

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
ESCOLA DE ENGENHARIA DE LORENA

GIOVANNA DOS SANTOS OLIVEIRA

**Comparação, por simulação computacional, do processo de separação de  
uma mistura BTX através de coluna de destilação convencional e coluna  
DWC**

**GIOVANNA DOS SANTOS OLIVEIRA**

**Comparação, por simulação computacional, do processo de separação de  
uma mistura BTX através de coluna de destilação convencional e coluna  
DWC**

Monografia apresentada à Escola de Engenharia de Lorena – Universidade de São Paulo como requisito parcial para a conclusão do curso de graduação em Engenharia Química.

Área de concentração: Modelagem e Simulação de Processos

Orientador: Prof. Dr. Fábio Rodolfo Miguel Batista

Versão Original

Lorena – SP

2020

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema Automatizado  
da Escola de Engenharia de Lorena,  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Oliveira, Giovanna dos Santos  
Comparação, por simulação computacional, do  
processo de separação de uma mistura BTX através de  
coluna de destilação convencional e coluna DWC /  
Giovanna dos Santos Oliveira; orientador Fábio  
Rodolfo Miguel Batista. – Lorena, 2020.  
55 p.

Monografia apresentada como requisito parcial  
para a conclusão de Graduação do Curso de Engenharia  
Química – Escola de Engenharia de Lorena da  
Universidade de São Paulo. 2020

1. Dwc. 2. Coluna de parede dividida. 3. Simulação  
computacional. 4. Destilação. I. Título. II. Batista,  
Fábio Rodolfo Miguel, orient.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço primeiramente a Deus, por todas oportunidades e pessoas que colocou em meu caminho, por todo seu amor e cuidado, que me deram forças para chegar até aqui e superar as dificuldades encontradas ao longo dessa jornada.

Agradeço aos meus pais, Valter e Katia, por serem meu suporte, por serem minha motivação, por muitas vezes renunciarem às próprias vontades para me proporcionar o melhor. Obrigada por todo amor e confiança.

Agradeço aos meus demais familiares, por estarem sempre presentes e por me ajudarem de todas as formas. À minha vó Margarida, por todo cuidado comigo ao longo da vida, por todo carinho e por torcer por mim a cada prova, trabalho ou desafio. À minha vó Vera, pelos cuidados e suporte para realizar meus sonhos. À minha tia Gislene, por sempre me ouvir, e por me mostrar que sou capaz. Ao meu tio Jean, que mesmo de longe sempre se faz presente na minha vida. À minha tia Lourdes, pela preocupação e por sempre incentivar os meus estudos. À minha madrinha Hilda e à minha tia Josefa, por sempre estarem presentes e por sempre lembrarem de mim.

Agradeço ao meu namorado, Matheus, por estar ao meu lado durante toda essa jornada, por sempre me encorajar, por todos os aprendizados e por ressaltar o que há de melhor em mim.

Agradeço aos amigos que fiz nesse período, e aos antigos amigos que me acompanham até hoje. Obrigada pelas conversas, pelo companheirismo, pela amizade, por estarem sempre dispostos a ajudar e por terem feito minha caminhada mais leve e feliz.

Agradeço à Universidade de São Paulo, por fazer da minha experiência universitária a melhor possível.

Agradeço aos professores e funcionários da EEL-USP, pelos ensinamentos, pelo suporte, pela competência e pelo trabalho realizado. Em especial, agradeço ao meu orientador, Fábio, por ter aceitado me guiar neste trabalho e por toda paciência, ajuda e empenho neste período.

Agradeço, por fim, a todos que de alguma forma me ajudaram a chegar até aqui e alcançar o tão sonhado fim do curso. Muito obrigada!

## RESUMO

OLIVEIRA, G. S. **Comparação, por simulação computacional, do processo de separação de uma mistura BTX através de coluna de destilação convencional e coluna DWC.** 2020. 55 f. Trabalho de conclusão de curso – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, 2020.

A destilação é a operação de separação mais comumente utilizada industrialmente, sendo fundamental para a indústria química, farmacêutica e de petróleo. Devido a sua elevada demanda energética, é fundamental a investigação de novas configurações de colunas de destilação como, por exemplo, a coluna de parede dividida – do inglês *dividing wall column* (DWC) – especialmente devido a esta coluna exigir uma menor demanda de energia, capital e espaço físico. A simulação é muito empregada no estudo da DWC por diversos autores, para que seja possível avaliar diferentes cenários e oferecer sugestões de otimização para essa alternativa tão promissora. Portanto, o presente trabalho teve como objetivo simular o fracionamento de uma mistura de hidrocarbonetos BTX (Benzeno, Tolueno e Xileno) através de uma coluna DWC, avaliando posteriormente sua eficiência energética em comparação às colunas de destilação convencionais; para tanto, foi utilizado o *software* Aspen Plus V8.8. Inicialmente, foi projetado o sistema de destilação convencional, que no caso, por se tratar de uma mistura ternária, requer duas colunas de destilação. Para o sistema de destilação convencional foi utilizada a sequência direta para as duas colunas necessárias, sendo realizada primeiramente uma simulação pelo método *shortcut* para obter-se uma primeira estimativa das condições operacionais da coluna. Posteriormente, foi feita uma destilação rigorosa, através do modelo RadFrac, para validar as condições obtidas com a destilação *shortcut*, realizando ajustes necessários nas condições operacionais. Por fim, a simulação da coluna DWC foi conduzida através de 4 colunas RadFrac (destilação rigorosa) para compor sua configuração. Ambos os processos foram comparados quanto sua demanda energética, utilizando como base para essa comparação o consumo de vapor (em massa) por quilograma de xileno obtido em cada um dos processos. Com os resultados, foi possível concluir que considerando o mesmo número de estágios para o processo convencional de destilação e para a DWC, bem como a mesma pureza desejada para os compostos (Benzeno, Tolueno e Xileno), a DWC apresentou uma eficiência energética ligeiramente melhor do que o sistema convencional, com uma redução de 2,43% no consumo da utilidade.

Palavras-chave: DWC, coluna de parede dividida, simulação computacional, destilação.

## ABSTRACT

OLIVEIRA, G. S. **Comparison, by computational simulation, of the separation process of a BTX mixture through conventional distillation column and DWC column.** 2020. 55 pages. Course conclusion paper – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, 2020.

Distillation is the most commonly used operation industrially, being essential in chemical, pharmaceutical and petroleum industries. Due to its high energy demand, it is fundamental to investigate new configurations of distillation columns, just like the dividing wall column (DWC) system, for example, especially because this column requires lower energy demand, capital and physical space. Simulation is very used by several authors in the study of DWC columns, what makes possible to evaluate different scenarios and offer suggestions to optimize this promising alternative. Therefore, this present study aimed to simulate the fractionation process of a BTX mixture of hydrocarbons (Benzene, Toluene and Xylene) through a DWC column, evaluating its energy efficiency compared to conventional distillation columns; to achieve this purpose, the Aspen Plus V8.8 software was used. Initially, the conventional distillation system was designed, and in this case, as a ternary mixture is used, the conventional system requires two distillation columns to complete the separation. For this conventional distillation system, the direct sequence was chosen to the two columns required, and firstly a shortcut simulation was performed to obtain a first estimative of the operational conditions of the system. The shortcut simulation was followed by a rigorous simulation, that was carried out using the RadFrac column, to validate the conditions obtained with the shortcut simulation, adjusting the necessary operational conditions. Finally, the simulation of the DWC system was performed using 4 RadFrac columns (rigorous simulation) to construct its configuration. Both processes were compared by their energy demand; this comparison was made using the steam consumption (in mass) per kilogram of xylene obtained in each process. With the results, it was possible to conclude that considering the same number of stages for the conventional distillation process and for DWC, and the same purity required for each compound (Benzene, Toluene and Xylene) in both processes, the DWC column had a slightly better energy demand, with a 2,43% reduction in utility consumption.

Keywords: DWC, dividing wall column, computational simulation, distillation.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Sequências convencionais para separação de três componentes. ....	17
Figura 2 – Configurações de colunas de destilação não convencionais; (a) Coluna com pré-fracionador; (b) Coluna de Petlyuk.....	20
Figura 3 – Configuração da coluna DWC.....	21
Figura 4 – Modelos para representação de uma coluna DWC em um sistema de simulação .....	23
Figura 5 – Prato teórico de uma coluna de destilação .....	27
Figura 6 – Modelo de quatro colunas para simulação da DWC .....	34
Figura 7 – Diagrama de fluxo da simulação shortcut do sistema convencional ....	36
Figura 8 – Configuração final da coluna DSTWU-1 na simulação shortcut do sistema convencional.....	37
Figura 9 – Configuração final da coluna DSTWU-2 na simulação shortcut do sistema convencional.....	37
Figura 10 – Diagrama de fluxo da simulação rigorosa do sistema convencional ..	39
Figura 11 – Dados especificados para a análise de sensibilidade na coluna RadFrac1 .....	40
Figura 12 – Variação da fração molar de benzeno em função da variação da razão de refluxo na coluna RadFrac1 .....	41
Figura 13 – Resultado da análise Design Spec para a razão de refluxo da coluna RadFrac2 .....	42
Figura 14 – Especificação final da coluna RadFrac1 na simulação rigorosa do sistema convencional.....	42
Figura 15 – Especificação final da coluna RadFrac2 na simulação rigorosa do sistema convencional.....	43
Figura 16 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna RadFrac1 .....	44
Figura 17 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna RadFrac2.....	45
Figura 18 – Diagrama de fluxo da simulação da coluna DWC .....	47
Figura 19 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna principal .....	49
Figura 20 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna pré-fracionadora .....	49

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades físicas dos componentes da mistura ternária (benzeno, tolueno e xileno).....	16
Tabela 2 – Características das condições da alimentação .....	32
Tabela 3 – Informações iniciais para a simulação da DWC .....	35
Tabela 4 – Resultados obtidos para as colunas DSTWU-1 e DSTWU-2 na simulação shortcut .....	38
Tabela 5 – Resultados obtidos para as correntes B, T e X na simulação shortcut	38
Tabela 6 – Resultados obtidos para as correntes B, T e X na simulação rigorosa do sistema convencional .....	44
Tabela 7 – Resultados obtidos para as correntes B, T e X na simulação da coluna DWC .....	48
Tabela 8 – Tabela de comparação entre o sistema de destilação convencional e o sistema DWC .....	51



## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

BTX	Benzeno, Tolueno e Xileno
DWC	<i>Dividing Wall Column</i> (Coluna de Parede Dividida)
FCC	<i>Fluid Catalytic Cracker</i> (Craqueamento Catalítico de Fluidos)
FUGK	Fenske, Underwood, Gilliland e Kirkbride
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
MESH	Massa, Equilíbrio, Somatório e Entalpia
NRTL	Non-random two liquids (Método termodinâmico)
THF	Tetrahidrofurano

## LISTA DE SÍMBOLOS

$N_{\text{mín}}$	Número mínimo de estágios
$R_{\text{mín}}$	Número de refluxo mínimo
$x_{\text{HB}}$	Fração molar do componente chave pesado no fundo
$x_{\text{HD}}$	Fração molar do componente chave pesado no destilado
$x_{\text{LB}}$	Fração molar do componente chave leve no fundo
$x_{\text{LD}}$	Fração molar do componente chave leve no destilado
$\alpha_{\text{L,H}}$	Volatilidade relativa média do componente chave leve em relação ao chave pesado
$h_{\text{fg}}$	Entalpia de vaporização da água

## SUMÁRIO

<b>1. INTRODUÇÃO</b>	<b>11</b>
1.1. Objetivos	14
1.1.1. Objetivo Geral	14
1.1.2. Objetivos Específicos	14
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>15</b>
2.1. A mistura ternária de Benzeno, Tolueno e Xileno	15
2.2. Destilação	16
2.2.1. Destilação convencional	17
2.2.2. Colunas de destilação não convencionais	17
2.3. Coluna de parede dividida	20
2.4. Modelos de representação da DWC em simulação	22
2.5. Métodos de simulação para destilação	23
2.5.1. Método <i>shortcut</i>	23
2.5.2. Método rigoroso	26
2.6. Aplicações e referências pertinentes	28
<b>3. METODOLOGIA</b>	<b>32</b>
3.1. Simulação do sistema de destilação convencional	32
3.2. Simulação da DWC	34
<b>4. RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>36</b>
4.1. Simulação do sistema de destilação convencional	36
4.1.1. Simulação <i>shortcut</i> do sistema convencional	36
4.1.2. Simulação rigorosa do sistema convencional	39
4.2. Simulação da DWC	46
4.3. Comparação entre a coluna convencional e a coluna DWC	50
<b>5. CONCLUSÃO</b>	<b>52</b>
<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>53</b>

## 1. INTRODUÇÃO

A destilação é um método de separação empregado em processos químicos há mais de 150 anos (DAUM, 1959), e é ainda hoje o mais comumente utilizado na indústria. Esse processo de separação é muito abrangente, pois é capaz de separar componentes de uma mistura homogênea de líquidos com base no equilíbrio líquido-vapor entre eles, ao explorar a diferença de volatilidade entre esses componentes. Portanto, é um processo empregado para purificar e fracionar componentes, ou ainda para atingir concentrações desejadas em uma determinada mistura de interesse. Devido à sua utilidade e por ser um processo de separação razoavelmente simples e de baixo risco (ORNL, 2005), a destilação é fundamental na indústria, principalmente na indústria química, farmacêutica e de petróleo (AURANGZEB; JANA, 2019).

Apesar de suas amplas aplicações, aos poucos a destilação se tornou um ponto preocupante no processo químico como um todo por conta de sua alta demanda energética. O rápido crescimento tecnológico e industrial fez com que a demanda energética global crescesse consideravelmente ao longo dos anos (AURANGZEB; JANA, 2016), o que causa não só um impacto econômico mas também um grande impacto ambiental (XIE et al., 2018) e, por isso, a indústria passou a ter a necessidade de explorar estratégias para poupar recursos, poupar energia e reduzir desperdícios.

