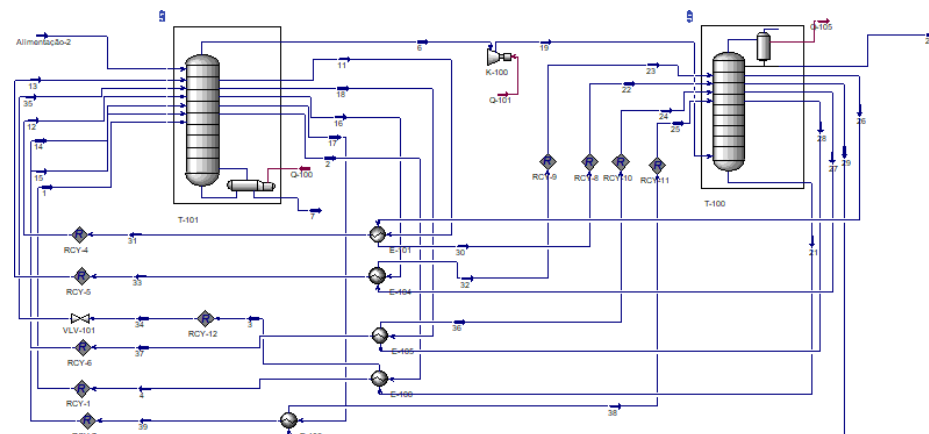




ISEL

INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA



Simulação de Colunas de Destilação com Integração Interna de Calor

RÚBEN DA COSTA PIRES

(Licenciado em Engenharia Química e Biológica – Ramo de Química)

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre
em Engenharia Química e Biológica – Perfil de Processos Químicos

Orientadores:

Doutor João Miguel Alves da Silva
Doutor Isabel Maria da Silva João

Júri

Presidente: Doutor José Augusto Paixão Coelho
Vogais:

Doutor Rui Manuel Gouveia Filipe
Doutor Teodoro José Pereira Trindade
Doutor João Miguel Alves da Silva

Novembro de 2023

Instituto Superior de Engenharia de Lisboa

Área Departamental de Engenharia Química

Simulação de Colunas de Destilação com Integração Interna de Calor

Rúben da Costa Pires

(Licenciado em Engenharia Química e Biológica – Ramo de Química)

Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre
em Engenharia Química e Biológica – Perfil de Processos Químicos

Orientadores

Doutor João Miguel Alves da Silva
Doutora Isabel Maria da Silva João

Júri:

Presidente: Doutor José Augusto Paixão Coelho

Vogais:

Doutor Rui Manuel Gouveia Filipe
Doutor Teodoro José Pereira Trindade
Doutor João Miguel Alves da Silva

Novembro de 2023

Agradecimentos

Agradeço ao Doutor João Miguel Alves da Silva e à Doutora Isabel Maria da Silva João, pela orientação preciosa, pela disponibilidade, incentivo, motivação e apoio ao longo da elaboração deste projeto.

À minha família, em especial ao meu pai, Paulo, à minha mãe, Ângela e ao meu avô Alberto por sempre acreditarem em mim.

Resumo

Nos últimos anos, o consumo energético mundial tem vindo a aumentar exponencialmente sem sinais de estabilização. As indústrias químicas têm um papel preponderante neste consumo, pelos vários processos que requerem grandes quantidades de energia, como a operação unitária de destilação, que representa mais de 40 % do consumo energético da indústria.

A destilação continua a ser o principal processo de separação de misturas líquidas pela sua simplicidade e conveniência. No entanto, é um processo bastante dispendioso em termos de investimento e operação e com um grande impacto energético. Posto isto, devem ser aplicados métodos de sistemas de destilação que possibilitem um aumento da eficiência energética.

As colunas de destilação com integração interna de calor constituem uma das tecnologias mais eficazes ao nível de processos industriais, por reforçarem os processos de separação de misturas e produzirem poupanças energéticas superiores a métodos de destilação convencional. Neste âmbito, a presente dissertação foca-se na simulação de um processo de destilação com integração interna de calor, de uma mistura benzeno/tolueno, com recurso ao software de simulação de processos HYSYS[®], baseando-se em modelos inicialmente desenvolvidos em 1970.

Após a realização dos diversos casos de estudo, onde se pretendeu otimizar ambos os sistemas de destilação, verificou-se que o objetivo principal da implementação de sistemas com integração interna de calor foi cumprido. Apesar de inicialmente ser necessário um investimento adicional, dado que o sistema com integração requer mais equipamentos, este comprovou-se rentável, sendo possível obter poupanças na ordem dos 12 M €, resultando num *payback time* inferior a 1 ano.

Comparativamente ao sistema tradicional, os resultados obtidos para a destilação com integração interna de calor revelam uma diminuição do consumo energético em aproximadamente 40 %, o que reflete a necessidade de implementação deste tipo de soluções, como forma de contributo para o aumento da eficiência energética destes processos.

Palavras-chave: Consumo Energético, Destilação, Destilação com Integração de Calor, Eficiência Energética

Abstract

In recent years, global energy consumption has been increasing exponentially, with no signs of stabilizing. The chemical industry has a preponderant role in this consumption due to the various processes that require large amounts of energy, such as the unit operation of distillation, which represents more than 40 % of energy consumption.

Distillation is still the main process for separating liquid mixtures, because of its simplicity and convenience. However, it is a very expensive process, regarding overall investment and performance, while having a vast energetic impact. That said, complex distillation system methods that allow for increased energy efficiency should be applied.

