



## **USO DO SOFTWARE COCO PARA SIMULAÇÕES EM ESTADO ESTACIONÁRIO DE COLUNA DE DESTILAÇÃO**

Mateus Schmidt (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Wagner André dos Santos Conceição (Orientador), e-mail: wasconceicao@gmail.com

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Tecnologia / Maringá, PR.

**Área: Engenharias / Subárea: Engenharia Mecânica**

**Palavras-chave:** Colunas de destilação, Simulador, Software COCO

### **Resumo:**

A variação frequente nas condições de alimentação de uma coluna de destilação resulta no ajuste de inúmeras variáveis, dificulta o controle desta unidade, sendo muito complicado recriar experimentalmente estas condições ou arriscando fazer mudanças em processos já estabelecidos. Por isso, utilizar software simulador de processo gera uma economia tempo e dinheiro. O objetivo deste trabalho é utilizar o COCO simulador na simulação de coluna de destilação em diferentes condições em estado estacionário utilizando dados encontrados na literatura e a validação dos dados simulados em simuladores comerciais, como o Aspen® e o Hysys®.

### **Introdução**

Uma coluna de destilação consiste num aparelho de destilação destinado à operação de destilação fracionada, na qual é possível realizar a separação de diferentes componentes que apresentam propriedades químicas distintas, como o ponto de ebulição. A variação frequente tanto da temperatura e pressão quanto da vazão na alimentação das colunas de destilação resulta no ajuste de inúmeras variáveis, dificultando seu controle e gerando assim uma variação no restante do processo industrial envolvido.

Essas variações podem ser previstas utilizando simuladores de processos, facilitando muito a otimização e controle do processo.

Muitos trabalhos na literatura utilizam softwares comerciais como uma ferramenta capaz de fornecer uma visão geral do processo, como o Hysys®





e o Aspen Plus®. Este trabalho comparará dados de colunas de destilação com os dados obtidos por meio de simulação nas mesmas condições no COCO simulador, um software gratuito.

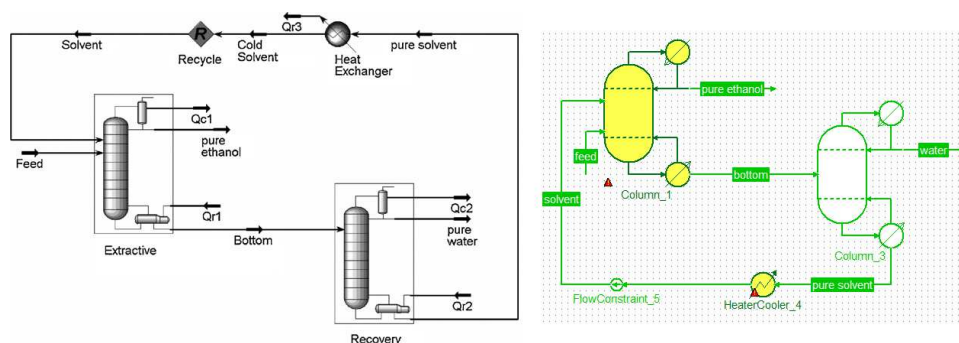
## Revisão de Literatura

Na primeira etapa da pesquisa fez-se um levantamento de artigos e livros correlacionados com o tema da pesquisa.

Na etapa seguinte, utilizaram-se os dados apresentados no trabalho de Ravagnani et al. (2009), que utiliza um processo simples apresentado na Figura 1, o qual fez uso do software comercial Hysys® para sua simulação.