Na indústria química e de petróleo, as operações de destilação podem representar até 53% da energia de separação total utilizada (ZHOU; KOOIJMAN; TAYLOR, 2019), além disso, outro dado muito relevante é a estimativa de que o processo de destilação representa cerca de 3% do consumo de energia mundial, uma quantidade bastante significativa (KHALIFA; EMTIR, 2009). Diante disso, por ser uma das operações que requer mais energia, a destilação tornou-se um dos principais desafios de sustentabilidade para a indústria. Levando em conta a problemática por trás da crescente demanda de energia, nas últimas décadas pesquisadores estão em busca de alternativas que reduzam a energia utilizada nesse processo de separação, a fim de trazer benefícios não só para o setor químico, como também para o meio ambiente.

Para suprir as necessidades da indústria, considerando os aspectos energéticos, ambientais, sustentáveis e econômicos, novas configurações de

colunas de destilação vêm sendo propostas nas últimas duas décadas (SILVA FILHO, 2018). Segundo Silva Filho (2018), as inovações no campo de destilação visam reduzir os custos de produção e operacionais, reduzir o consumo de energia e aumentar a eficiência do processo. Diversas configurações inovadoras para colunas de destilação podem ser citadas, mas dentre elas, a coluna de parede dividida – do inglês *dividing wall column* (DWC) – tem grande destaque como alternativa às colunas de destilação convencionais, por ser uma tecnologia muito promissora, pois, se comparada à configuração tradicional de colunas de destilação (em série ou em paralelo), a DWC requer muito menos energia, capital e espaço físico (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010).

A coluna de parede dividida (DWC) é considerada um progresso na área de destilação. Apresenta-se como uma coluna totalmente acoplada termicamente, composta por um único casco (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010), e é altamente eficiente para a separação de misturas de três ou mais componentes, apesar de a maioria dos estudos sobre ela ser desenvolvido apenas para misturas ternárias. A DWC, além de ser apropriada para a separação de mistura de hidrocarbonetos (aromáticos ou alifáticos), pode ser utilizada também para destilação extrativa, reativa e separação de misturas azeotrópicas (SILVA FILHO, 2018). Por ter uma parte da coluna com parede dividida, a DWC requer menores vazões internas para sua operação, e conseqüentemente necessita de menos energia para realizar a separação (SILVA FILHO, 2018), o que sugere uma eficiência energética mais alta e grande versatilidade para essa coluna não convencional.

O rápido desenvolvimento tecnológico que a indústria enfrenta nos dias atuais fez com que a simulação computacional se tornasse uma ótima opção de ferramenta para analisar o funcionamento de uma planta ou processo. Por conta da alta complexidade dos sistemas em uma indústria, e também devido ao perigo inerente aos processos caso um acidente venha a ocorrer, os simuladores são bastante indicados para um controle mais rigoroso, uma padronização de operação e conformidade com as práticas de segurança, pois com uma simulação é possível avaliar um processo de forma computacional antes de colocá-lo em prática.

Existem muitas definições para “simulação”, dentre elas, Pegden, Shannon e Sadowski (1990) dizem que a 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”. Desenvolver um modelo pode não só facilitar a visualização de um problema como um todo, mas também produzir um histórico do comportamento do sistema ao longo do tempo, assim como estatísticas deste comportamento para conclusões pertinentes a ele (CORREIA, 2019), além de permitir estudos para melhoria do processo, análises de custo-benefício, análise de sensibilidade das variáveis envolvidas, entre outras diversas possibilidades (CORREIA, 2019). A modelagem, a simulação e o controle são aspectos muito importantes na engenharia, e são aplicáveis como um primeiro passo ao estudar a DWC, por se tratar de uma coluna mais complexa que a convencional, já que possui mais graus de liberdade ao ser conduzida em uma simulação (NGUYEN et al., 2016), o que torna também o seu controle mais difícil de ser realizado.

Mesmo que o método de modelagem e simulação do processo de separação por coluna de parede dividida seja relevante e uma opção bastante mencionada atualmente, não é algo trivial de ser feito, pois os *softwares* comerciais não apresentam nenhum modelo padrão para a coluna DWC em seus pacotes de simulação (ZHOU; KOOIJMAN; TAYLOR, 2019). Como consequência, por não haver um modelo mais sólido e direto, a aceitação da DWC foi um pouco mais lenta do que o esperado (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010).

Portanto, diante do contexto apresentado, encontra-se na coluna de parede dividida uma alternativa favorável, que se encaixa na ideia de produção moderna e sustentável tão discutida nos dias de hoje. Essa coluna complexa e não convencional tem recebido bastante atenção nos últimos anos – apesar de haver ainda pouco conteúdo científico em âmbito nacional –, e ainda requer mais estudo e constatações sólidas sobre o seu funcionamento e seus benefícios. Com os inúmeros desafios que a indústria vem enfrentando para se manter em meio a tanta competitividade, buscando sempre soluções inovadoras e sustentáveis, processos que tenham menores impactos ao meio ambiente são fundamentais para agregar valor.

Tendo em vista que uma mistura ternária ou quaternária em um processo convencional precisaria, tipicamente, de uma série com duas ou mais colunas de destilação individuais (com alta demanda energética) para ter seus componentes separados, avaliar a viabilidade de uma coluna única capaz de realizar a mesma função com uma maior eficiência energética torna-se algo muito pertinente à

situação atual da indústria, já que a DWC representa uma maneira notável de se obter produtos com alta pureza, podendo reduzir não só o consumo de energia, mas também o custo de operação e o espaço necessário para a coluna, abrangendo aspectos ambientais e econômicos.

## **1.1. Objetivos**

### **1.1.1. Objetivo Geral**

A presente monografia teve como principal objetivo simular o fracionamento de uma mistura de hidrocarbonetos BTX (Benzeno, Tolueno e Xileno) através de um sistema não convencional de destilação (coluna de parede dividida), avaliando posteriormente sua eficiência energética em comparação às colunas de destilação convencionais sequenciadas.

### **1.1.2. Objetivos Específicos**

Para alcançar o objetivo geral do trabalho, foram definidos os seguintes objetivos específicos:

- Construir um modelo do processo de separação por coluna de parede dividida (DWC) e um modelo do processo de separação por destilação convencional, com condições operacionais iniciais, empregando-se como ferramenta o *software* Aspen Plus V8.8;
- Simular o processo construído para obtenção dos dados de balanço de massa e energia do processo;
- Utilizar análises de sensibilidade para observar a influência das variáveis no processo como um todo;
- Determinar especificações desejadas para avaliar quais condições no processo retornam em alta pureza dos componentes no fracionamento;
- Avaliar a eficiência energética, a pureza obtida nos componentes fracionados e outros indicadores do processo relevantes para a comparação da DWC com as colunas de destilação convencional.

## **2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

### **2.1. A mistura ternária de Benzeno, Tolueno e Xileno**

Dentre diversos compostos aromáticos, o benzeno, o tolueno e o xileno recebem grande atenção. Estes três hidrocarbonetos são componentes da gasolina, e muitas vezes são encontrados na água ou no ar, por contaminação através do petróleo e seus derivados (FENSTERSEIFER, 2010). A contaminação pode ocorrer por derramamento ou vazamento de petróleo no meio ambiente, no caso da água (FENSTERSEIFER, 2010), ou ainda por resíduos da combustão de veículos, exaustão de aeronaves, entre outros meios, no caso do ar (PIVELI, 2019). São componentes tóxicos, que podem provocar problemas à saúde humana, e por isso sua presença na água gera grande preocupação.

No quesito industrial são compostos aromáticos muito relevantes (KISS; REWAGAD, 2011), pois quando puros são usados na síntese de outros produtos químicos de maior valor agregado. O benzeno por exemplo, é utilizado na síntese de estireno, fenol, anilina, anidrido maleico, entre outros compostos (FENSTERSEIFER, 2010). Já o tolueno pode ser empregado como solvente para resinas sintéticas, adesivos e revestimentos de superfície (FENSTERSEIFER, 2010). O xileno, por sua vez, possui três formas isoméricas, e pode ser utilizado na fabricação de defensivos agrícolas (FENSTERSEIFER, 2010).

No entanto, na maioria das vezes, esses três hidrocarbonetos em questão não são encontrados puros, mas sim na forma de uma mistura. Uma mistura de benzeno, tolueno e xileno pode ser formada no processamento de derivados de petróleo, ou ainda na produção de tolueno e xileno, onde o benzeno pode ser emitido contaminando o hidrocarboneto de interesse (PIVELI, 2019). Se os componentes benzeno, tolueno e xileno encontram-se impuros, agregados em uma mistura, eles não possuem o mesmo valor que teriam se estivessem na forma pura, onde poderiam ser usados em diversas aplicações.

Por isso, em muitos casos, é interessante realizar a separação dos componentes de uma mistura contendo benzeno, tolueno e xileno. A mistura ternária de BTX pode ser separada por destilação, e por sua relevância, foi a mistura abordada nesse projeto. Na Tabela 1, pode-se observar algumas propriedades físicas do benzeno, do tolueno e do p-xileno, para conhecimento.



Tabela 1 – Propriedades físicas dos componentes da mistura ternária (benzeno, tolueno e xileno).

<b>Propriedade Física</b>	<b>Benzeno</b>	<b>Tolueno</b>	<b>P-Xileno</b>
<b>Fórmula Molecular</b>	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>
<b>Massa Molar (g/mol)</b>	78,11	92,14	106,17
<b>Densidade (kg/m<sup>3</sup>)</b>	878,6	866,9	860,0
<b>Viscosidade (cP, a 20 °C)</b>	0,652	0,590	0,620
<b>Temperatura de Fusão (°C)</b>	5,53	-94,97	13,26
<b>Temperatura de Ebulição (°C)</b>	80,09	110,63	138,36

Fonte: Kiss e Rewagad (2011).

## 2.2. Destilação

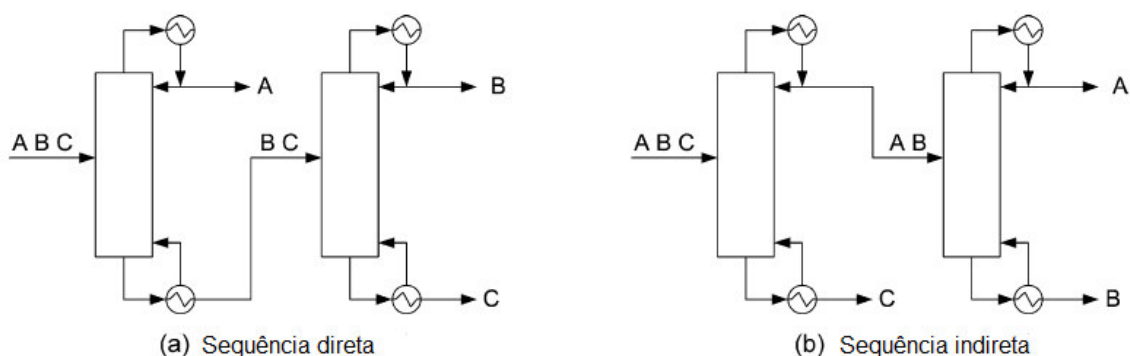
A destilação, como mencionado anteriormente, é uma tecnologia de separação de componentes de uma mistura que se baseia no equilíbrio líquido-vapor dessas misturas. Por meio da aplicação e remoção de calor na mistura, é possível explorar a diferença de volatilidade existente entre os componentes, diferença essa que está relacionada com seus pontos de ebulição.

Essa operação é sem dúvidas a mais utilizada na separação de componentes de misturas que podem ser vaporizadas (ORNELAS, 2005), e também uma das mais comuns. O funcionamento de uma coluna de destilação é relativamente simples: nessa operação, a alimentação entra no equipamento e é aquecida até seu ponto de ebulição, formando uma fase gasosa e uma fase líquida; a fase gasosa e a fase líquida têm composições diferentes, gerando transferência de massa de uma fase para outra, até atingir o limite de transferência de massa quando o equilíbrio entre as fases é alcançado (CHAGURI, 2015). O princípio básico de funcionamento é o mesmo em qualquer tipo de destilação, seja ela a destilação convencional ou destilações complexas (SILVA FILHO, 2018). Tipicamente, por conta de suas várias evaporações e ebulições, e por ter calor sendo fornecido na base e retirado no topo, essa operação tem um alto consumo de energia (SILVA FILHO, 2018). Devido a esse fator, novas tecnologias de destilação vêm sendo analisadas para aumentar a eficiência desse processo, o que será discutido adiante.

### 2.2.1. Destilação convencional

Considerando o fracionamento por destilação de uma mistura ternária em componentes puros, temos tradicionalmente duas opções para realizar essa separação de forma convencional, utilizando duas colunas de destilação: a sequência direta e a sequência indireta (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010). Essas configurações estão apresentadas na Figura 1.

Figura 1 – Sequências convencionais para separação de três componentes.



Fonte: Dejanovic, Matijalevic e Olujić (2010).

A sequência direta representada na Figura 1a é a mais amplamente utilizada. Já a sequência indireta, na Figura 1b, é menos utilizada pela dificuldade de retirada das impurezas dos componentes mais pesados (PINZÓN, 2014).

### 2.2.2. Colunas de destilação não convencionais

Dentre as operações de separação de componentes, existem diversas opções com menor intensidade energética se comparadas à destilação. Em alguns casos, é possível substituir a destilação por uma outra tecnologia, como por exemplo membranas, extração, adsorção e absorção, ou ainda sistemas híbridos (ORNŁ, 2005). Porém, na maioria dos casos, substituir a destilação não é uma boa opção, e para reduzir o consumo energético do processo é necessário buscar adaptações para a destilação convencional.

Uma das alternativas para contornar o alto consumo energético da destilação convencional consiste em mudar a configuração operacional das colunas de

destilação (GOUVÊA, 1999). Diversas são as propostas de configuração que podemos citar. Gouvêa (1999), por exemplo, sugere modificações nas colunas convencionais de forma a obter um maior contato entre as fases líquida e vapor, buscando assim um aumento na eficiência do processo de destilação. As duas configurações na pesquisa de Gouvêa (1999) são a Para-destilação e a Meta-destilação. A Para-destilação se baseia em dividir a fase vapor em duas partes iguais, de forma que percorram paralelamente a coluna, mantendo contato em estágios alternados com uma única corrente de líquido descendente. Já a Meta-destilação se baseia em dividir o fluxo de líquido em duas correntes que entram em contato com uma fase vapor ascendente.