Internal heat integrated distillation columns represent one of the most effective technologies for industrial processes since they enhance mixture separation processes and also generate greater energy savings than other methods. Within this framework, this dissertation focuses on the simulation of a distillation process with internal heat integration, of a benzene/toluene mixture using the HYSYS® process simulation software, based on models initially developed in 1970.

After carrying out the various case studies, which aimed to optimize both distillation systems, it was found that the main objective of implementing systems with internal heat integration was met. Although an additional investment was initially required, given that the integrated system requires more equipment, it proved to be profitable, with savings of around €12 M, resulting in a payback time of less than 1 year.

Compared to the traditional system, the results obtained for internal heat integrated distillation column show a reduction in energy consumption by approximately 40%, which reflects the need to implement this type of approach in order to generate an increase in energy efficiency of these processes.

Keywords: Energy Consumption, Distillation, Internal Heat Integrated Distillation, Energy Efficiency

Índice

Agradecimentos	I
Resumo	II
Abstract.....	III
Índice de Figuras.....	VI
Índice de Tabelas	XI
Abreviaturas e Acrónimos	XIII
Nomenclatura.....	XIV
1. Enquadramento teórico	- 15 -
Introdução	- 2 -
1.1. Eficiência Energética	- 4 -
1.2. Simulação de processos na indústria química.....	- 5 -
1.3. Destilação.....	- 6 -
1.4. Colunas de destilação com aumento de eficiência energética	- 11 -
1.4.1. Colunas de destilação com integração interna de calor	- 13 -
1.5. Destilação de Benzeno-Tolueno	- 20 -
1.5.1. Benzeno	- 21 -
1.5.2. Tolueno	- 22 -
1.6. Otimização de Processos.....	- 24 -
1.7. Avaliação Financeira e Económica.....	- 24 -
1.7.1. Avaliação financeira	- 24 -
1.7.2. Avaliação económica	- 26 -
2. Metodologia da Simulação	- 29 -
2.1. Objetivo	- 30 -
2.1.1. Objetivos específicos	- 30 -
2.2. Implementação do processo no simulador Aspen HYSYS®.....	- 30 -
2.2.1. Implementação do sistema de destilação convencional	- 31 -
2.2.2. Implementação do sistema de destilação com integração interna de calor	- 35 -
3. Resultados	- 40 -
3.1. Otimização de sistemas.....	- 41 -
3.1.1. Otimização de um sistema de destilação.....	- 41 -
3.2. Otimização da coluna de destilação convencional (caso de estudo I).....	- 42 -
3.2.1. Influência da perda de carga no sistema de destilação convencional	- 47 -
3.3. Otimização da coluna de destilação com integração interna de calor (caso de estudo II)	- 48 -
3.3.1. Influência da perda de carga no sistema de destilação com integração interna de calor	- 54 -
3.4. Comparação entre o sistema de destilação convencional e o sistema de destilação com integração interna de calor.....	- 55 -

3.4.1. Caso de estudo III- Condições Ideais.....	- 55 -
3.4.2. Caso de estudo IV – Condições Iniciais.....	- 59 -
3.4.3. Aumento do n.º de pratos do sistema (caso de estudo V)	- 62 -
3.4.4. Aumento da pressão operatória do sistema (caso de estudo VI).....	- 66 -
3.4.5. Aumento da pressão do sistema (caso de estudo VII).....	- 70 -
3.5. Análise de Sensibilidade	- 74 -
3.5.1. Custo de eletricidade.....	- 74 -
3.5.1.1. Acréscimo de 5 % face ao valor do custo da eletricidade (caso de estudo VIII)	- 74 -
3.5.1.2. Acréscimo de 10 % face ao valor do custo da eletricidade (caso de estudo IX).....	- 75 -
3.5.2. Custo do gás natural.....	- 77 -
3.5.2.1. Acréscimo de 5 % face ao valor do custo do gás natural (caso de estudo X)	- 77 -
3.5.2.2. Acréscimo de 10 % face ao valor do custo do gás natural (caso de estudo XI).....	- 78 -
3.6. Implementação do processo a escala industrial (caso de estudo XII – Condições Ideais).....	- 79 -
3.6.1. Aumento do número de pratos para um sistema de destilação a nível industrial (caso de estudo XIII – Condições Iniciais).....	- 83 -
3.6.2. Aumento do número de pratos do sistema a escala industrial (caso de estudo XIV)	- 87 -
3.7. Influência do caudal molar de alimentação nos sistemas de destilação	- 92 -
4. Conclusões e Perspetivas Futuras	- 97 -
Referências Bibliográficas.....	- 100 -

