

## SIMULAÇÃO ESTÁTICA E DINÂMICA DE UMA DESTILAÇÃO BINÁRIA IDEAL EM SCILAB

Luiz Henrique Favaro Bachega (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Caliane Bastos  
Borba Costa (Orientadora), e-mail: cbbcosta@uem.br

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

**Área e subárea do conhecimento: Engenharia Química / Processos Industriais de Engenharia Química**

**Palavras-chave:** Simulação estática, Simulação dinâmica, Coluna de destilação binária.

### Resumo:

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um código para a simulação estática e dinâmica de uma destilação binária ideal em programa livre e *open source*, de modo a incentivar o uso de ferramentas gratuitas de aprendizagem. A codificação foi feita utilizando o software Scilab. As equações referentes ao modelo estacionário e dinâmico foram codificadas, de modo que o usuário pode simular o estado estacionário referente às entradas fornecidas e, em seguida, verificar o estado dinâmico do sistema frente a perturbações na vazão de refluxo.

### Introdução

Realizar a simulação de um processo industrial é de extrema importância para um Engenheiro Químico ou estudante da área. O desenvolvimento de um modelo matemático de uma operação unitária conhecida pode permitir que se preveja o estado estacionário ou até mesmo o seu comportamento dinâmico. A partir de um modelo matemático, pode-se fazer a simulação do processo, e os benefícios para a aprendizagem que a simulação do processo pode trazer terão maior alcance se a codificação do modelo matemático for realizada em ferramenta de licença gratuita.

Neste trabalho, a destilação binária ideal foi selecionada como caso de estudo para desenvolvimento de código de modelagem. O Scilab foi o *software* escolhido para tal, uma vez que é de código aberto e licença gratuita. Na abordagem, primeiramente, calcula-se o estado estacionário a partir dos parâmetros especificados pelo usuário. Em seguida, solicita-se que o usuário indique um percentual de variação para a vazão de refluxo e o comportamento dinâmico da fração molar do componente leve na fase líquida em cada estágio é calculado para os valores, também especificados

pele usuário, de quantidade de matéria líquida retida em cada estágio da operação unitária.

## Materiais e métodos

O modelo matemático foi baseado em Bequette (1998) e desenvolvido para uma coluna com  $N$  estágios, sendo o primeiro o tambor de refluxo,  $NF$  o estágio de alimentação e o último estágio, localizado no refeedor, representado por  $NS$ . O modelo assume que existe, em cada estágio, equilíbrio entre as fases líquida e vapor. O componente leve é utilizado como referência, sendo  $x$  e  $y$  as suas frações nas fases líquida e vapor respectivamente. Para uma mistura ideal, a relação de equilíbrio de fases baseando-se na volatilidade relativa entre os compostos,  $\alpha$ , pode ser expressa conforme a Equação 1.

$$y = \frac{\alpha x}{1 + (\alpha - 1)x} \quad (1)$$

Em cada estágio dentro da coluna existe uma quantidade de material líquido retido ( $M_T$ ), que é assumido não variar com o tempo. Um balanço material para o componente leve no estágio genérico  $i$  leva à Equação 2.

$$\frac{dM_T x_i}{dt} = L_{i-1} x_{i-1} + V_{i+1} y_{i+1} - L_i x_i - V_i y_i \quad (2)$$

em que as correntes que deixam um estágio genérico  $i$  têm vazão molar igual a  $V_i$  e  $L_i$  e fração molar do componente leve igual a  $y_i$  e  $x_i$  para as correntes vapor e líquido, respectivamente. Já as correntes vapor e líquido que chegam nesse estágio têm vazão molar igual  $V_{i+1}$  e  $L_{i-1}$ , respectivamente, e fração molar do componente leve igual  $y_{i+1}$  e  $x_{i-1}$ . Considerou-se o transbordamento equimolar em cada seção da coluna, ou seja,  $V_i = V_{i+1}$  e  $L_i = L_{i-1}$ . Conhecendo-se a qualidade da corrente de alimentação, representada por  $q_f$  ( $q_f = 1$  para líquido saturado), pode-se calcular a vazão molar da corrente de vapor e da corrente líquida que deixam o estágio de alimentação (sendo  $F$  a vazão de alimentação):