Silva Filho (2018) cita algumas opções de destilação não convencional em sua tese, sendo a escolhida para seus experimentos a destilação por filme descendente unitubular (um tubo de destilação) e multitubular para separação de compostos aromáticos (uma mistura BTX); ele faz um estudo experimental, realizando a destilação de filme descendente à pressão atmosférica e assistida por termofissão. O autor verificou a partir de seus experimentos que para obter um teor de 68,24% de Tolueno no destilado, uma coluna convencional tem praticamente o dobro do consumo energético utilizado na unidade de destilação por filme descendente unitubular. Ele propôs ainda uma unidade de separação multitubular, com 9 tubos de destilação, a fim de aumentar a produtividade da unitubular, e nesse segundo caso o consumo energético da unidade multitubular também foi menor do que o consumo energético de uma destilação convencional, para se obter 66,72% de Tolueno. Diante dos resultados obtidos, Silva Filho (2018) pôde confirmar que o processo não convencional avaliado em sua pesquisa é mais eficiente do que uma destilação convencional – em relação ao ponto energético – nos casos em que se quer produzir uma mesma recuperação de Tolueno no destilado.

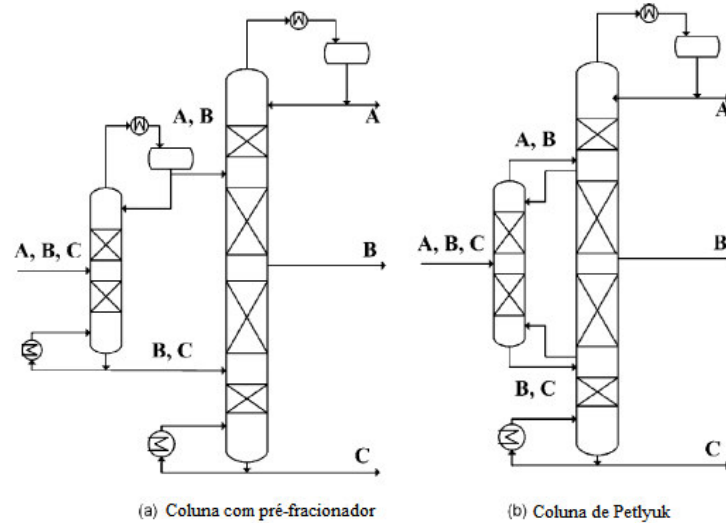
Pinzón (2014) cita em seu trabalho as configurações complexas mais utilizadas para o fracionamento de uma mistura com três ou mais componentes: coluna com saída de vapor lateral, coluna com produtos laterais, coluna com pré-fracionador, coluna termicamente acoplada e coluna com parede dividida. Na coluna com saída de vapor lateral, a coluna principal tem uma saída lateral de vapor; esse vapor é direcionado para uma coluna de esgotamento ou coluna de retificação, que é ligada termicamente à coluna principal, e assim, essa coluna ligada termicamente à coluna principal fornece ao vapor a carga térmica necessária

para efetivar a separação dos componentes (PINZÓN, 2014). O segundo tipo mencionado, a coluna com produtos laterais, é uma coluna com uma saída acima ou abaixo do estágio de alimentação, favorecendo a separação do componente intermediário (PINZÓN, 2014). Já a coluna com pré-fracionador é composta por um pré-fracionador e uma coluna principal, onde o pré-fracionador realiza a separação dos componentes leve e pesado, com o componente intermediário misturado entre eles, e a coluna principal realiza o segundo fracionamento, obtendo assim uma corrente de topo, uma corrente lateral (do componente intermediário) e uma corrente de fundo (PINZÓN, 2014). Por fim, temos a coluna termicamente acoplada; ela se parece com a coluna com pré-fracionador, porém, no pré-fracionador são eliminados os trocadores intermediários e colocados refluxos em seu lugar, formando assim uma integração térmica (PINZÓN, 2014).

Esse modelo, onde são removidos o condensador e o refeedor da coluna de pré-fracionamento e adicionadas correntes no seu lugar, foi introduzido por Petlyuk, Platonov e Slavinskii (1965), e é conhecido até hoje como “coluna de Petlyuk” (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010). Com o condensador e o refeedor removidos, a coluna de pré-fracionamento é agora conectada diretamente com a coluna principal, e isso equivale a um acoplamento térmico do pré-fracionador com a coluna principal, sendo que o condensador e o refeedor necessários são agora anexados apenas na coluna principal (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010). A Figura 2 mostra mais claramente a substituição feita.

A última configuração mencionada por Pinzón (2014) é a escolhida por ele para conduzir sua pesquisa, e é também o foco principal da pesquisa desenvolvida nesta presente monografia. A coluna de parede dividida, ou DWC, é também uma coluna de destilação termicamente acoplada, assim como a coluna de Petlyuk, e muitas vezes elas podem ser estudadas até mesmo de maneira análoga, pois se duas colunas de Petlyuk forem integradas em um mesmo equipamento, obtém-se assim a configuração proposta pela DWC (SILVA FILHO, 2018).

Figura 2 – Configurações de colunas de destilação não convencionais; (a) Coluna com pré-fracionador; (b) Coluna de Petlyuk



Fonte: Dejanovic, Matijalevic e Olujic (2010).

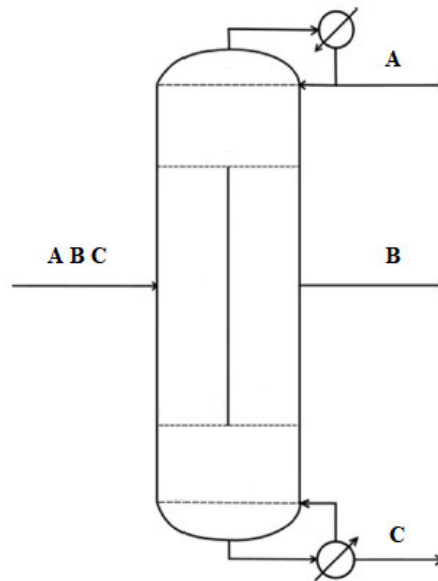
### 2.3. Coluna de parede dividida

Apesar de a coluna de Petlyuk já ser um grande avanço, novas tecnologias e configurações continuaram a ser estudadas. Após muitas pesquisas de diversos autores, por volta de meados dos anos 80, a empresa BASF SE, em Ludwigshafen, implementou um modelo de coluna ainda mais efetivo: uma coluna única (de apenas um casco), com uma parede divisória que separa a seção intermediária fisicamente em duas partes, sendo a primeira parte a que recebe a alimentação e funciona como um pré-fracionador, e a segunda parte ao lado a seção que realiza a separação do componente intermediário (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010). A Figura 3 mostra um diagrama simplificado de uma coluna DWC.

É possível observar que a configuração da DWC sugere a existência de duas colunas em um casco, o que possibilita assim a separação do componente intermediário. Seu funcionamento ocorre da seguinte forma: a alimentação é introduzida na coluna à esquerda da parede, que funciona como coluna de pré-fracionamento; o componente mais leve flui para cima (destilado) e o componente mais pesado vai para baixo (fundo). O componente intermediário inicialmente é arrastado para cima e para baixo com as duas correntes, misturado com o componente leve acima, e com o componente pesado abaixo. A concentração do componente intermediário que vai para cima é separada na parte superior, e da

mesma forma, a quantidade do intermediário que vai para baixo é separada na parte inferior. As quantidades do intermediário separadas fluem para o outro lado da parede dividida (lado direito), onde o composto intermediário é recuperado por uma corrente lateral (KISS; REWAGAD, 2011).

Figura 3 – Configuração da coluna DWC



Fonte: Zhou, Koojiman e Taylor (2019).

Hoje, muitos autores citam a DWC como uma alternativa consolidada, que pode sim trazer muitos benefícios, como a redução do capital investido por conta da configuração integrada, elevada pureza para todos os produtos, menores custos para operação e manutenção, maior eficiência energética e ainda economia de espaço (SILVA FILHO, 2018). Porém, ainda há muito que pode ser feito nesse tema. Os autores mais atuais realizam pesquisas para comparar resultados com referências publicadas anteriormente; investigam também novas configurações, como por exemplo a inserção de mais de uma parede divisória em paralelo; e ainda buscam condições de operação com a DWC que possibilitem a maximização dos benefícios dessa coluna, a fim de obter três ou mais produtos com alta pureza (DEJANOVIC; MATIJALEVIC; OLUJIC, 2010).

## 2.4. Modelos de representação da DWC em simulação

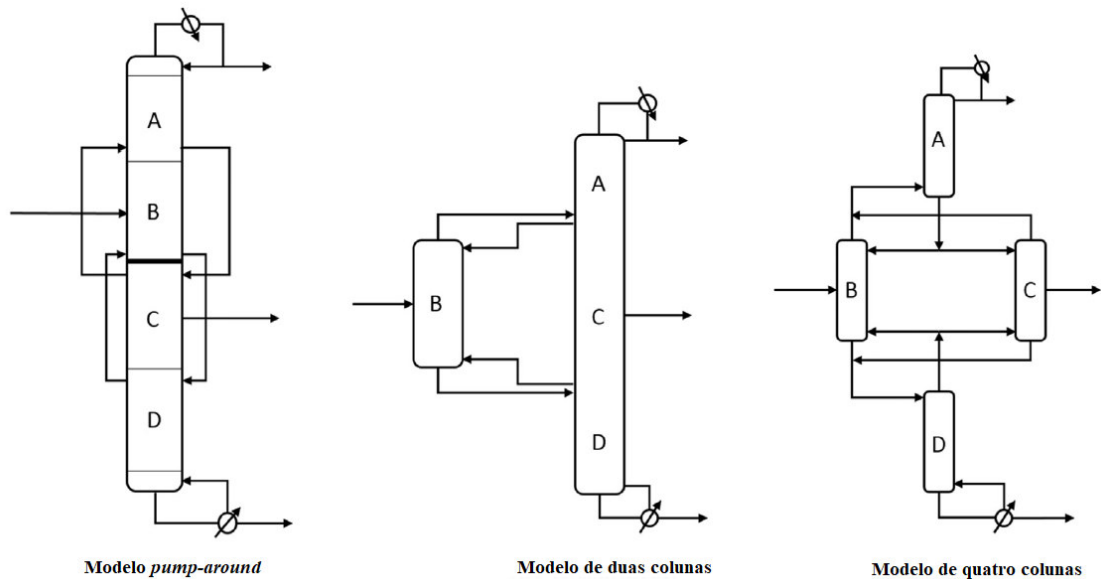
Conforme já mencionado anteriormente, o método de modelagem e simulação é muito empregado no estudo da DWC por diversos autores, para que seja possível avaliar diferentes cenários e oferecer sugestões de otimização para esse processo tão favorável.

Dentre as opções de colunas padrão oferecidas pelos *softwares* comerciais, Aspen Plus V8.8 incluso, não há uma coluna que se aproxime à configuração de uma DWC; portanto, para realizar a simulação de uma DWC é necessário fazer arranjos com colunas convencionais, criando um modelo de representação que se aproxime do real.

Existem alguns modelos de representação para a DWC em uma simulação, sendo os três mais comuns: o modelo *pump-around*, o modelo de duas colunas e o modelo de quatro colunas (ZHOU; KOOIJMAN; TAYLOR, 2019), que podem ser vistos na Figura 4.

O modelo *pump-around* consiste em seções da DWC alinhadas verticalmente, onde ocorre um redirecionamento das correntes de um local para outro; esse modelo, representado à esquerda na Figura 4, não é muito utilizado devido ao fato de que ele pode causar problemas de convergência (BECKER et al., 2001). Já o modelo de duas colunas, ao centro da Figura 4, se assemelha à coluna de Petlyuk e é utilizado por alguns autores, mas necessita que o autor seja bem assertivo nos valores iniciais das correntes interligadas para garantir sua convergência (ZHOU; KOOIJMAN; TAYLOR, 2019). Por último, à direita da Figura 4, está o modelo de quatro colunas, utilizado também por várias referências; esse modelo é mais flexível do que os outros e representa melhor a situação real (ZHOU; KOOIJMAN; TAYLOR, 2019).

Figura 4 – Modelos para representação de uma coluna DWC em um sistema de simulação



Fonte: Zhou, Koojiman e Taylor (2019).

## 2.5. Métodos de simulação para destilação

Uma destilação multicomponente pode ser conduzida por dois diferentes métodos nos simuladores: a modelagem por métodos rigorosos e a modelagem por métodos aproximados. Para compreender melhor a simulação de um sistema de destilação, é interessante conhecer esses métodos e em quais equações eles se baseiam.

### 2.5.1. Método *shortcut*

O método *shortcut* é um método aproximado de simulação, utilizado para obter-se uma primeira aproximação do comportamento de uma coluna de destilação, geralmente quando não são conhecidas informações iniciais como o número de pratos ou a razão de refluxo mínima, por exemplo.

Esse método baseia-se em um conjunto de equações conhecido como Fenske, Underwood, Gilliland e Kirkbride (FUGK). Cada uma das equações é usada para estimar uma informação da coluna de destilação inicial que se deseja modelar. As equações serão discutidas a seguir, ressaltando que as equações aqui



apresentadas foram obtidas na literatura, com base no que foi apresentado por Azevedo e Alves (2009) e por Pinzón (2014).

