAS, J. N.; LACERDA, A. I. de; VELOSO, E.; PASCHOAL, L. C. M. **Internos de Torres: Pratos e Recheios**. Rio de Janeiro: Ed. UERJ, 2003.

CALDAS, J. N.; LACERDA, A. I. de; VELOSO, E.; PASCHOAL, L. C. M. **Internos de**

**Torres, Pratos e Recheios.** 2. ed. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2007.

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.

CHEREMISINOFF, N. P. **Handbook of Chemical Processing Equipment.** Boston: Butterworth-Heinemann, 2000. p.162.

CONSOLID. **Tecnologia em processamento de pás, pastas e granulados.** Disponível em: <<http://www.consolid.com.br/misturadores-industriais>>. Acesso em: 11 jun. 2018.

DOUGLAS, J. M. **Conceptual Design of Chemical Processes.** Singapore, McGraw-Hill Chemical Engineering Series, 1988. Disponível em: <<https://repositorioaberto.up.pt/bitstream/10216/10953/2/Texto%20integral.pdf>>. Acesso em: 20 jun. 2018. p.73.

FELDER, R. M; ROUSSEAU, R. W. **Princípios Elementares dos Processos Químicos.** São Paulo: Editora Ltc, 2005.

FILHO, P. J. F. **Introdução à Modelagem e Simulação de Sistemas com Aplicações em Arena.** 2. ed. Florianópolis: Visual Books, 2008.

FOUST, A.; WENZEL, L. A.; CLUMP, C. W.; MAUS, L.; ANDERSEN, L. B. **Princípios das Operações Unitárias.** Rio de Janeiro: LTC, 2008. p.2.

GILLILAND, E. R. **Elements of Fractional Distillation.** New York: McGraw-Hill, 1950.

GOMIDE, R. **Operações Unitárias.** São Paulo: Edição do autor, 1988.

INCROPERA, F.P; DEWITT, D.P. **Fundamentals of heat and mass transfer** 5<sup>th</sup> ed. New York, 2002. p.670.

JUNIOR, A. C. B; CRUZ, A. J. G. **Fundamentos de Balanço de Massa e Energia.**

São Paulo: Editora Ed UFSCar, 2010.

KAKAÇ, S; LIU, H. **Heat Exchangers: Selection, Rating and Thermal Design**. Editora: 3. ed. CRC Press, 2002. p.2.

KISTER, H. Z. **Distillation Design**. New York: McGraw-Hill, 1992.

LEVENSPIEL, O. **Engenharia das reações químicas**. Editora: Edgard Bluncher Ltda, 2000. p.1.

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.

LUYBEN, W. L. **Modelagem, Simulação e Controle de Processos de Engenharia Química**. Disponível em: <[https://www.cocosimulator.org/index\\_sample.html](https://www.cocosimulator.org/index_sample.html)>. Acesso em: 05 mai. 2018.

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.

MAZE. **Soluções térmicas, aquecedores industriais**. Disponível em: <<http://www.maze.ind.br/aquecedores-industriais>>. Acesso em: 05 jun. 2018.

NEDDERMAN, B. **Manual de Operações Unitárias**. São Paulo: Hemus, 2004. p. 15.

PEGDEN, C. D.; SHANNON, R. E.; SADOWSKI, R. P. **Introduction to Simulation Using SIMAN**. 2. ed. Nova York: McGraw-Hill, 1990.

SILVA, F. P. **Análise da Eficácia de Um Refrigerador Doméstico Com Condensador Modificado: Revestimento Com Meio Poroso Dissipativo**. 2014. Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal. Disponível em: <<http://www.unirv.edu.br/conteudos/fckfiles/files/Nathamy%20Freitas%20Alves.pdf>>. Acesso em: 05 mai. 2018.

STAMM, H. **Simulação Industrial: Uma Avaliação de Sua Utilização no Sudeste e Sul do Brasil**. 1998. 86 f. Dissertação (Engenharia de Produção) - Universidade Federal de Santa Catarina-UFSC, Florianópolis,1998. Disponível em: <<https://core.ac.uk/download/pdf/30358487.pdf>>. Acesso em: 27 nov. 2018.

TIVERIOS, P. G; VAN, Brunt. **Caracterização do Solvente de Destilação Extrativa e Sistema de Mistura de Metil Ciclo-Hexano e Tolueno**. Disponível em: <[http://www.chemsep.com/downloads/data/CScasebook\\_MCHT.png](http://www.chemsep.com/downloads/data/CScasebook_MCHT.png)>. Acesso em: 05 mai, 2018.