$$V_{NF} = V_{NF+1} + F(1 - q_f) \quad (3)$$

$$L_{NF} = L_{NF-1} + Fq_f \quad (4)$$

Equações de balanço material (não explicitadas, por questão de espaço) permitem que sejam calculados os valores para as correntes internas de líquido e vapor em cada seção a partir das especificações fornecidas pelo usuário. O modelo é formado por  $2NS+7$  equações ( $NS$  referentes à aplicação da Equação 1 a cada estágio da coluna,  $NS$  equações pela aplicação da Equação 2 a cada estágio da coluna, as Equações 3 e 4 e mais cinco equações de balanço não explicitadas) e  $2NS + 13$  variáveis, sendo necessário, portanto, conhecidos os valores de  $NS$  e  $NF$ , a especificação de seis variáveis. No código desenvolvido, o usuário deve especificar, além de  $NS$  e  $NF$ ,  $\alpha$ ,  $F$ ,  $q_f$ ,  $z_f$  (a composição da alimentação), a vazão de refluxo e a vazão de destilado. Para obter os valores das variáveis no estado estacionário, utilizou-se uma função do Scilab chamada *fsolve*, capaz de encontrar o zero de funções. Para o modelo dinâmico, o usuário deve ainda especificar a quantidade de material líquido retido nos estágios e a porcentagem que se deseja perturbar a vazão de refluxo. O estado inicial é o

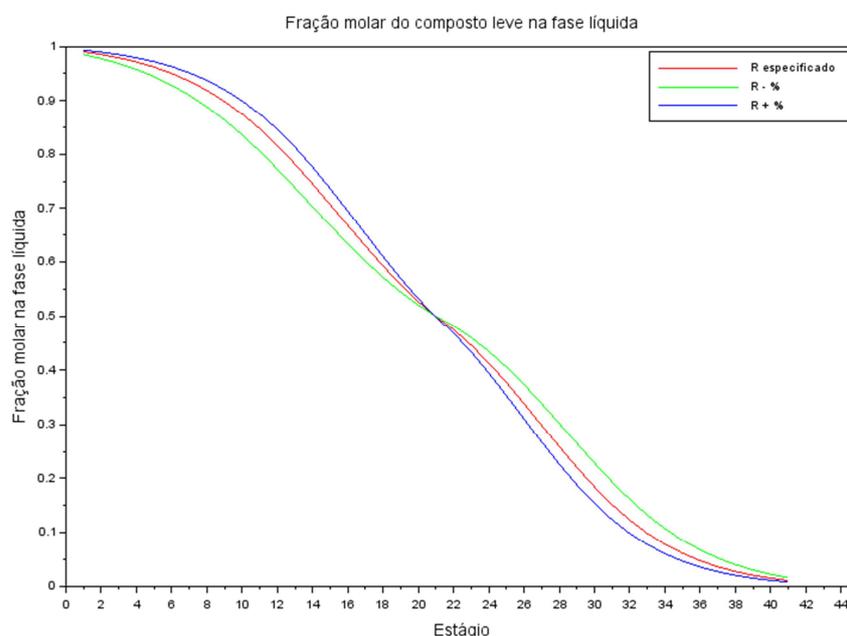
estado estacionário alcançado com as especificações fornecidas e resolvem-se as equações diferenciais do modelo pelo Método de Runge-Kutta de quarta ordem por meio do comando *ode* do Scilab.

## Resultados e Discussão

Para ilustrar a utilização do código desenvolvido, foram utilizadas como especificação os valores da Tabela 1. A Figura 1 mostra a fração molar do componente leve na fase líquida em cada estágio da coluna no estado estacionário para os valores especificados (Tabela 1) e para vazão de refluxo com variação de  $\pm 10\%$  em relação à especificada. Observa-se que maior razão de refluxo leva a maior pureza do destilado (maior  $x$  no estágio 1) e, como consequência, produto de fundo mais pobre no componente leve (menor  $x$  no estágio 41). Nota-se ainda que o ganho do processo não é constante, característica de sistema não linear.

Tabela 1: Especificações utilizadas para a simulação.