Índice de Figuras

Figura 1 - Consumo energético anual, e previsões futuras (U.S. Energy Information Administration, 2017)	- 4 -
Figura 2 - Representação esquemática de uma coluna de destilação convencional.....	- 7 -
Figura 3 - Diagrama T vs xy (diagrama de pontos de ebulição), a vaporização parcial de uma mistura líquida (L0) de A+B (Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos, 2007)	- 8 -
Figura 4 - Traçar dos andares teóricos da coluna de destilação, Método de McCabe-Thiele (Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos, 2007).....	- 9 -
Figura 5 - Coluna de parede dividida, implementada por Wright	- 12 -
Figura 6 - Coluna de destilação com integração interna de calor	- 14 -
Figura 7 - Configuração de duas colunas, proposta por Haselden (Fang et al., 2019)	- 16 -
Figura 8 - Coluna dividida, proposta por Seader (Seader, 1980).....	- 16 -
Figura 9 -Placas de troca de calor, para a coluna proposta por Hugill (Hugill, 2003).....	- 17 -
Figura 10 - Coluna de placas e aletas, proposta por Hugill	- 17 -
Figura 11 - Coluna concêntrica, proposta por Gavind (Gavind, 1986).....	- 18 -
Figura 12 - Pratos de troca de calor, adicionados por Graauw et al (Graauw et al., 2010)	- 19 -
Figura 13 - Coluna de destilação de cascos e tubos com integração de calor (Aso et al., 2003).....	- 20 -
Figura 14 - Estrutura molecular do benzeno.....	- 21 -
Figura 15 - Estrutura molecular do tolueno	- 22 -
Figura 16 - Diagrama Líquido-Vapor, para a mistura benzeno/tolueno a 1 atm	- 23 -
Figura 17 - Componentes adicionados no simulador Aspen HYSYS®	- 31 -
Figura 18 - Pacote de propriedades escolhido para o sistema.....	- 31 -
Figura 19 - Condições da alimentação.....	- 32 -
Figura 20 - Razão molar da alimentação	- 32 -
Figura 21 - Flowsheet da coluna de destilação	- 33 -
Figura 22 - Separação desejada para o sistema.....	- 33 -
Figura 23 - Internals da Coluna de Destilação.....	- 34 -
Figura 24 - Flowsheet do sistema implementado para a coluna de destilação convencional	- 34 -
Figura 25 - Flowsheet da Zona de Esgotamento com Ebulidor da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor.....	- 35 -
Figura 26 - Flowsheet da Zona de Retificação com Condensador da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor.....	- 35 -
Figura 27 - Especificações do permutador de calor.....	- 36 -
Figura 28 - Especificações do permutador de calor.....	- 37 -
Figura 29 - Especificações da Zona de Retificação da Coluna.....	- 37 -
Figura 30 - Flowsheet para a Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor.....	- 38 -

Figura 31 - Custos de Utilidades (eixo principal) e Custos de Equipamento/Instalação (eixo secundário) em função da pressão do sistema (atm), referentes ao caso de estudo I.....	- 43 -
Figura 32 - Energia Total em função da pressão do sistema, referente ao caso de estudo I.....	- 43 -
Figura 33 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da Temperatura da Alimentação do sistema (°C), referentes ao caso de estudo I.....	- 44 -
Figura 34 - Energia Total em função da temperatura de alimentação do sistema (°C), referente ao caso de estudo I	- 44 -
Figura 35 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função do Número de Pratos da coluna (NT), referentes ao caso de estudo.....	- 44 -
Figura 36 - Energia Total em função do Número de Pratos da coluna (NT), referente ao caso de estudo I-	45 -
Figura 37 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da entrada do prato de alimentação (NF), referentes ao caso de estudo I	- 45 -
Figura 38 - Energia Total em função em função da entrada do prato de alimentação (NF), referente ao caso de estudo I.....	- 45 -
Figura 39 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da pressão da Zona de Retificação do sistema (atm), referentes ao caso de estudo II.....	- 49 -
Figura 40 - Energia Total em função da pressão da Zona de Retificação do sistema (atm), referente ao caso de estudo II.....	- 49 -
Figura 41 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da Temperatura da Alimentação do sistema (°C), referentes ao caso de estudo II.....	- 50 -
Figura 42 - Energia total em função da Temperatura de Alimentação do sistema (°C), referente ao caso de estudo II	- 50 -
Figura 43 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função do Número de Pratos (NT) do sistema, referentes ao caso de estudo II.....	- 51 -
Figura 44 - Energia total em função do Número de Pratos da coluna (NT), referente ao caso de estudo II-	51 -
Figura 45 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função do ΔT_{min} de cada permutador de calor, referentes ao caso de estudo II	- 52 -
Figura 46 - Energia total em função do ΔT_{min} de cada permutador de calor, referente ao caso de estudo II-	52 -
Figura 47 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 56 -
Figura 48 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 56 -
Figura 49 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 57 -

Figura 50 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 57 -
Figura 51 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 58 -
Figura 52- Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 59 -
Figura 53 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 60 -
Figura 54 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 60 -
Figura 55 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 61 -
Figura 56 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 61 -
Figura 57 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC12.....	- 63 -
Figura 58 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 63 -
Figura 59 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 64 -
Figura 60 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 64 -
Figura 61 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 65 -
Figura 62 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 67 -
Figura 63 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 67 -
Figura 64 - Custos de Instalações, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 68 -
Figura 65- Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 68 -
Figura 66 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 69 -
Figura 67 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 71 -

Figura 68 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 71 -
Figura 69 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 72 -
Figura 70 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 72 -
Figura 71 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 73 -
Figura 72 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo VIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 75 -
Figura 73 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo IX, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 76 -
Figura 74 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo X, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 77 -
Figura 75 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 78 -
Figura 76 - Alimentação do sistema para um processo a escala industriais	- 79 -
Figura 77 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 80 -
Figura 78 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 80 -
Figura 79 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 81 -
Figura 80 - Energias despendidas pelo ebulidor e pelo condensador, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 81 -
Figura 81 - Energia total necessária, referente ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 82 -
Figura 82 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 84 -
Figura 83 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 84 -
Figura 84 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 85 -
Figura 85 - Energias despendidas pelo ebulidor e pelo condensador, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 85 -
Figura 86 - Energia total necessária, referente ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 86 -