A equação de Fenske é a equação utilizada para estimar o número de estágios necessário para que uma determinada separação seja alcançada, chamado de  $N_{\min}$ . Para utilizar essa equação é necessário especificar os componentes chave, leve (L) e pesado (H), especificar também as composições dos componentes chave no destilado (D) e no fundo (B), e a volatilidade relativa entre os componentes (sendo a referência para o cálculo o componente chave pesado e a volatilidade relativa considerada constante ao longo da coluna). Pode-se observar então, na Equação (1), como é feito o cálculo do número mínimo de estágios  $N_{\min}$ .

$$N_{\min} = \frac{\ln \left[ \left( \frac{x_{LD}}{x_{HD}} \right) \times \left( \frac{x_{HB}}{x_{LB}} \right) \right]}{\ln \alpha_{L,H}} \quad (1)$$

Como considera-se a volatilidade relativa do componente chave leve em relação ao componente chave pesado constante, é necessário calcular uma volatilidade relativa média entre eles ao longo da coluna, sendo ela calculada como uma média geométrica das volatilidades relativas entre os componentes chave leve e chave pesado no primeiro e último estágio da coluna (PINZÓN, 2014), de acordo com a Equação (2).

$$\alpha_{L,H} = [(\alpha_{L,H})_D \times (\alpha_{L,H})_B]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

Já na equação de Underwood, obtém-se o refluxo mínimo. O refluxo mínimo corresponde ao caso de um número de estágios de equilíbrio infinito (PINZÓN, 2014), uma condição impossível de ser realizada na prática, usada apenas como uma referência para determinação de um refluxo possível para operar a coluna. É necessário resolver duas equações simultaneamente para esse cálculo, conforme a Equação (3) e a Equação (4).

$$\sum \left( \frac{\alpha_{i,H} \times x_{F,i}}{\alpha_{i,H} - \theta} \right) = 1 - q \quad (3)$$

$$\sum \left( \frac{\alpha_{i,H} \times x_{D,i}}{\alpha_{i,H} - \theta} \right) = R_{\min} + 1 \quad (4)$$

Nas Equações (3) e (4) o somatório é referente a todos os componentes da mistura, e não apenas aos componentes chave leve e chave pesado. Portanto,  $\alpha_{i,H}$  representa a volatilidade relativa média do componente  $i$  em relação ao componente chave pesado. O termo  $x_{F,i}$  representa a composição inicial do componente  $i$  (na alimentação), e o termo  $q$  é um valor que pode ser encontrado com base nas condições térmicas da alimentação (quando a alimentação é um líquido saturado, este termo vale 1). A Equação (3) é utilizada para calcular o termo  $\theta$ , pois calculando as volatilidades relativas médias de todos os  $C$  componentes da mistura, obtém-se com a Equação (3) uma equação de grau  $C$ , e das  $C$  raízes obtidas com ela,  $\theta$  é a raiz que é obedecida a relação:  $1 < \theta < \alpha_{L,H}$  (AZEVEDO; ALVES, 2009). Então, ao resolver a Equação (3), é possível resolver a Equação (4) para o cálculo de  $R_{\min}$ .

A equação de Gilliland é a utilizada para estimar o número de estágios teórico ( $N$ ). Esta equação está representada na Equação (5), sendo o valor de  $X$  utilizado na Equação (5) representado pela Equação (6).

$$\frac{N - N_{\min}}{N + 1} = 1 - \exp \left[ \left( \frac{1 + 54,4 \times X}{11 + 117,2 \times X} \right) \left( \frac{X - 1}{X^{0,5}} \right) \right] \quad (5)$$

$$X = \frac{R - R_{\min}}{R + 1} \quad (6)$$

Por fim, a equação de Kirkbride fornece a localização ótima do prato de alimentação, ou seja, a posição da alimentação. Essa equação supõe uma distribuição ideal dos componentes ao longo da coluna (PINZÓN, 2014), e pode ser representada pela Equação (7), sendo  $B$  a vazão molar do produto de fundo,  $D$  a vazão molar do destilado e  $F$  representando a alimentação.

$$\frac{N_{\text{retif}}}{N_{\text{esgot}}} = \left[ \left( \frac{x_{F,H}}{x_{F,L}} \right) \left( \frac{x_{B,L}}{x_{D,H}} \right)^2 \left( \frac{B}{D} \right) \right]^{0,206} \quad (7)$$

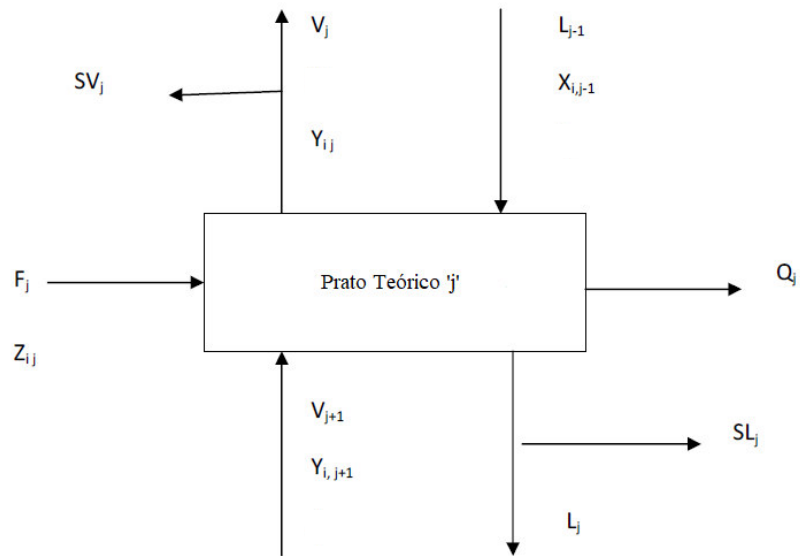
### 2.5.2. Método rigoroso

O segundo método utilizado em simuladores para a modelagem de destilação é o método rigoroso. A simulação por método rigoroso é mais complexa, e é indicada para o projeto final de um equipamento, pois fornece dados com maior exatidão sobre o processo (PINZÓN, 2014). O método rigoroso é baseado nas equações de balanço de massa, equações de equilíbrio líquido-vapor, somatório das frações molares e balanços de entalpia, sendo essas equações aplicadas em cada estágio da coluna, o que faz com que esse método seja conhecido também como método prato a prato (CORREIA; CAPPER; MENEZES, 2018). Essas equações são conhecidas como MESH, remetendo às palavras Massa, Equilíbrio, Somatório e Entalpia (CORREIA; CAPPER; MENEZES, 2018).

O método rigoroso pode ser aplicado para validar informações obtidas no método *shortcut*, dessa forma, muitas vezes os projetos utilizam os dois métodos para sua simulação. Esse método já é incluído dentro dos cálculos dos simuladores de processos, mas, para que seja possível ter uma noção de como os cálculos são feitos, serão apresentadas as equações genéricas a seguir. Primeiramente, deve-se considerar um prato genérico na coluna. O prato genérico é um prato teórico, o qual será chamado de prato teórico 'j' e está representado na Figura 5.

Na Figura 5, o termo j se refere à posição do prato (uma posição qualquer), e o termo i se refere a um componente i qualquer da mistura a ser separada. Na solução das equações MESH deve-se antes de tudo fixar as variáveis específicas, e depois, assumir valores para as variáveis de iteração (CORREIA; CAPPER; MENEZES, 2018).

Figura 5 – Prato teórico de uma coluna de destilação



Fonte: Correia, Capper e Menezes (2018).

As equações estão representadas a seguir, conforme apresentadas por Correia, Capper e Menezes (2018):

- Equações do Balanço de Massa (M)

$$L_{j-1} + V_{j+1} + F_j - L_j - SL_j - V_j - SV_j = 0 \quad (8)$$

- Equações de Equilíbrio (E)

$$Y_{ij} - K_{ij} \cdot X_{ij} = 0 \quad (9)$$

- Equações de Soma (S)

$$\sum_{i=1}^C (X_{ij} - Y_{ij}) = 0 \quad (10)$$

- Equações de Balanço de Entalpias (H)

$$L_{j-1} \cdot H_{j-1} + V_{j+1} \cdot H_{j+1} + F_j \cdot H_{Fj} - (L_j + SL_j) \cdot H_j - (V_j + SV_j) \cdot H_{Vj} - Q_j = 0 \quad (11)$$

Algumas considerações devem ser feitas. Na Equação (8), o termo  $j$  vai de 1 até  $N$ , sendo  $N$  o número de estágios da coluna. Na Equação (9), o termo  $j$  vai de 1 até  $N$  assim como na Equação (8), e considerando uma mistura com  $C$  componentes, o termo  $i$  vai de 1 até  $C$ ; além disso, o termo  $K_{ij}$  representa as razões de equilíbrio, que podem ser calculadas a partir de um modelo de equilíbrio líquido-vapor. A Equação (10) leva em conta o fato de que a soma das frações molares dos componentes em uma fase deve ser sempre igual a 1. E por fim, a Equação (11) é feita assumindo uma transferência de calor ideal.

Com as equações do método rigoroso apresentadas de uma forma simplificada, é possível ter uma ideia da base utilizada pelo simulador para solucionar o modelo, ressaltando o fato de que esses cálculos são feitos prato a prato.

## **2.6. Aplicações e referências pertinentes**

Se a destilação é hoje a operação de separação de componentes mais utilizada nos processos industriais, é devido não só à sua simplicidade, mas também à sua vasta aplicabilidade. Sabe-se que essa operação é muito utilizada no fracionamento de compostos orgânicos e de gases em temperaturas criogênicas (como por exemplo na produção de nitrogênio e oxigênio provindos do ar), representando algo entre 90% e 95% de todos os processos de separação na indústria química e na indústria de refinaria de petróleo principalmente (ORNL, 2005).

Por isso, diante de uma alternativa para um processo convencional tão difundido, pesquisadores do mundo todo buscam avaliar o funcionamento desse método alternativo nos mais diversos cenários, na tentativa de abranger as diferentes aplicações existentes para o processo convencional e verificar se para aquela determinada aplicação abordada em sua pesquisa o método não convencional poderia ser aplicado de forma vantajosa. A DWC atualmente se encaixa nessa condição, já que diversos autores podem ser citados no estudo dessa coluna, utilizando diferentes configurações, métodos, simuladores e aplicações.

No contexto da indústria de petróleo, o trabalho de Kalita, Kockler e Ignat (2018) implementa a DWC em três diferentes esquemas de processos de uma

planta de gás de petróleo, sendo os esquemas referentes às unidades de recuperação do Gás Liquefeito de Petróleo (GLP) e de Craqueamento Catalítico de Fluidos – do inglês *Fluid Catalytic Cracking* (FCC) –. Esses autores fazem uma comparação entre um modelo convencional e um modelo DWC, avaliando os resultados dos processos de recuperação do GLP e de componentes de quatro carbonos (C4) no aspecto energético, econômico e de pureza dos produtos obtida. Eles utilizam como ferramenta de estudo o sistema da GTC Technology, uma empresa licenciadora de tecnologias de processo que oferece diversos serviços de engenharia e soluções de equipamentos para a indústria química. O sistema da GTC Technology oferece uma simulação dinâmica que permite um modelo de processo confiável. Kalita, Kockler e Ignat (2018) apontam que, na maioria das configurações, o modelo DWC utilizado por eles (GT-DWC®) reduz o consumo de energia e resulta em produtos ainda mais puros que o modelo convencional, além de ter um menor custo de instalação de equipamentos, mostrando assim que a integração da DWC em plantas de gás é uma opção viável para otimização de processos. Neste estudo, diferentemente da maioria que utiliza a parede dividida na parte central da coluna, Kalita, Kockler e Ignat (2018) abordam uma parede dividida no topo, mostrando suas vantagens.

Wu et al. (2018) também abordam a utilização da DWC na indústria petroquímica, considerando a etapa de pré-tratamento da gasolina industrial reformada. A gasolina industrial reformada é uma mistura multi-componente, com um total de 16 componentes que podem ser divididos em não-aromáticos, benzeno, tolueno, xileno, etilbenzeno e aromáticos pesados. No processo de pré-tratamento da gasolina reformada, ao utilizar colunas de destilação é recomendado o uso de um condensador parcial, já que a mistura contém componentes não condensáveis. Wu et al. (2018) utilizaram o *software* Aspen Plus para conduzir o método rigoroso de simulação e obtiveram resultados positivos, reduzindo o custo anual total dessa etapa em até 13,06% ao comparar a DWC com uma sequência direta de destilação convencional.

Outra aplicação discutida por algumas referências é a utilização da DWC para destilação reativa, combinando a tecnologia de separação da DWC com uma zona reacional em uma mesma coluna. Esse é o caso de Xie et al. (2018), que conduziram experimentos e simulações com coluna de parede dividida reativa para a síntese de acetato de etila. Esses autores utilizam a reação de esterificação com

ácido acético e etanol em sua pesquisa, que forma uma mistura azeotrópica no sistema. Eles verificam a confiabilidade do modelo pelo estudo experimental, e posteriormente, utilizando o Aspen Plus, constroem o sistema para a síntese desejada utilizando o modelo de quatro colunas para a DWC reativa e analisam os efeitos da variação da quantidade do agente azeotrópico, da razão de refluxo e da concentração de ácido acético no processo. Xie et al. (2018) realizaram também uma análise econômica comparando uma coluna de destilação reativa convencional e uma DWC reativa, com resultados mostrando uma economia de até 18,5% no custo anual total.

Alguns autores mostram também outras possibilidades para o estudo da DWC. Nguyen et al. (2016), por exemplo, utilizaram o simulador ProSimPlus® para separar misturas de álcoois, ternárias (metanol, 1-propanol e 1-butanol) e quaternárias (metanol, isopropanol, 1-propanol e 1-butanol), validando experimentalmente os resultados das simulações através de uma planta piloto. Os resultados experimentais foram altamente condizentes com os resultados da simulação considerando o perfil de composições e de temperatura.

Aurangzeb e Jana (2016) simularam uma DWC para separação de uma mistura ternária de hidrocarbonetos (hexano, heptano e octano) no simulador Aspen Plus; posteriormente, dando continuidade às suas pesquisas de simulação para DWC, Aurangzeb e Jana (2019) propuseram ainda a separação de uma mistura ternária azeotrópica de tetrahidrofurano (THF), metanol e água, um sistema ternário ainda mais complexo de ser separado.