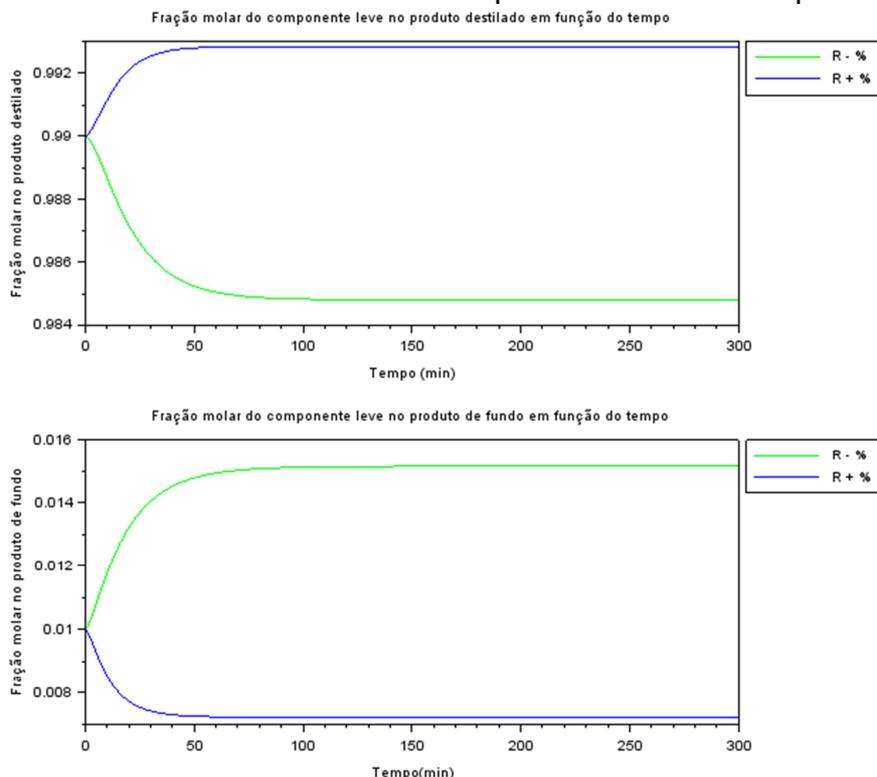
Especificação	Valor	Especificação	Valor
$\alpha$	1,5	Vazão de refluxo (mol/min)	2,706
$F$ (mol/min)	1,0	Vazão de destilado (mol/min)	0,5
$z_f$	0,5	Nº de estágios	41
$q_f$	1,0	Estágio de alimentação	21



**Figura 1:** Perfil de fração molar do componente leve na fase líquida ao longo da coluna para o valor especificado de vazão de refluxo e para vazões de refluxo alteradas em 10%.

A Figura 2 representa o comportamento dinâmico da fração molar do componente leve no produto destilado e no produto de fundo para as mesmas perturbações na vazão de refluxo, partindo-se do estado estacionário referente às especificações da Tabela 1. Para gerar a Figura 2, especificou-

se que a quantidade de material líquido retido nos estágios dentro da coluna era de 0,5 mol e no tambor de refluxo e no refeedor era de 5 mol. Percebe-se um comportamento não oscilatório e que o tempo necessário para se alcançar um novo estado estacionário depende do sentido da perturbação.



**Figura 2:** Comportamento dinâmico da fração molar do componente leve no destilado e no produto de fundo com perturbações de  $\pm 10\%$  na vazão de refluxo.

## Conclusões

Com a codificação desenvolvida foi possível simular a operação unitária selecionada. A simulação permite antecipar comportamentos e obter resultados próximos ao real, ajudando muitas vezes um profissional ou estudante de Engenharia Química a entender o processo e resolver possíveis problemas. Para o caso estudado, pela simulação estática com diferentes vazões de refluxo, fica evidente a não linearidade do sistema. Ainda, a simulação dinâmica permite identificar um comportamento não oscilatório e o tempo necessário para alcançar um novo estado estacionário.

## Agradecimentos

Os autores agradecem a UEM e o CNPq.

## Referências

BEQUETTE, B. W. **Process Dynamics: Modeling, Analysis, and Simulation**. Upper Saddle River: Prentice Hall PTR, 1998.