Figura 87 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 88 -
Figura 88 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 88 -
Figura 89 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 89 -
Figura 90 - Energias despendidas pelo ebulidor e pelo condensador, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC.....	- 89 -
Figura 91 - Energia total necessária, referente ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC	- 90 -
Figura 92 - Custos de Equipamento em função do caudal molar do sistema	- 92 -
Figura 93 - Custos de Instalação em função do caudal molar do sistema	- 93 -
Figura 94 - Custos de Utilidades em função do caudal molar do sistema 1,2,3	- 93 -
Figura 95 – Energia despendida pelo sistema, em função do caudal molar do sistema	- 94 -
Figura 96 – Anos de recuperação do investimento em função do caudal molar do sistema.....	- 94 -
Figura 97 - Poupanças anuais em função do caudal molar de alimentação	- 95 -

Índice de Tabelas

Tabela 1 - Características físicas e químicas do benzeno	- 22 -
Tabela 2 - Características físicas e químicas do tolueno	- 23 -
Tabela 3 - Condições iniciais para a alimentação da Coluna de Destilação Convencional, referente ao caso de estudo I.....	- 42 -
Tabela 4 - Casos de estudo para a otimização do sistema de destilação convencional	- 43 -
Tabela 5 - Condições Operatórias ideais para o sistema de Destilação Convencional, referente ao caso de estudo I -	46 -
Tabela 6- Comparação entre o sistema de destilação convencional sem e com perda de carga, para as diferentes variáveis	- 47 -
Tabela 7 - Condições iniciais para a alimentação da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor, referentes ao caso de estudo II	- 48 -
Tabela 8 - Casos de estudo para a otimização do sistema de destilação com integração de calor.....	- 48 -
Tabela 9 - Condições Operatórias ideais para o sistema de Destilação com Integração Interna de Calor, referente ao caso de estudo II.....	- 53 -
Tabela 10 - Comparação entre o sistema de destilação com integração interna de calor sem e com perda de carga, para as diferentes variáveis.....	- 54 -
Tabela 11 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo III-	55 -
Tabela 12 - Condições Operatórias do Sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo III-	55 -
Tabela 13 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo IV-	59 -
Tabela 14 - Condições Operatórias do Sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo IV.....	- 59 -
Tabela 15 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo V-	62 -
Tabela 16 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo V -	62 -
Tabela 17 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo VI-	66 -
Tabela 18 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo VI.....	- 66 -
Tabela 19-Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo VII-	70 -
Tabela 20 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo VII	- 70 -
Tabela 21 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo XII-	79 -
Tabela 22 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XII	- 80 -
Tabela 23 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo XIII-	83 -

Tabela 24 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XIII	- 83 -
Tabela 25 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XIV	- 87 -
Tabela 26 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XIV	- 87 -
Tabela 27 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional, para o estudo da influência do caudal molar.....	- 92 -
Tabela 28 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração de Calor, para o estudo da influência do caudal molar.....	- 92 -

Abreviaturas e Acrónimos

HIDiC - (Internally) Heat Integrated Distillation Column

Nomenclatura

A_j - Área de transferência de calor entre os estágios emparelhados

B - Caudal/corrente de produto de fundo da coluna de destilação

D - Caudal/corrente de produto de topo da coluna de destilação

F - Caudal/corrente de alimentação ao sistema

H_j - Entalpia de vapor no estágio j

h_j - Entalpia do líquido no estágio j

L_j - Caudal de líquido à saída do estágio j

N_F - Entrada do prato de alimentação do sistema

N_T - Número de pratos totais do sistema

ΔP - Perda de carga do sistema

q - Fração molar do líquido saturado na corrente de alimentação

Q_{Cond} - Energia/Calor gasto pelo condensador

Q_{Reb} - Energia/Calor gasto pelo ebulidor

R - Razão de refluxo do sistema

Stripping Section - Zona de Esgotamento da Coluna

Rectifying Section - Zona de Retificação da Coluna

ΔT_{min} - Temperatura mínima da troca de calor entre as duas zonas da coluna

U_j - Coeficiente global de transferência de calor

V_j - Caudal de Vapor à saída do estágio j

V_B - Razão de vapor do sistema

W_j - Caudal de Vapor lateral retirado do estágio j

x_B - Fração molar do componente no resíduo

x_D - Fração molar do componente no destilado

x_{ij} - Fração molar do componente i no estágio j no estado líquido

y_{ij} - Fração molar do componente i no estágio j no estado de vapor

z_F - Fração molar do produto que alimenta a coluna

1. Enquadramento teórico

Introdução

A destilação, de todas as operações unitárias e de processos químicos, é o método de separação mais aplicado em contexto industrial. É um processo físico que tem como objetivo separar misturas líquidas, baseando-se na volatilidade relativa dos seus componentes (Kiss, 2014).

Embora, seja muito provável que continue a ser a tecnologia de separação mais utilizada nos próximos tempos, não há dúvida que é necessário realizar mudanças radicais na técnica de destilação convencional, de forma a satisfazer as exigências da sociedade moderna, consciente dos gastos energéticos (Kiss, 2014).

De forma a melhorar a eficiência energética e os custos operatórios/capitais do processo de destilação, têm surgido diferentes técnicas de destilação com integração energética, fundamentadas no conceito de integração de calor, introduzido há mais de 70 anos.

Uma destas técnicas é a destilação com integração interna de calor, que consiste na transferência de energia entre as duas secções da coluna. A transferência ocorre entre a secção de esgotamento, que opera a uma maior pressão e temperatura, e a secção de retificação.