Pode-se observar que a separação de hidrocarbonetos é bastante recorrente dentre as pesquisas com DWC. Nesse contexto, os compostos aromáticos também devem ser considerados. Uma mistura bastante abordada ao se tratar de compostos aromáticos é a mistura de Benzeno, Xileno e Tolueno (BTX). Algumas pesquisas já abordaram a utilização da DWC para a separação dessa mistura, por ser uma separação relevante para a indústria (KISS; REWAGAD, 2011).

Pinzón (2014) apresentou um estudo econômico da separação da mistura ternária de BTX, comparando os arranjos ótimos de separação de sequências de destilação convencional e de colunas de paredes divididas. A ideia da pesquisa foi a separação da mistura BTX com três composições diferentes na alimentação, em diferentes configurações de destilação. Primeiramente, Pinzón (2014) caracterizou as variáveis do modelo para cada configuração, realizando um estudo de seus

graus de liberdade e dimensionando o projeto inicialmente com o método não rigoroso. Após essa etapa, as colunas convencionais e a coluna de parede dividida são projetadas com método rigoroso, e utilizando três composições diferentes na alimentação, Pinzón (2014) estudou como essas diferentes composições podem influenciar o custo ótimo de separação nas diferentes sequências e arranjos analisados. Por fim, o autor realizou uma otimização econômica para cada uma das sequências analisadas por ele. Para esse estudo, o autor utilizou o Aspen Plus e o Matlab em seus estudos e simulações.

Khushalani, Maheshwari e Jain (2014) também utilizaram a efetiva tecnologia da DWC como base de seus estudos para a separação de uma mistura de BTX. Essa pesquisa utilizou também o Aspen Plus para realizar a simulação, mas seu foco esteve centrado em como a pureza dos componentes da mistura de BTX pode variar com a posição da parede divisória da DWC.

Kiss e Rewagad (2011), há quase uma década atrás, já estudavam também a configuração DWC para a separação de BTX. Seu estudo foi focado no controle do processo, utilizando várias estruturas de controle convencionais baseadas em malhas de controle Proporcional Integral Derivativo (PID) como base, e posteriormente sugerindo melhorias nas estruturas de controle, de forma a minimizar a energia requerida.

Diante dos diversos estudos utilizando simulação de uma DWC para a separação da mistura ternária de BTX, essa mistura tornou-se atrativa para a monografia aqui desenvolvida, sendo essa a mistura escolhida para esse projeto, a fim de expandir os resultados disponíveis para esse tema. Ao utilizar os mesmos componentes de alimentação de outras pesquisas, no caso a mistura BTX, é possível ampliar o acervo e os dados sólidos referente a esse caso específico, servir como base para futuras pesquisas e ainda realizar uma comparação justa com os resultados de referências anteriores.

Assim, este estudo seguiu a linha dos trabalhos anteriormente citados, utilizando a DWC para separação da mistura ternária de BTX, tendo como diferencial um estudo aprofundado das análises de sensibilidade e das determinações de especificações desejadas, para não só avaliar a eficiência energética e outros fatores relevantes do processo para a comparação da DWC com as colunas de destilação convencionais, como também sugerir melhorias para o processo como um todo.



### 3. METODOLOGIA

O presente estudo utilizou o método de modelagem e simulação de processos para realizar a comparação entre um processo convencional de destilação e uma destilação por coluna de parede dividida na separação de uma mistura ternária de Benzeno, Tolueno e Xileno (BTX), através do *software* de simulação de processos químicos Aspen Plus V8.8.

Para realizar a comparação aqui proposta, foi projetada primeiramente a coluna de destilação convencional, a fim de obter seus resultados de consumo energético; posteriormente, foi projetada a coluna de parede dividida, utilizando como ponto de partida para sua configuração dados obtidos na literatura.

Tanto no caso da destilação convencional como na DWC, a alimentação utilizada no processo foi a mesma. As especificações da alimentação, como vazão, pressão e fração de vapor foram baseadas em Pinzón (2014), já a composição da alimentação foi baseada nos valores utilizados por Khushalani, Maheshwari e Jain (2014). Os dados da alimentação definidos para este estudo estão agrupados na Tabela 2.

Tabela 2 – Características das condições da alimentação

Propriedade	Valor		
Vazão de Alimentação (kmol/h)	200		
Pressão (bar)	1,01325		
Fração de vapor	0		
Componente	Benzeno	Tolueno	Xileno
Composição na alimentação (%mol)	0,1096	0,4217	0,4687

Fonte: Própria autora.

#### 3.1. Simulação do sistema de destilação convencional

Para o projeto do sistema de colunas convencionais para a separação da mistura BTX, foi utilizado primeiramente o método *shortcut*. Esse método (detalhado no item 2.5.1.) é utilizado para obter-se uma primeira aproximação das condições operacionais das colunas desse sistema de destilação, baseando-se em

critérios de separação e pureza dos compostos desejados aplicados nas equações de Fenske, Underwood, Gilliland e Kirkbride (FUGK).

Para a separação da mistura BTX apresentada na Tabela 2 foi utilizada uma sequência direta com duas colunas de destilação. O método *shortcut* foi utilizado duas vezes, para a determinação das duas colunas supracitadas. A primeira coluna de destilação é a responsável por separar o Benzeno (destilado) da mistura Tolueno e Xileno (produto de fundo). A segunda coluna é então a responsável por separar o Tolueno (destilado) do Xileno (produto de fundo). Para esse propósito, na primeira coluna o Benzeno foi definido como componente chave leve (com recuperação mínima de 99,9% no destilado), e o Tolueno como componente chave pesado (com recuperação máxima de 0,1% no destilado); já na segunda coluna, o Tolueno foi o componente chave leve (com recuperação mínima de 99,9% no destilado), e o Xileno o componente chave pesado (com recuperação máxima de 0,1% no destilado). Para tanto, foi utilizado o modelo de coluna DSTWU do simulador Aspen Plus, com pressão fixa de 1,01325 bar nas colunas; além disso, foi definido o número de 70 estágios no total para o sistema de destilação convencional, sendo 40 estágios na primeira coluna e 30 estágios na segunda coluna (esse número foi escolhido pensando em posteriormente realizar uma comparação adequada com a coluna DWC, que também tem 70 estágios no total).

Com a determinação das condições operacionais das colunas pelo método *shortcut*, foi conduzida então uma destilação por simulação rigorosa, através do modelo de coluna RadFrac, disponível no simulador Aspen Plus. Vale ressaltar que as condições inicialmente utilizadas na simulação rigorosa das colunas convencionais foram as determinadas pelo modelo *shortcut*. O modelo rigoroso de cálculo de destilação (vide item 2.5.2.) leva em conta o equilíbrio líquido-vapor envolvido na separação da mistura BTX, permitindo a obtenção de resultados mais próximos à realidade. O principal objetivo dessa etapa é validar as condições obtidas com a destilação *shortcut*, realizando ajustes nas condições operacionais (taxa de destilado e razão de refluxo) a fim de obter a pureza desejada e um modelo mais otimizado, para que seja feita uma comparação justa do sistema convencional com a DWC.

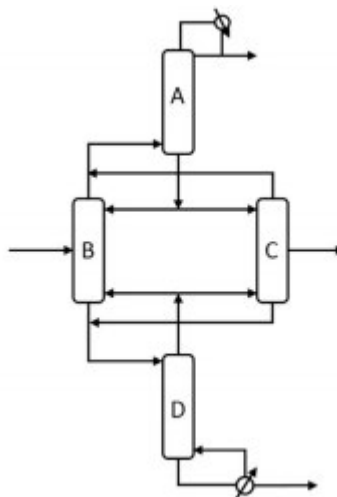
Para a otimização do sistema na simulação rigorosa, a estratégia utilizada foi obter o valor de razão de refluxo ideal para que o processo começasse a atingir a recuperação desejada. Para a primeira coluna da simulação rigorosa, realizou-se

uma análise de sensibilidade (ferramenta *Sensitivity*) a fim de verificar a partir de qual valor de razão de refluxo a recuperação de benzeno atingiria os 99,9%. Já para a segunda coluna, realizou-se uma definição de qual era o valor desejado para a pureza do tolueno (99,9%), de forma que ao definir essa especificação o *software* determina o melhor valor de razão de refluxo para a condição desejada (ferramenta *Design Spec*). Por fim, o modelo final da simulação rigorosa permitiu a avaliação do consumo de energia do processo de destilação convencional, posteriormente utilizado para realizar a comparação com o consumo de energia da DWC.

### 3.2. Simulação da DWC

Para a simulação da DWC foi escolhido o modelo de quatro colunas, conforme mostrado na Figura 6. As colunas A, B, C e D representam uma coluna única, em um único casco. As colunas A, C e D representam a coluna principal. As colunas B e C representam a seção da coluna onde há a parede divisória (seção fracionadora), sendo a coluna B a seção de pré-fracionamento que recebe a alimentação e a coluna C a seção de separação onde há a saída lateral do componente intermediário. A coluna A representa a seção de retificação e a coluna D a seção de esgotamento da coluna principal. O método escolhido para conduzir a destilação por DWC foi a simulação rigorosa, sendo as quatro colunas que compõem sua configuração colunas do modelo RadFrac (modelo disponível no Aspen Plus V8.8).

Figura 6 – Modelo de quatro colunas para simulação da DWC



Fonte: Zhou, Koojiman e Taylor (2019).

Como ponto de partida, foi utilizada a mesma alimentação proposta na Tabela 2, apresentada anteriormente. Para as condições operacionais da DWC, decidiu-se utilizar o mesmo número de estágios total proposto por Pinzón (2014) para a coluna principal, modificando apenas o número de estágios da seção fracionadora, a posição da parede divisória e a pressão utilizada no processo. Os dados escolhidos estão representados na Tabela 3.

Tabela 3 – Informações iniciais para a simulação da DWC

<b>Parâmetro</b>	<b>Valor</b>
Número de estágios na coluna principal	70
Número de estágios da seção fracionadora	30
Estágio de alimentação na seção fracionadora	15
Estágio de saída de produto lateral	15
Número de estágios na seção de retificação	15
Número de estágios na seção de esgotamento	25
Pressão de operação nas colunas (bar)	1,01325

Fonte: Própria autora.

Com os dados da Tabela 3, a coluna de destilação DWC foi simulada, e então as vazões e demais variáveis necessárias foram ajustadas para se obter a pureza desejada para os componentes. A simulação de uma coluna não convencional como a DWC é uma simulação complexa, que envolve mais graus de liberdade e mais parâmetros a serem manipulados do que uma simulação de coluna convencional. Além disso, por conta de sua configuração não convencional, não é comum realizar uma *shortcut* a fim de obter uma estimativa dos parâmetros iniciais para essa simulação, logo, neste caso, a melhor abordagem para ajustar os parâmetros é o ajuste manual, por tentativa e erro. Portanto, os dados foram ajustados um por vez, variando-os pouco a pouco para verificar como a variação deles afetava os resultados da simulação, até que a recuperação desejada de 99,9% para cada componente fosse atingida. Por fim, com o modelo final, foi obtido o resultado de consumo energético para a DWC e esse resultado foi comparado com aquele obtido para a destilação convencional.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

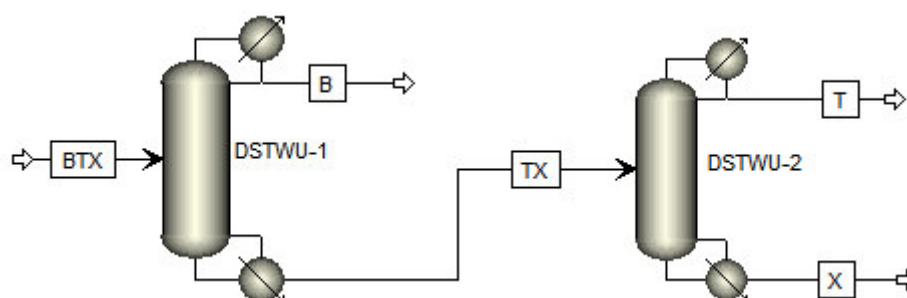
### 4.1. Simulação do sistema de destilação convencional

#### 4.1.1. Simulação *shortcut* do sistema convencional

Inicialmente, conforme proposto na Metodologia, foi realizada a simulação *shortcut* das colunas de destilação convencionais. O primeiro passo para realizar essa simulação foi selecionar no *software* Aspen Plus todos os componentes envolvidos processo. Foram eles: benzeno ( $C_6H_6$ ), tolueno ( $C_7H_8$ ) e P-xileno ( $C_8H_{10}$ -3). Para o método termodinâmico base que o *software* utiliza para o cálculo de propriedades, optou-se pelo método NRTL, assim como proposto por Kiss e Rewagad (2011) em sua pesquisa que também utiliza uma mistura BTX.

Com as propriedades e parâmetros estimados, foi construído o diagrama de fluxo da simulação em sequência direta, como mostrado na Figura 7. Para essa simulação *shortcut* do sistema convencional, foi escolhido o modelo de coluna DSTWU na biblioteca de equipamentos do Aspen Plus.

Figura 7 – Diagrama de fluxo da simulação *shortcut* do sistema convencional



Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Após a construção do diagrama de fluxo foram definidas as propriedades da corrente de alimentação BTX (vide Tabela 2) e as configurações das colunas DSTWU-1 e DSTWU-2 (fixando 40 e 30 estágios, respectivamente).

Para atingir a recuperação desejada de 99,9% em cada um dos componentes, foi necessário realizar ajustes nos valores de recuperação mínima e

máxima dos componentes chave leve e chave pesado, em ambas as colunas. Os dados de configuração das colunas na simulação *shortcut* podem ser observados nas Figuras 8 e 9, a seguir.