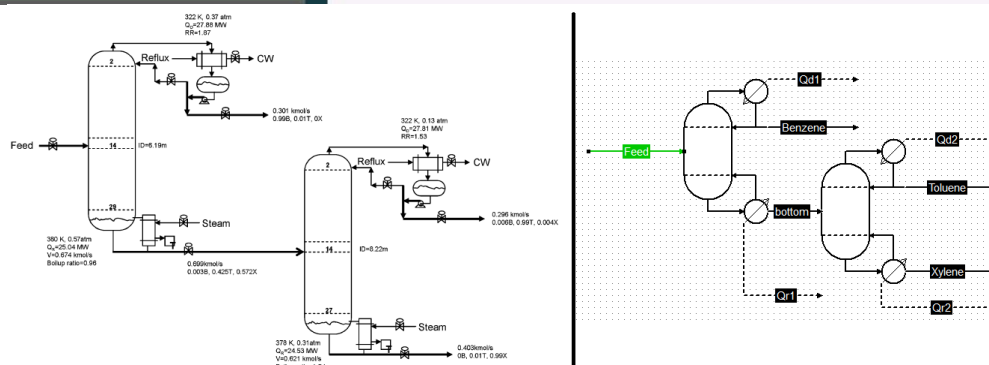
Utilizando o ambiente de simulação computacional de processos (COCO), adicionaram-se os componentes de trabalho etileno-glicol, água e etanol e inseriram-se as operações de processo necessárias. Depois de criar todas as correntes de entrada e saída, assim como as propriedades necessárias ao cálculo, realizou-se a simulação, que também pode ser vista na Figura 1. Na fase de análise deste experimento, compararam-se os resultados do trabalho de Ravagnani et al. (2009) com os dados simulados no COCO.

Na etapa seguinte desse projeto, foram utilizados os resultados do trabalho de Ling (2009), no qual foram feitas simulações de colunas de simples destilação para a separação de uma mistura composta por Benzeno, Tolueno e O-Xileno. O software utilizado em seu trabalho foi o Aspen®, e o fluxograma do processo, tanto no Aspen® quanto no COCO simulador, está apresentado na Figura 2. Na fase de análise deste último experimento, compararam-se os resultados do trabalho de Ling (2009) com os dados simulados no COCO.



**Figura 1** - Modelo de processo do trabalho de Ravagnani et al. (2009) à esquerda, e o mesmo processo desenvolvido no COCO à direita.





**Figura 2** – Fluxograma do processo desenvolvido por Ling (2009) à esquerda, e o mesmo processo desenvolvido no COCO à direita.

Na fase de análise deste último experimento, compararam-se os resultados do trabalho de Ling (2009) com os dados simulados no COCO.

## Resultados e Discussão

Os resultados obtidos no HYSYS® e no COCO simulador estão apresentados nas Tabelas 1 e 2 usando como base a Figura 1. Já os resultados obtidos no COCO simulador e no Aspen Plus® estão apresentados nas Tabelas 3 e 4, usando como base a Figura 2. Nota-se que há uma diferença percentual muito pequena entre os resultados obtidos no trabalho de Ravagnani et al. (2009) e Ling (2009) com os resultados obtidos na simulação com o COCO que podem ser explicadas devido às aproximações feitas pelo simulador.

**Tabela 1** – Dados de entrada e saída no software HYSYS®, trabalho de Ravagnani et al.

| Grandeza / LINHA            | ALIMENTAÇÃO | SOLVENTE | ETANOL PURO | FUNDO    | UNIDADE |
|-----------------------------|-------------|----------|-------------|----------|---------|
| Temperatura                 | 351,2900    | 298.15   | 351,3100    | 428,1500 | K       |
| Pressão                     | 101,3250    | 101,3250 | 101,3250    | 101,3250 | kPa     |
| Vazão Molar                 | 100,0000    | 300,0000 | 85,0000     | 315,0000 | mol/h   |
| Fração Molar Etanol         | 0,8500      | 0,0000   | 0,9908      | 0,0025   |         |
| Fração Molar Água           | 0,1500      | 0,0000   | 0,0092      | 0,0451   |         |
| Fração Molar Etileno-glicol | 0,0000      | 1,0000   | 0,0000      | 0,9524   |         |

**Tabela 2** - Dados de entrada e saída no software COCO simulador.

| Grandeza / LINHA            | ALIMENTAÇÃO | SOLVENTE | ETANOL PURO | FUNDO    | UNIDADE |
|-----------------------------|-------------|----------|-------------|----------|---------|
| Temperatura                 | 347,9060    | 298.15   | 351,1120    | 442,8870 | K       |
| Pressão                     | 101,3250    | 101,3250 | 101,3250    | 101,3250 | kPa     |
| Vazão Molar                 | 100,0000    | 300,0000 | 85,0633     | 314,9370 | mol/h   |
| Fração Molar Etanol         | 0,8500      | 0,0000   | 0,9900      | 0,0025   |         |
| Fração Molar Água           | 0,1500      | 0,0028   | 0,0002      | 0,0476   |         |
| Fração Molar Etileno-glicol | 0,0000      | 0,9972   | 0,0098      | 0,9499   |         |