Embora a investigação sobre esta técnica tenha chegado a uma fase avançada de testes à escala industrial, foram apenas desenvolvidas algumas metodologias de design, o que demonstra que este campo ainda não está claramente otimizado. Posto isto, são necessários esforços sucessivos para a possível evolução a grande escala desta metodologia (Gadalla et al., 2004). A nível industrial não existem muitos casos onde se verifica a aplicação desta técnica, o que leva à necessidade da presente dissertação.

A presente dissertação tem como principal objetivo a comparação entre o sistema convencional de destilação e o sistema com integração interna de calor, através do software Aspen HYSYS®, onde será possível determinar as poupanças energéticas e económicas, para uma indústria mais rentável.

O documento encontra-se dividido em quatro capítulos:

Capítulo 1 – Enquadramento teórico: Exposição da informação, que sustenta a simulação desenvolvida a partir do software Aspen HYSYS®, obtida através da consulta e análise da bibliografia consultada, que se considerou relevante para a compreensão do tema em estudo. Destacam-se os subcapítulos, Eficiência Energética, Simulação de Processos na Indústria Química, Destilação, Colunas de Destilação com Aumento de Eficiência Energética, Mistura a ser tratada, Otimização de Processos e Avaliação Económica e Avaliação Financeira.

Capítulo 2 – Simulação: Descrição da otimização dos sistemas de destilação convencional e destilação com integração interna de calor, realizadas no simulador Aspen HYSYS®.

Capítulo 3 – Comparação entre os dois sistemas: Observações sobre os sucessivos casos de estudo comparando os dois sistemas de destilação.

Capítulo 4 – Conclusões e Perspetivas Futuras

1.1. Eficiência Energética

Segundo a *International Energy Agency* (IEA), a eficiência energética pode ser entendida como o “rácio entre o resultado em termos de desempenho, serviços, bens ou energia gerados e a energia utilizada para o efeito”. A rentabilidade energética é essencial para a diminuição do consumo de energia, contribuindo para atingir o objetivo de um desenvolvimento mais sustentável (IEA, 2014).

Com o subsequente desenvolvimento socioeconómico e industrial da sociedade, o consumo energético mundial aumentou exponencialmente sem dar sinais de estabilização. É previsível que este aumento continue nos próximos anos, de acordo com o gráfico apresentado na figura 1.

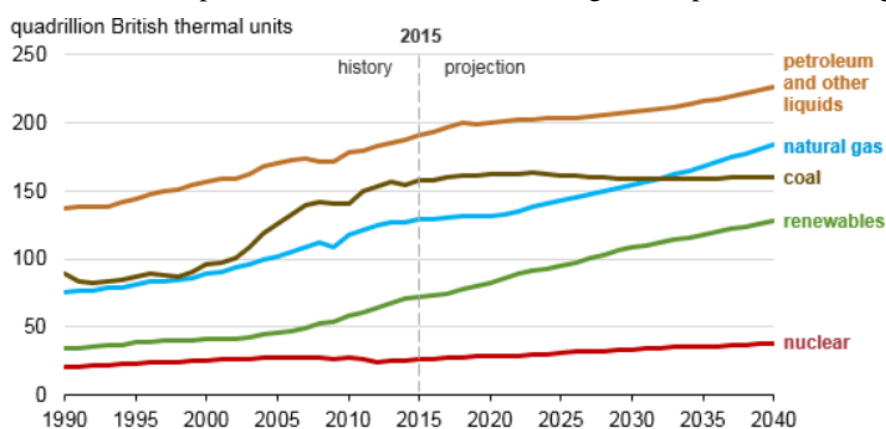


Figura 1 - Consumo energético anual, e previsões futuras (*U.S. Energy Information Administration*, 2017)

Os dados do gráfico da figura 1 preveem que todos os combustíveis, à exceção do carvão, irão apresentar um consumo de energia superior no futuro. Embora as energias renováveis e o gás natural sejam as formas de energia que mais rapidamente crescem no mundo, espera-se que os combustíveis fósseis continuem a ser um dos pilares fundamentais no fornecimento da energia necessária.

A utilização de energia pode ser dividida em três grandes campos - energia elétrica, energia utilizada para aquecimento/arrefecimento e energia para combustíveis. A última categoria poderá vir a sofrer um decréscimo da procura, devido ao desaparecimento futuro dos motores de combustão nas principais cidades europeias (REN 21, 2017).

As principais fontes energéticas continuam a ser os recursos fósseis, nomeadamente o gás natural, o carvão e o petróleo (BP, 2021).

Devido à problemática da escassez de recursos no futuro, tem sido defendido nas últimas décadas, a implementação de estratégias para um desenvolvimento sustentável. John Twidell e Tony Weir, definiram o desenvolvimento sustentável como “a vivência, produção e consumo de forma a satisfazer as necessidades do presente, sem comprometer a capacidade de gerações futuras

colmatarem as suas”. Assim sendo, existe uma procura crescente por recursos que não sejam esgotados pela necessidade presente (Twidell and Weir, 2015).

Dado que o excesso de procura e consumo de energia têm efeitos negativos no meio ambiente, existe a necessidade de utilizar a energia da forma mais eficiente possível, não fazendo qualquer poupança quanto a recursos e tecnologias, o que conduz a menores custos de investimento e operação, com menores impactos ambientais, mantendo o elevado nível de segurança.

Neste sentido, têm vindo a ser feitos esforços significativos, a nível industrial e a nível académico, para o desenvolvimento de processos e metodologias de conceção, que minimizem o desperdício de energia e de subprodutos. A integração de processos tem sido um dos pilares destes desenvolvimentos.