Figura 8 – Configuração final da coluna DSTWU-1 na simulação *shortcut* do sistema convencional

DSTWU-1 (DSTWU) Main Flowsheet

Specifications Calculation Options Convergence Information

Column specifications

☒ Number of stages 40

☐ Reflux ratio

Key component recoveries

Light key

Comp BENZENE

Recov 0,99999

Heavy key

Comp TOLUENE

Recov 1e-05

Pressure

Condenser 1,01325 bar

Reboiler 1,01325 bar

Condenser specifications

☒ Total condenser

☐ Partial condenser with all vapor distillate

☐ Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction 0

Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Figura 9 – Configuração final da coluna DSTWU-2 na simulação *shortcut* do sistema convencional

DSTWU-2 (DSTWU) Main Flowsheet

Specifications Calculation Options Convergence Information

Column specifications

☒ Number of stages 30

☐ Reflux ratio

Key component recoveries

Light key

Comp TOLUENE

Recov 0,9999

Heavy key

Comp P-XYLENE

Recov 0,0001

Pressure

Condenser 1,01325 bar

Reboiler 1,01325 bar

Condenser specifications

☒ Total condenser

☐ Partial condenser with all vapor distillate

☐ Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction 0

Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Com a simulação, foram obtidos os resultados para as colunas DSTWU-1 e DSTWU-2, representados na Tabela 4.

Tabela 4 – Resultados obtidos para as colunas DSTWU-1 e DSTWU-2 na simulação *shortcut*

<b>Resultados obtidos para as colunas da simulação <i>shortcut</i></b>		
<b>Propriedade</b>	<b>DSTWU-1</b>	<b>DSTWU-2</b>
Razão de refluxo mínima	4,40012	1,83868
Razão de refluxo atual	7,07921	5,86972
Número mínimo de estágios	26,83610	24,46550
Número de estágios atual	40	30
Estágio de alimentação	19,89030	14,50230
Número de estágios acima da alimentação	18,89030	13,50230

Fonte: Própria autora.

Foram obtidos também os resultados para as correntes B, T e X (vide Figura 7), representados na Tabela 5.

Tabela 5 – Resultados obtidos para as correntes B, T e X na simulação *shortcut*

<b>Corrente B – Simulação <i>shortcut</i></b>	
<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Vazão total (kmol/h)	21,92070
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	21,91978
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	0,00084
Vazão molar de xileno (kmol/h)	7,69207E-05
Fração molar de benzeno	0,99995
Fração molar de tolueno	3,84751E-05
Fração molar de xileno	3,50905E-06
<b>Corrente T – Simulação <i>shortcut</i></b>	
<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Vazão total (kmol/h)	84,34032
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	0,00022
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	84,33072
Vazão molar de xileno (kmol/h)	0,00937
Fração molar de benzeno	2,59899E-06
Fração molar de tolueno	0,99988
Fração molar de xileno	0,00011
<b>Corrente X – Simulação <i>shortcut</i></b>	
<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Vazão total (kmol/h)	93,73898
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	7,1401E-17
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	0,00843
Vazão molar de xileno (kmol/h)	93,73055
Fração molar de benzeno	7,61700E-19
Fração molar de tolueno	8,99723E-05
Fração molar de xileno	0,99991

Fonte: Própria autora.

Com a Tabela 5, pode-se observar que com os ajustes foi possível atingir uma recuperação mínima de 99,9% para todos os componentes (benzeno, tolueno e xileno) na simulação *shortcut*. Com a Tabela 4, pode-se observar também que as razões de refluxo para as colunas DSTWU-1 e DSTWU-2 (Razão de refluxo atual) foram automaticamente calculadas para condizer com os números de estágios especificados, sendo assim, a coluna DSTWU-1 ficou com 40 estágios e razão de refluxo de 7,07921 e a coluna DSTWU-2 ficou com 30 estágios e razão de refluxo de 5,86972, números razoáveis e necessários para realizar a destilação proposta.

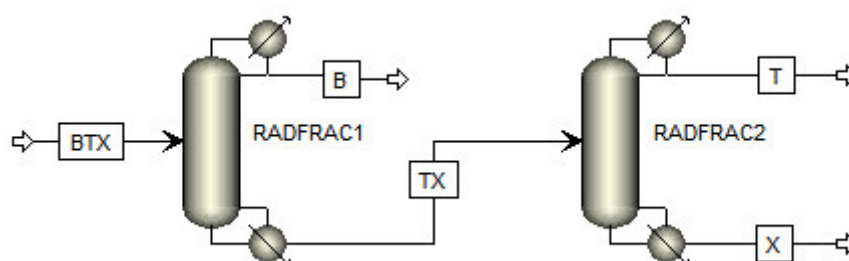
Com essa simulação *shortcut*, foi possível obter as estimativas dos dados necessários para conduzir a simulação rigorosa do sistema convencional. Esses valores foram utilizados como ponto inicial para executar a simulação rigorosa apresentada a seguir.

#### 4.1.2. Simulação rigorosa do sistema convencional

Para o método rigoroso do sistema de destilação convencional, uma nova simulação foi iniciada com componentes envolvidos no processo selecionados de maneira análoga à simulação *shortcut*, sendo eles, novamente, o benzeno ( $C_6H_6$ ), o tolueno ( $C_7H_8$ ) e o P-xileno ( $C_8H_{10-3}$ ). O método termodinâmico escolhido para a simulação rigorosa também foi o NRTL.

Após as propriedades e os parâmetros serem estimados pelo *software*, construiu-se o diagrama de fluxo da simulação rigorosa utilizando também a sequência direta para as colunas, conforme mostrado na Figura 10. Os equipamentos selecionados na biblioteca do Aspen Plus neste caso foram duas colunas RadFrac (modelo de destilação rigorosa disponível no simulador).

Figura 10 – Diagrama de fluxo da simulação rigorosa do sistema convencional





Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Com o diagrama de fluxo construído, a alimentação foi definida de forma idêntica à alimentação da simulação *shortcut*, de acordo com a Tabela 2. Também foram definidas as configurações iniciais para as colunas RadFrac, (coluna RadFrac1 com 40 estágios, razão de refluxo de 7,07921 e vazão de destilado a 21,92070 kmol/h; coluna RadFrac2 com 30 estágios, razão de refluxo de 5,86972 e vazão de destilado a 84,34032 kmol/h). É importante ressaltar que os dados utilizados para a configuração inicial das colunas na simulação rigorosa foram os dados obtidos na simulação *shortcut*.

Como na simulação rigorosa os cálculos são feitos prato a prato, considerando o equilíbrio líquido-vapor envolvido, seus resultados acabam sendo mais próximos da realidade, sendo necessário realizar ajustes e otimizações para atingir a recuperação desejada de 99,9% para cada componente BTX. Ou seja, os resultados obtidos na simulação *shortcut* não satisfizeram a condição de recuperação dos componentes quando utilizados na simulação rigorosa, sendo necessário ajustes finos para tal propósito.

Para o ajuste da coluna RadFrac1, analisou-se a influência da variação da razão de refluxo sobre a fração molar de benzeno (chamada de FMBZ) por meio de uma análise de sensibilidade, variando a razão de refluxo de 4,41 a 9,41. A definição dos dados da análise de sensibilidade pode ser observada na Figura 11.

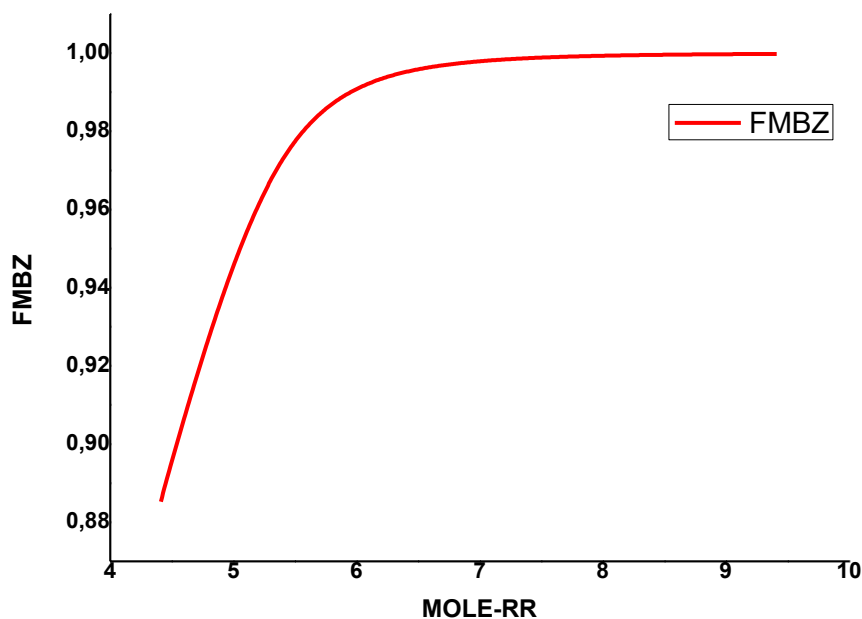
Figura 11 – Dados especificados para a análise de sensibilidade na coluna RadFrac1

The screenshot shows the 'S-1 - Input' dialog box in Aspen Plus, specifically the 'Define' tab for sensitivity analysis. The 'Active' checkbox is checked. Under 'Manipulated variables', the 'Edit selected variable' section is expanded. The 'Manipulated variable' section shows: Variable: 1, Type: Block-Var, Block: RADFRAC1, Variable: MOLE-RR, and Sentence: COL-SPECS. The 'Manipulated variable limits' section shows: Specify limits (selected), Lower: 4.41, Upper: 9.41, Number of points: 501, and Increment: 0.01. The 'List of values' section is empty. The 'Report labels' checkbox is checked.

Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

O resultado da análise de sensibilidade foi plotado e pode ser verificado na Figura 12.

Figura 12 – Variação da fração molar de benzeno em função da variação da razão de refluxo na coluna RadFrac1



Fonte: Própria autora.

Ao analisar o gráfico apresentado na Figura 12, é possível verificar que a fração molar de benzeno cresce conforme a razão de refluxo na coluna RadFrac1 aumenta, porém, a partir de aproximadamente 7,6 a variação de FMBZ com o aumento da razão de refluxo é muito pequena. Portanto, o valor definido para a razão de refluxo da coluna RadFrac1 após a otimização foi o valor de 7,62, ou seja, o menor valor capaz de atingir o resultado desejado para a fração molar de benzeno.

Em seguida, com a razão de refluxo da coluna RadFrac1 definida, foi utilizada a ferramenta *Design Spec* do simulador para determinar o valor exato da razão de refluxo da coluna RadFrac2. Foi especificado como objetivo 0,999 de pureza molar para o tolueno na corrente T. Foram definidos também os limites inferior e superior para a razão de refluxo na coluna RadFrac2, nos valores de 1,84 a 9,84. O resultado obtido com o *Design Spec* pode ser verificado na Figura 13.

Figura 13 – Resultado da análise Design Spec para a razão de refluxo da coluna RadFrac2

RADFRAC2 Specifications Vary - 1	
Type	MOLAR REFLUX RATIO
Lower bound	1,84
Upper bound	9,84
Final value	3,7356

Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Com o resultado apresentado pela Figura 13, observou-se que o valor ideal para a razão de refluxo da coluna RadFrac2 é de 3,7356. Analisando este resultado, foi possível concluir que a fração molar de tolueno cresce conforme a razão de refluxo da coluna RadFrac2 diminui.

Com os valores de razão de refluxo das colunas RadFrac1 e RadFrac2 otimizados, foi possível atingir a recuperação mínima desejada de 99,9% para cada componente. As configurações otimizadas das colunas RadFrac1 e RadFrac2 podem ser observadas nas Figuras 14 e 15.

Figura 14 – Especificação final da coluna RadFrac1 na simulação rigorosa do sistema convencional

RADFRAC1 (RadFrac)			
<div> <div>Configuration</div> <div>Streams</div> <div>Pressure</div> <div>Condenser</div> <div>Reboiler</div> <div>3-Phase</div> <div>Information</div> </div>			
Setup options			
Calculation type	Equilibrium		
Number of stages	40		
Condenser	Total		
Reboiler	Kettle		
Valid phases	Vapor-Liquid		
Convergence	Standard		
Operating specifications			
Distillate rate	Mole	21,9207	kmol/hr
Reflux ratio	Mole	7,62	
Free water reflux ratio	0	Feed Basis	

Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Figura 15 – Especificação final da coluna RadFrac2 na simulação rigorosa do sistema convencional

The screenshot shows the 'RADFRAC2 (RadFrac)' configuration window in Aspen Plus. The 'Configuration' tab is selected, showing the following settings:

- Setup options:**
  - Calculation type: *Equilibrium*
  - Number of stages: *30* (with a 'Stage Wizard' button)
  - Condenser: *Total*
  - Reboiler: *Kettle*
  - Valid phases: *Vapor-Liquid*
  - Convergence: *Standard*
- Operating specifications:**
  - Distillate rate: *84,3403* *kmol/hr* (basis: *Mole*)
  - Reflux ratio: *3,7356* (basis: *Mole*)
  - Free water reflux ratio: *0*

A 'Feed Basis' button is located at the bottom right of the operating specifications section.

Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Os resultados obtidos com a simulação rigorosa para as correntes B, T e X (vide Figura 10) encontram-se na Tabela 6, apresentada a seguir.

Com a Tabela 6, pode-se observar que com a otimização, o objetivo de uma fração molar de 0,999 (no mínimo) para cada componente de interesse foi atingido. Cada corrente (B, T e X) é rica no componente adequado, onde a separação deveria de fato ocorrer, o que mostra que o resultado obtido foi coerente.