**Tabela 3 - Dados de entrada e saída no software COCO simulador.**

|                       | Alimentação | Benzeno   | Fundo Coluna 1 | Tolueno   | O- Xileno | Unidade |                       | Taxa de Calor | Unidade |
|-----------------------|-------------|-----------|----------------|-----------|-----------|---------|-----------------------|---------------|---------|
| Temperatura           | 0,50000     | 0,37000   | 0,57000        | 0,13000   | 0,31000   | atm     | Condensador 1ª Coluna | 27,8645       | MW      |
| Pressão               | 358,00000   | 323,46200 | 380,15100      | 324,57600 | 378,17800 | K       | Reaquecedor 1ª Coluna | 25,0400       | MW      |
| Vazão Molar           | 1,00000     | 0,30610   | 0,69390        | 0,29941   | 0,39450   | kmol/s  | Condensador 2ª Coluna | 27,4711       | MW      |
| Fração Molar Benzeno  | 0,30000     | 0,97907   | 0,00045        | 0,00104   | 0,00000   |         | Reaquecedor 2ª Coluna | 24,5300       | MW      |
| Fração Molar Tolueno  | 0,30000     | 0,02093   | 0,42310        | 0,97957   | 0,00076   |         |                       |               |         |
| Fração Molar O-Xileno | 0,40000     | 0,00000   | 0,57645        | 0,01939   | 0,99924   |         |                       |               |         |

**Tabela 4 - Dados de entrada e saída no software Aspen®, trabalho de Ling.**

|                       | Alimentação | Benzeno   | Fundo Coluna 1 | Tolueno   | O- Xileno | Unidade |                       | Taxa de Calor | Unidade |
|-----------------------|-------------|-----------|----------------|-----------|-----------|---------|-----------------------|---------------|---------|
| Temperatura           | 0,50000     | 0,37000   | 0,57000        | 0,13000   | 0,31000   | atm     | Condensador 1ª Coluna | 27,8800       | MW      |
| Pressão               | 358,00000   | 322,00000 | 380,00000      | 322,00000 | 378,00000 | K       | Reaquecedor 1ª Coluna | 25,0400       | MW      |
| Vazão Molar           | 1,00000     | 0,30100   | 0,69900        | 0,29600   | 0,40300   | kmol/s  | Condensador 2ª Coluna | 27,8100       | MW      |
| Fração Molar Benzeno  | 0,30000     | 0,99000   | 0,00300        | 0,00600   | 0,00000   |         | Reaquecedor 2ª Coluna | 24,5300       | MW      |
| Fração Molar Tolueno  | 0,30000     | 0,01000   | 0,42500        | 0,99000   | 0,10000   |         |                       |               |         |
| Fração Molar O-Xileno | 0,40000     | 0,00000   | 0,57200        | 0,00400   | 0,99000   |         |                       |               |         |

## Conclusões

A eficiência do mesmo pode ser comprovada pelos resultados obtidos no decorrer deste trabalho, que foram muito próximos. Enquanto os valores das licenças dos softwares Aspen® e Hysys® para um único computador são de aproximadamente R\$5.000,00, e R\$7.000,00, respectivamente, o COCO simulador é um software gratuito. Sendo assim, o COCO aparece como uma ferramenta alternativa que deve ser utilizada e difundida no meio acadêmico, já que aproximações para estado estacionário são comumente utilizadas.

## Agradecimentos

CNPq, Fundação Araucária, Prof. Dr. Wagner André dos Santos Conceição.

## Referências

BRAUNSCHWEIG B. et al. **The use of CAPE-OPEN interfaces for interoperability of Unit Operations and Thermodynamic Packages in Process Modelling.** ERTC Computing, Paris, France. 2002.

LING, H.; LUYBEN, W. L., **New Control Structure for Divided-Wall Columns.** 2009.

RAVAGNANI, M.A.S.S. et al., **Anhydrous ethanol production by extractive distillation: A solvent case study.** 2009.