A integração de processos é uma abordagem operacional pertencente ao design de processos que enfatiza a unidade do processo. Pode ser dividida em duas categorias - integração de massa e integração de energia, esta última relacionada com a alocação global de energia, produção e troca de energia em todo o processo.

Antes de avaliar um processo, é necessário conhecer os balanços mássicos e energéticos. Um dos métodos utilizados para a criação de projetos de processos químicos altamente detalhados resulta da utilização de simuladores, como o Aspen HYSYS®. Este simulador é bastante útil na análise rigorosa das diferentes opções de processo, possibilitando várias abordag

1.2. Simulação de processos na indústria química

A simulação de processos tem-se tornado cada vez mais uma ferramenta tecnológica essencial. O desenvolvimento é baseado na modelação de processos e dimensionamento dos equipamentos que geralmente integram uma indústria química. A modelagem de processos é uma das soluções mais requeridas para o desenvolvimento, dimensionamento e operabilidade de equipamentos para as indústrias químicas (Chen and Mathias, 2002).

A análise, projeto, operação, controlo e otimização de colunas de destilação têm sido extensivamente estudados. Até ao aparecimento dos primeiros computadores, foram desenvolvidos métodos gráficos que serviram de auxílio para os cálculos realizados à mão. Desde 1950, o cenário alterou-se e começaram a ser realizadas simulações em computadores analógicos e digitais, para resolver inúmeros problemas de engenharia.

Inicialmente, a maioria dos engenheiros escrevia os seus próprios programas para resolver, tanto as equações não-lineares algébricas, que descrevem o estado estacionário de uma coluna de

destilação, como as equações não-lineares diferenciais ordinárias, que descrevem o seu comportamento dinâmico (Luyben, 2006).

Entre 1960 e 1980, muitas empresas desenvolveram programas de construção de fluxogramas. No entanto, o custo de manutenção e atualização dos *softwares* são elevados e como consequência, poucos ainda estão em uso, e a maioria das empresas depende inteiramente de *softwares* disponíveis comercialmente.

Os programas mais comuns de simulação de processos comerciais incluem o Aspen Plus[®], o CHEMCAD e o DESIGN II para simulações de processos em estado estacionário, e o HYSYS[®], o ASPEN Plus Dynamic, o PRO/II e o UniSim Design para simulação dinâmica de processos (Towler et al., 2008).

O Aspen HYSYS[®] é um software de simulação de processos químicos, desenvolvido pela empresa norte-americana AspenTech[®]. Os vários componentes que integram o software de simulação fornecem uma abordagem extremamente rigorosa para a modelagem em estado estacionário de um processo. Após escolhidas as operações e as propriedades, o software permite modelar o processo com um certo nível de confiança, seguindo a abordagem dos graus de liberdade (AspenTech, 2004).

O sucesso da modelização em qualquer software, como o Aspen HYSYS[®], depende muito da descrição precisa das propriedades químicas, físicas, termodinâmicas e do comportamento das fases das substâncias envolvidas.

1.3. Destilação

Os processos de separação são desde sempre uma etapa fundamental dos processos de fabrico da indústria química. Podem ser realizados através de várias operações unitárias, e a seleção do processo mais adequado para um determinado tratamento depende das características da alimentação a tratar, dos objetivos a atingir e de fatores económicos (Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos, 2007).

A destilação é um processo de separação de misturas eficiente e conveniente, sendo destacada como a operação unitária mais tradicional das indústrias química e petroquímica. Nesta operação de separação, uma mistura de dois ou mais componentes é separada em pelo menos dois produtos, que apresentam composições diferentes das iniciais (Seader, Henley, and Roper, 2011). Consiste numa operação unitária, com o intuito de separar os constituintes de uma mistura líquida, vaporizada ou uma mistura líquido-vapor, através da transferência de calor e massa do líquido para o vapor e do vapor para o líquido. A separação baseia-se na diferença de volatilidade e no princípio de equilíbrio entre as fases líquidas e de vapor dos constituintes.

O valor de volatilidade relativa quantifica a facilidade de vaporização de um componente em relação a outro, tendo em consideração que quanto maior este valor, maior será a tendência de um vaporizar em relação ao outro, facilitando a separação da mistura por destilação. A expressão que determina a volatilidade relativa é apresentada de seguida:

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j} \quad (1)$$

onde K_i e K_j representam a razão de equilíbrio para cada um dos componentes.

O valor de α_{ij} permite ter uma ideia da facilidade da separação por destilação. Quando o valor de α é superior a 1,5, a separação apresenta-se fácil, com uma quantidade de refluxo baixo e um valor de energia baixo. Quando o valor é inferior a 1,15, a separação torna-se difícil, com um valor de energia alto e uma quantidade de refluxo alta.

É assim possível, constatar que quanto maior a pressão de vapor de uma substância, maior será a sua volatilidade, uma vez que existirá uma maior tendência das moléculas passarem do estado líquido para o estado de vapor.

O equipamento básico de um processo de destilação consiste numa coluna, que requer uma alimentação (F), um ebulidor, um condensador e duas correntes de produto, destilado (D) e resíduo (também designado por produto de fundo (B)), como se pode observar na figura 2.