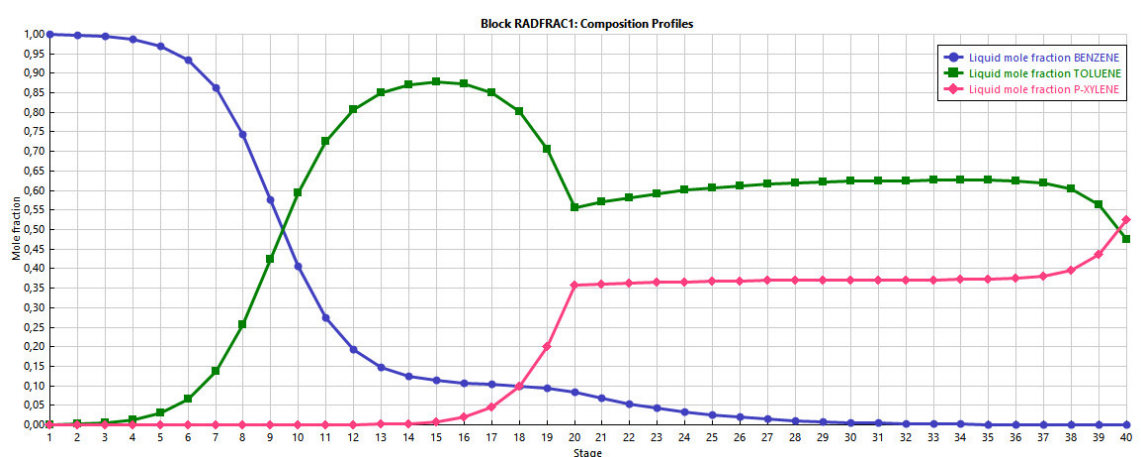
Além dos resultados destacados na Tabela 6, foi possível também obter através do *software* o perfil da fração molar de cada componente ao longo dos pratos de cada coluna. O perfil dos componentes ao longo da coluna RadFrac1 pode ser observado na Figura 16, e o perfil dos componentes ao longo da coluna RadFrac2 pode ser observado na Figura 17.

Tabela 6 – Resultados obtidos para as correntes B, T e X na simulação rigorosa do sistema convencional

Corrente B – Simulação Rigorosa	
Propriedade	Valor
Vazão total (kmol/h)	21,92070
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	21,89889
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	0,02181
Vazão molar de xileno (kmol/h)	3,24550E-10
Fração molar de benzeno	0,99900
Fração molar de tolueno	0,00099
Fração molar de xileno	1,48060E-11
Corrente T – Simulação Rigorosa	
Propriedade	Valor
Vazão total (kmol/h)	84,34030
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	0,02111
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	84,25596
Vazão molar de xileno (kmol/h)	0,06323
Fração molar de benzeno	0,00025
Fração molar de tolueno	0,99900
Fração molar de xileno	0,00075
Corrente X – Simulação Rigorosa	
Propriedade	Valor
Vazão total (kmol/h)	93,73900
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	5,09150E-11
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	0,06223
Vazão molar de xileno (kmol/h)	93,67677
Fração molar de benzeno	5,43160E-13
Fração molar de tolueno	0,00066
Fração molar de xileno	0,99933

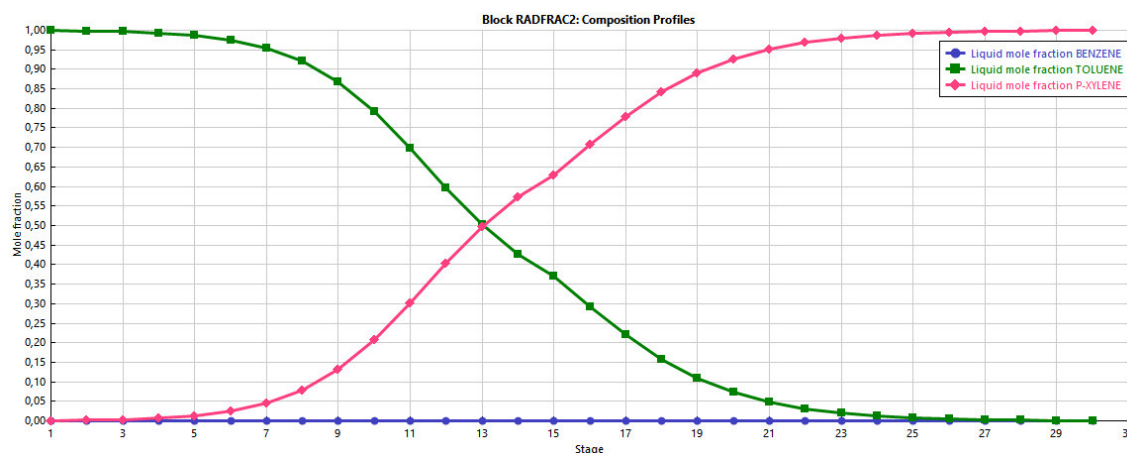
Fonte: Própria autora.

Figura 16 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna RadFrac1



Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Figura 17 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna RadFrac2



Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

Os perfis apresentados na Figura 16 e 17 explicam de forma visual o que acontece nas colunas. Na Figura 16, observa-se que no topo (Estágio 1) a concentração de benzeno fica bastante alta, bem próxima dos 99,9%, e a concentração de tolueno e xileno fica muito baixa, praticamente desprezível; já no fundo (Estágio 40), a concentração de benzeno é praticamente desprezível, e a concentração de tolueno e xileno praticamente se iguala. A corrente de fundo dessa coluna será alimentada na segunda coluna para a separação de tolueno e xileno. No prato de alimentação (Estágio 20), observa-se os três componentes com sua concentração de alimentação. É possível notar também que devido à coluna RadFrac1 ser a responsável por separar o benzeno (componente mais volátil), seu perfil é o mais suave nesta coluna (sem bicos no gráfico), o que indica que a corrente de alimentação está no estágio adequado.

Na Figura 17, observa-se que na coluna RadFrac2 já quase não há benzeno, pois esse componente já foi separado na coluna anterior, ou seja, sua concentração é praticamente desprezível ao longo de toda a coluna. No topo (Estágio 1), vemos uma corrente rica em tolueno, uma vez que esse componente é o composto mais volátil nessa segunda destilação, e deve sair no destilado. No fundo (Estágio 30), observa-se uma alta concentração de xileno (próxima aos 0,999 de fração molar). No prato de alimentação (Estágio 15), temos as concentrações providas do fundo da coluna RadFrac1.

Por fim, com a simulação rigorosa do sistema de destilação convencional otimizada, avaliou-se sua eficiência energética. Para isso, foi calculado o consumo de vapor desse sistema por massa de xileno produzida. Neste caso, o cálculo foi feito manualmente, e o valor obtido foi de 0,89994 quilogramas de vapor por quilograma de xileno produzido.

#### 4.2. Simulação da DWC

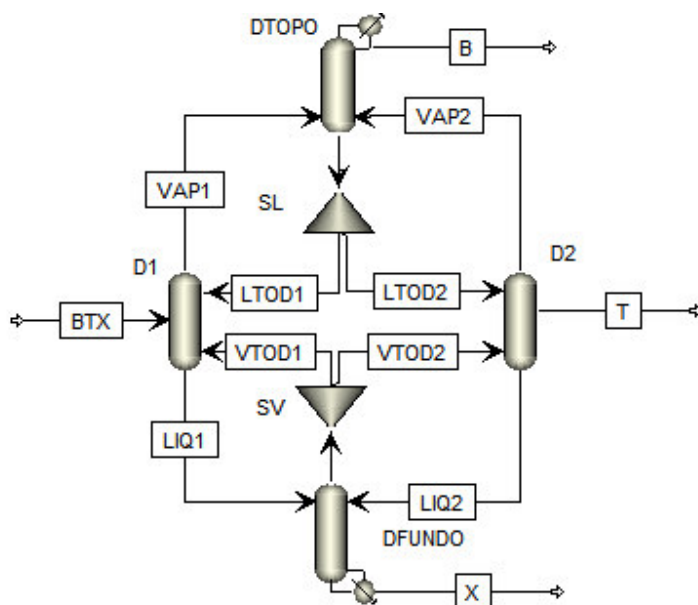
Nesta etapa, foi conduzida a simulação da coluna DWC. Vale ressaltar que nesta simulação foi utilizado o método de simulação rigorosa desde o início, e que a configuração das colunas escolhida para construir a coluna DWC foi o modelo de quatro colunas, conforme proposto no tópico 3.2.

Assim como nas outras simulações, o primeiro passo ao iniciar essa nova simulação foi a escolha dos componentes envolvidos no processo, sendo eles novamente o benzeno ( $C_6H_6$ ), o tolueno ( $C_7H_8$ ) e o P-xileno ( $C_8H_{10}-3$ ). Para esta simulação de destilação não convencional, também foi escolhido o método termodinâmico base NRTL, a fim de manter o padrão dos critérios de cálculo utilizados pelo *software* nas demais simulações realizadas neste trabalho.

Com as propriedades e parâmetros estimados, construiu-se o diagrama de fluxo da simulação DWC com base na configuração de quatro colunas, como mostrado na Figura 18 apresentada adiante. Os equipamentos selecionados neste caso foram quatro colunas RadFrac e dois divisores de corrente (*Splitters*) do modelo FSplit, disponíveis na biblioteca do *software*. Os divisores de corrente são necessários para redirecionar algumas correntes de volta para o processo.

Após a construção do diagrama de fluxo, a alimentação foi definida de forma idêntica à alimentação utilizada nas simulações do sistema convencional, de acordo com o proposto na Tabela 2. Foram definidas também algumas configurações fixas para as quatro colunas, como o número de estágios em cada uma, de acordo com a Tabela 3, apresentada na Metodologia. As colunas D1 e D2, por representarem a seção de parede dividida da coluna principal, foram definidas como colunas sem condensador e sem refeedor. A coluna DTOPO, por representar a seção de retificação, foi definida como uma coluna sem refeedor e com condensador total. Já a coluna DFUNDO, por representar a seção de esgotamento, foi definida como uma coluna sem condensador e com refeedor do tipo Kettle.

Figura 18 – Diagrama de fluxo da simulação da coluna DWC



Fonte: Própria autora (Aspen Plus).

As demais configurações iniciais para cada equipamento, como a fração de divisão de corrente nos divisores SL e SV e as demais especificações obrigatórias para as colunas D1, D2, DTOPO e DFUNDO foram ajustadas manualmente a fim de atingir a recuperação desejada para os componentes. Após diversos ajustes manuais, foram obtidos os valores de 21,9007 kmol/h para a taxa de vazão de destilado na coluna DTOPO, 93,7207 kmol/h para a taxa de vazão de fundo na coluna DFUNDO e 84,1407 kmol/h para a vazão de produto lateral na coluna D2. Já para os divisores de corrente, SL foi ajustado com uma fração de 0,53 para a corrente LTOD1 e 0,47 para a corrente LTOD2, e SV foi ajustado com uma fração de 0,67 para a corrente VTOD1 e 0,33 para a corrente VTOD2.

Ao analisar a literatura, notou-se também que para uma melhor convergência da coluna DFUNDO, o ideal seria utilizar um perfil de pressão nesta coluna em vez de uma pressão fixa de 1,01325 bar para todos os pratos. Portanto, foi utilizado um perfil de pressão conforme o sugerido por Khushalani, Maheshwari e Jain (2014), com pressão de 1,01325 bar no Estágio 1 e pressão de 2 bar no Estágio 25.

Ao realizar todos os ajustes necessários, a simulação atingiu os resultados desejados para as recuperações dos componentes. É possível observar na Tabela 7 os resultados obtidos na simulação da coluna DWC para as correntes B, T e X (vide Figura 18).



Tabela 7 – Resultados obtidos para as correntes B, T e X na simulação da coluna DWC

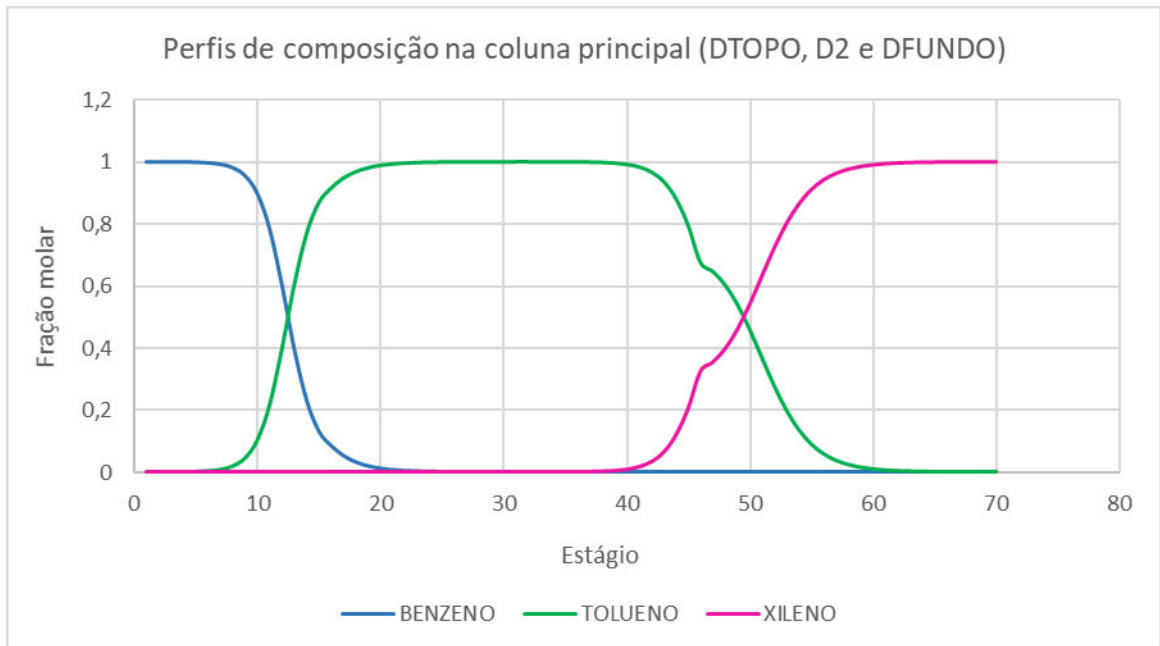
<b>Corrente B – Simulação da DWC</b>	
<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Vazão total (kmol/h)	21,90070
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	21,89995
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	0,00075
Vazão molar de xileno (kmol/h)	1,69980E-14
Fração molar de benzeno	0,99997
Fração molar de tolueno	3,40322E-05
Fração molar de xileno	7,76160E-16
<b>Corrente T – Simulação da DWC</b>	
<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Vazão total (kmol/h)	84,14070
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	0,00323
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	84,13551
Vazão molar de xileno (kmol/h)	0,00196
Fração molar de benzeno	3,83304E-05
Fração molar de tolueno	0,99994
Fração molar de xileno	2,33492E-05
<b>Corrente X – Simulação da DWC</b>	
<b>Propriedade</b>	<b>Valor</b>
Vazão total (kmol/h)	93,72070
Vazão molar de benzeno (kmol/h)	1,00910E-16
Vazão molar de tolueno (kmol/h)	0,00724
Vazão molar de xileno (kmol/h)	93,71346
Fração molar de benzeno	1,07670E-18
Fração molar de tolueno	7,72331E-05
Fração molar de xileno	0,99992

Fonte: Própria autora.