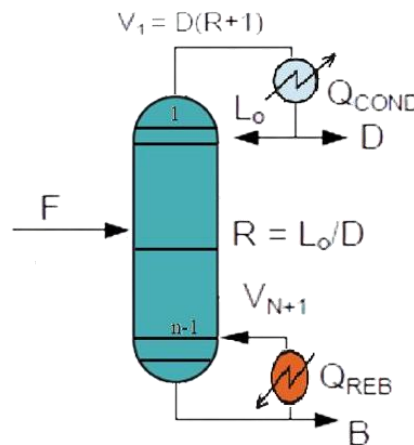


Figura 2 - Representação esquemática de uma coluna de destilação convencional

Numa coluna de destilação convencional, a fase de vapor é formada no ebulidor, onde o calor fornecido evapora uma contracorrente líquida. A contracorrente líquida, resulta da condensação da corrente de vapor que chega ao condensador, onde é removida parte do calor fornecido no ebulidor. Estas duas correntes entram em contacto através de pratos ou enchimento.

O mecanismo em que se baseia a separação por destilação é denominado por equilíbrio líquido/vapor. A facilidade de separação dos componentes através de destilação depende essencialmente da sua volatilidade relativa, sendo a diferença de composição das fases líquida e de vapor a força motriz da operação de destilação.

Quando fornecemos calor a uma mistura líquida, promovendo a sua vaporização parcial, estabelece-se um equilíbrio entre as fases líquida e vapor, para uma dada pressão total, e a composição das duas fases será diferente. Na figura 3, encontra-se representado o diagrama de vaporização parcial de uma mistura líquida de dois compostos A+B (L_0):

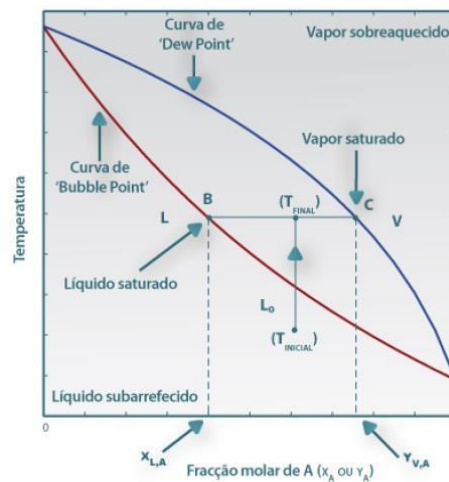


Figura 3 - Diagrama T vs xy (diagrama de pontos de ebulição), a vaporização parcial de uma mistura líquida (L_0) de A+B (Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos, 2007)

Através da análise do diagrama, verifica-se que quando se fornece energia à mistura, L_0 , ocorre a produção de um líquido saturado, L, de composição $x_{L,A}$ e de um vapor saturado, V, de composição $y_{V,A}$. Assim, existe a transição entre a $T_{inicial}$ para uma T_{final} . As frações molares do composto A e B são representadas por x e y, respetivamente, sendo o composto A, o menos volátil e o composto B, o mais volátil (Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos 2007).

O método de projeto mais comum para colunas de destilação, que operam com dois componentes, é o método gráfico de McCabe-Thiele, formulado em 1925. É um método aproximado que combina as curvas de equilíbrio líquido-vapor, com as linhas operatórias, dando a possibilidade de estimar o número de andares de equilíbrio e a razão de refluxo (McCabe et al., 1993) (Perry, Green, and Maloney, 1997).

Primeiramente, o método é desenvolvido através da construção de uma curva xy, onde x e y representam as frações molares no estado líquido e no estado de vapor. Juntamente a esta curva, deve ser construída uma reta de 45° com origem na curva xy. Em seguida, deve ser traçada uma reta denominada de linha q, que se refere às informações da alimentação da coluna, representada pela seguinte equação:

$$y = \left(\frac{q}{q-1}\right)x - \frac{z_F}{q-1} \quad (2)$$

onde q representa a fração molar de líquido saturado na corrente de alimentação e z_F a fração molar do produto que alimenta a coluna. Uma das funções da linha q é servir como referência para o encontro das duas linhas de operação.

O passo seguinte consiste na construção de duas linhas de operação, a linha de retificação (zona superior) e a linha de esgotamento (zona inferior). A linha de retificação é dada pela equação 3 e a linha de esgotamento é dada pela equação 4, que se apresentam de seguida.

$$y = \left(\frac{1}{R+1}\right)x_D - \frac{R}{R+1}x \quad (3)$$

onde R representa a razão de refluxo, que pode ser entendida como a razão entre o caudal da corrente reenviada e o caudal do destilado, e x_D representa a fração molar do componente no destilado

$$y = \left(\frac{V_B+1}{V_B}\right)x - \frac{1}{V_B}x_B \quad (4)$$

onde x_B representa a fração molar do componente no resíduo e V_B representa a razão de vapor.

Após o traçado de todas as linhas no gráfico devem ser traçados degraus com início em x_D na reta de 45°, indo até a curva xy e novamente descendo para a reta. O processo repete-se até chegar ao ponto x_B , ou até que se passe o mesmo, como se pode observar na figura 4:

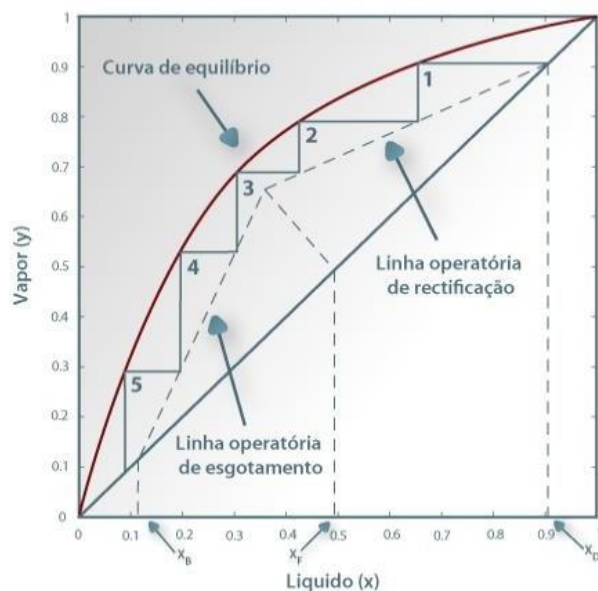


Figura 4 - Traçar dos andares teóricos da coluna de destilação, Método de McCabe-Thiele (Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos, 2007)