Com a Tabela 7, pode-se observar que a separação dos componentes foi efetiva na coluna DWC, e que o objetivo de uma fração molar mínima de 0,999 para cada componente (B, T e X) foi atingido. Cada corrente é rica no componente adequado, já que o benzeno (componente leve) sai no topo (corrente B), o xileno (componente pesado) sai no fundo (corrente X) e o tolueno (componente intermediário) sai na corrente lateral (corrente T), logo, os resultados obtidos apresentaram-se dentro do esperado.

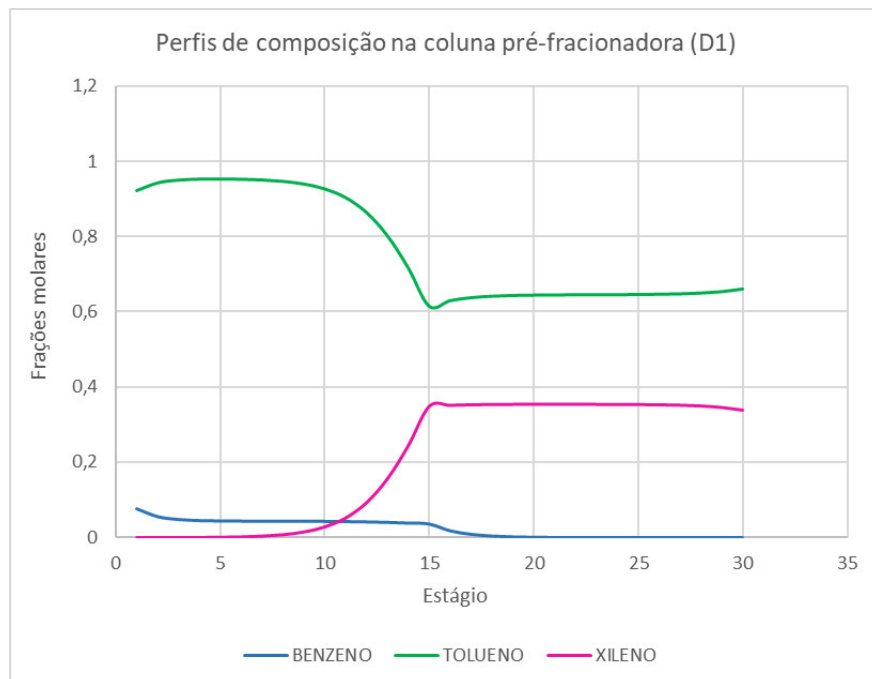
O perfil de concentração dos compostos ao longo da coluna principal (D1, D2 e D3 – vide Figura 18) está apresentado na Figura 19. Na Figura 20, observa-se o perfil de concentração ao longo da coluna pré-fracionadora (D1 – vide Figura 18).

Figura 19 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna principal



Fonte: Própria autora.

Figura 20 – Perfil das frações molares dos componentes BTX ao longo dos pratos da coluna pré-fracionadora



Fonte: Própria autora.

A análise da Figura 19 indica claramente a presença de três regiões de concentração dos compostos ao longo de toda a coluna principal. Essas regiões estão associadas ao Estágio 1 (destilado), onde o benzeno (composto de maior volatilidade) é concentrado; a uma região intermediária na coluna (em torno do Estágio 30) onde o tolueno (composto de volatilidade intermediária) é concentrado e retirado; e, por fim, no Estágio 70, fundo da coluna DFUNDO, no qual o xileno (composto menos volátil) é concentrado e retirado. Esse perfil justifica a utilização da coluna DWC uma vez que, com apenas um caso, é possível obter os três compostos com purezas altamente elevadas, sem a necessidade de um casco adicional como no processo de destilação convencional.

O perfil apresentado na Figura 20 evidencia a função da coluna pré-fracionadora, uma vez que a mesma é capaz de fracionar os três componentes presentes na alimentação (Benzeno, Tolueno e Xileno) concentrando o Benzeno no topo dessa coluna e então transferindo-o para a coluna DTOPO onde este será concentrado até 99,9% em fração molar. A presença dessa coluna contribui para uma redução no consumo de vapor, uma vez que, como o próprio nome da coluna sugere, um pré-fracionamento dos compostos é realizado.

Por fim, para avaliar a eficiência energética do sistema DWC, foi calculado o consumo de vapor desse sistema por massa de xileno produzida. Neste caso, o cálculo também foi feito manualmente utilizando os resultados da simulação, e o valor obtido foi de 0,87805 quilogramas de vapor por quilograma de xileno produzido.

#### **4.3. Comparação entre a coluna convencional e a coluna DWC**

Após finalizar as simulações do sistema convencional e da coluna DWC, obteve-se todos os dados necessários para realizar uma comparação justa entre as duas. Alinhados ao objetivo deste trabalho, os critérios utilizados para essa comparação foram: a pureza obtida nos componentes fracionados, a quantidade (vazão) obtida para cada componente e principalmente a eficiência energética de cada sistema.

Para avaliar a eficiência energética, foi analisado o consumo de vapor de cada processo (convencional e DWC). Obteve-se a partir dos resultados da simulação para cada coluna a temperatura no Refervedor (*Reboiler*) e seu

respectivo Calor Total (*Heat Duty*) necessários para promover a separação desejada. Conhecendo a temperatura, é possível identificar a partir de tabelas de propriedades termodinâmicas da água a sua entalpia de evaporação ( $h_{fg}$ ). O consumo de vapor é resultado da razão entre o calor total e a entalpia de evaporação da água naquela determinada temperatura. Vale ressaltar que a título de comparação foi utilizado o xileno como base, dessa forma obteve-se como resultado de consumo a quantidade de quilogramas de vapor necessários por quilogramas de xileno obtidos na separação. Após realizar todos os cálculos pertinentes, foi construída a Tabela 8, apresentada a seguir.

Tabela 8 – Tabela de comparação entre o sistema de destilação convencional e o sistema DWC

<b>Parâmetro analisado</b>	<b>Sistema Convencional</b>	<b>DWC</b>
Número de estágios total	70	70
Consumo ( $\text{kg}_{\text{vapor}} / \text{kg}_{\text{xileno}}$ )	0,89994	0,87805
Fração molar de benzeno na corrente B	0,9990049	0,999966
Fração molar de tolueno na corrente T	0,999	0,9999383
Fração molar de xileno na corrente X	0,9993362	0,9999228
Vazão molar de benzeno na corrente B (kmol/h)	21,89889	21,89995
Vazão molar de tolueno na corrente T (kmol/h)	84,25596	84,13551
Vazão molar de xileno na corrente X (kmol/h)	93,67677	93,71346

Fonte: Própria autora.

## 5. CONCLUSÃO

A análise dos resultados permite concluir que, considerando o mesmo número de estágios para o processo convencional de destilação e para a DWC, bem como a mesma pureza dos compostos (Benzeno, Tolueno e Xileno) nas suas respectivas correntes, a DWC apresentou uma eficiência energética (consumo de vapor por quilograma de xileno obtido) ligeiramente melhor do que o sistema convencional, com uma redução de 2,43% no consumo da utilidade. Ainda que essa redução seja relativamente pequena, se for considerado que a utilidade representa um custo operacional, ou seja, custo gasto por dia de operação, essa diferença pode se tornar significativa se for computado o período total de operação do processo. Ademais, como a DWC apresenta uma divisão dos estágios em uma determinada região da coluna, ainda que o número de estágios totais da coluna principal seja o mesmo em ambos os processos (convencional e DWC), a presença da coluna pré-fracionadora – com o mesmo número de estágios da seção dividida da coluna principal – acaba por incrementar o número de estágios efetivamente computados na separação. Desta forma, esse aumento causa uma eficiência de separação melhor, diminuindo levemente o consumo de vapor e tornando assim a DWC mais eficiente do que o processo convencional.

## REFERÊNCIAS

- AURANGZEB, M.; JANA, A. K. Dividing wall column: Improving thermal efficiency, energy savings and economic performance. **Applied Thermal Engineering**, v. 106, p. 1033–1041, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.06.079>>.
- AURANGZEB, M.; JANA, A. K. Double-partitioned dividing wall column for a multicomponent azeotropic system. **Separation and Purification Technology**, v. 219, n. March, p. 33–46, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.03.007>>.
- AZEVEDO, E. G.; ALVES, A. M. **Engenharia de Processos de Separação**. Lisboa: Ist Press, 2009. 878 p.
- BECKER, H. et al. **Partitioned distillation columns - Why, When & How**. 2001. Disponível em: <[http://go.galegroup.com/ps/i.do?p=AONE&u=nysl\\_nc&id=GALE|A70872510&v=2.1&it=r&sid=AONE&asid=89316e4a](http://go.galegroup.com/ps/i.do?p=AONE&u=nysl_nc&id=GALE|A70872510&v=2.1&it=r&sid=AONE&asid=89316e4a)>.
- CHAGURI, L. **Destilação**. 2015. Disponível em: <[http://sistemas.eel.usp.br/docentes/arquivos/8151869/LOQ4017/Aula\\_2\\_Destilacao.pdf](http://sistemas.eel.usp.br/docentes/arquivos/8151869/LOQ4017/Aula_2_Destilacao.pdf)>. Acesso em: 18 abr. 2019.
- CORREIA, A. R. **Introdução à Simulação**. Disponível em: <[http://www2.ita.br/~correia/MB-761/aula\\_1.pptx](http://www2.ita.br/~correia/MB-761/aula_1.pptx)>. Acesso em: 16 abr. 2019.
- CORREIA, G. R. A.; CAPPER, H. A.; MENEZES, R. M. **Análise de métodos para destilação de misturas multicomponentes**. 2018. 83 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2018.
- DAUM, A. R. Petroleum in search of an industry. **Pennsylvania History**, [s.l.], v. 26, n. 1, p.21-34, jan. 1959.
- DEJANOVIC, I.; MATIJASEVIC, L.; OLUJIC, Z. Dividing wall column-A breakthrough towards sustainable distilling. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 49, n. 6, p. 559–580, 2010.
- FENSTERSEIFER, M. L. A. **Determinação de benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos em águas subterrâneas coletadas próximas a postos de combustível**. 2010. 53 f. TCC (Graduação) - Curso de Química Industrial, Univates, Lajeado, 2010.
- GOUVÊA, P. E. M. **Simulation and analysis of alternative configurations of distillation columns: meta and parastillation**. p. 137, 1999.
- KALITA, R.; KOCKLER, D.; IGNAT, R M. Use of dividing wall columns for process intensification. **Chemical Engineering Transactions**, [s.l.], v. 69, p.907-912, out. 2018. AIDIC: Italian Association of Chemical Engineering. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.3303/CET1869152>>.

KHALIFA, M.; EMTIR, M. Rigorous optimization of heat-integrated and Petlyuk column distillation configurations based on feed conditions. **Clean Technologies and Environmental Policy**, v. 11, n. 1, p. 107–113, 2009.

KHUSHALANI, K.; MAHESHWARI, A.; JAIN, N. Separation of Mixture by Divided Wall Column ASPEN PLUS. **International Journal Of Emerging Technology And Advanced Engineering: Exploring Research and Innovations**, [s.i.], v. 4, n. 8, p.563-571, ago. 2014.

KISS, A. A.; REWAGAD, R. R. Energy efficient control of a BTX dividing-wall column. **Computers and Chemical Engineering**, v. 35, n. 12, p. 2896–2904, 2011.

NGUYEN, T. D. et al. Design and simulation of divided wall column: Experimental validation and sensitivity analysis. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 104, p. 94–111, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cep.2016.02.012>>.

ORNL, Oak Ridge National Laboratory. **Materials Research for Separations Technologies: Energy and Emission Reduction Opportunities**. Oak Ridge: Bcs, 2005. Disponível em: <[https://www1.eere.energy.gov/manufacturing/industries\\_technologies/imf/pdfs/separationsreport.pdf](https://www1.eere.energy.gov/manufacturing/industries_technologies/imf/pdfs/separationsreport.pdf)>.

PEGDEN, C. D.; SHANNON, R. E.; SADOWSKI, R. P. **Introduction to simulation using SIMAN**. McGraw-Hill, NY. 2 ed., 1990.

PETLYUK, F. B.; PLATONOV, V. M.; SLAVINSKII, D. M.. Thermodynamically optimal method for separating multicomponent mixtures. **International Chemical Engineering**, [s.i.], v. 5, n. 3, p.555-561, jul. 1965.

PINZÓN, R. A. T. **Otimização econômica de sequências de colunas de destilação convencionais e coluna com parede dividida para a mistura benzeno, tolueno e p-xileno**. 2014. 121 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ciências, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

PIVELI, R. P. **Solventes orgânicos em águas: benzeno, tolueno e xileno**. Disponível em: <[www.pha.poli.usp.br/LeArq.aspx?id\\_arq=1810](http://www.pha.poli.usp.br/LeArq.aspx?id_arq=1810)>. Acesso em: 01 maio 2019.

SILVA FILHO, V. F. **Separação de compostos aromáticos em unidades de destilação por filme descendente**. 2018. 110 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, UFSC, Florianópolis, 2018.

XIE, J. et al. Experimental and simulation of the reactive dividing wall column based on ethyl acetate synthesis. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 26, n. 7, p. 1468–1476, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.01.021>>.

WU, S. et al. Design and control for a dividing-wall column with a partial condenser for pretreating an industrial multi-component reformed gasoline mixture. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 96, n. 11, p. 2431–2442, 2018.

ZHOU, J.; KOOIJMAN, H. A.; TAYLOR, R. Parallel column model for Dividing Wall Column simulations. **Computers & Chemical Engineering**, v. 125, p. 114–133, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2019.02.008>>.