As colunas de destilação podem operar em dois modos distintos, contínuo ou descontínuo. No modo contínuo, a alimentação é pré-aquecida até determinado ponto, e introduzida num determinado prato da coluna, para depois ser separada no destilado e no resíduo, ambos obtidos

continuamente no processo. Assume-se assim, que as composições do destilado e de resíduo não variam. Contrariamente, no processo em descontínuo, existe uma variação da composição de resíduo.

Para além do modo de funcionamento da coluna, a destilação pode ser do tipo integral, fracionada ou de Batch. A pureza dos produtos obtidos na destilação depende, tanto do número de andares de equilíbrio na zona de retificação, como da razão de refluxo.

Relativamente à destilação avançada, podemos destacar os processos de destilação extrativa, salina, variação de pressão, azeotrópica e reativa.

A destilação extrativa é aplicada na separação de azeótropos de uma mistura líquida, onde os componentes-chaves têm volatilidades relativas inferiores a 1,1. Utiliza-se, normalmente, um solvente não reativo, de modo a alterar a volatilidade relativa dos componentes chave (Seader, Henley, and Roper, 2011).

A destilação salina requer a utilização de um sal iónico, com o objetivo de alterar a volatilidade relativa dos componentes chave, diretamente na corrente de refluxo (Seader, Henley, and Roper, 2011).

A destilação com variação de pressão é um processo aplicado a azeótropos que alteram a sua composição, quando se altera o gradiente de pressão (Seader, Henley, and Roper, 2011).

A destilação azeotrópica, pode ser dividida em destilação azeotrópica homogénea e heterogénea. A destilação azeotrópica homogénea é realizada quando se pretende separar misturas azeotrópicas com recurso a um arrastador, formando-se um azeótropo, com um ou mais componentes com ponto de ebulição mínimo. O arrastador é introduzido no topo ou na base da coluna, dependendo se o azeótropo é removido na base ou no topo da coluna, respetivamente. Na destilação azeotrópica heterogénea é introduzido um arrastador na coluna, formando-se um azeótropo com ponto de ebulição mínimo. O arrastador é introduzido no topo da coluna, produzindo um azeótropo com duas fases líquidas imiscíveis no escoamento do destilado, após a condensação. Assim, uma fase é reintroduzida na coluna por refluxo, e a outra sai da coluna pelo destilado (Seader, Henley, and Roper, 2011).

Na destilação reativa é introduzida uma substância que irá separar um ou mais componentes da alimentação, reagindo com esses componentes de forma seletiva e irreversível. O produto resultante da reação é destilado e separado dos outros componentes que não reagiram. A reação química é efetuada de forma reversa, numa etapa posterior, de modo a garantir a recuperação do

composto reagente, podendo assim ser introduzido novamente na destilação reativa, juntamente com os componentes da alimentação inicial. Este tipo de destilação também se refere a processos reacionais e de separação integrados, onde a reação química e a destilação ocorrem simultaneamente, permitindo a formação de outros produtos químicos ou a separação dos produtos dos reagentes para deslocação do equilíbrio para o lado dos produtos (destilação catalítica) (Seader, Henley, and Roper, 2011).

Na sequência do desenvolvimento de colunas de destilação convencionais ótimas ou quase ótimas, surgiram colunas de destilação complexas, baseadas no conceito de integração de energia ou calor. Neste sentido, de forma a melhorar a eficiência energética e os custos operatórios/capitais do processo de destilação, têm surgido diferentes técnicas de destilação com integração energética.

1.4. Colunas de destilação com aumento de eficiência energética

A destilação é o processo de separação mais utilizado na indústria química. É aplicado em cerca de 95 % dos processos de separação de fluidos, representando cerca de 40 % do consumo energético da indústria e 3 % do consumo energético mundial (Humphrey and Siebert, 1992).

Surpreendentemente, a eficiência termodinâmica de uma destilação convencional está apenas entre os 5 e os 20 % (De Koeijer and Kjelstrup, 2000). É correto afirmar que o dióxido de carbono produzido na atmosfera está relacionado com a energia despendida no processo de destilação. Quanto maior as necessidades energéticas, mais emissões de gases para a atmosfera existirão, dado que a energia é obtida através da combustão de combustíveis fósseis.

Há cerca de 70 anos, e de modo a melhorar a eficiência energética, foi introduzido o conceito de integração de calor. A ideia básica da integração de calor passava pela troca de calor entre correntes quentes do processo com correntes frias do mesmo processo, de maneira que os recursos necessários fossem utilizados mais economicamente. Deste modo, existem várias técnicas de integração de calor que têm sido propostas com um único objetivo comum, o de melhorar a eficiência dos processos de separação.

De seguida, apresentam-se as várias técnicas de colunas com integração de calor.

- Pseudo coluna de destilação de Petlyuk

Antoine Brugama, há mais de 80 anos patenteou um esquema de destilação acoplada termicamente. O processo de eficiência energética consistia numa torre de fluxo lateral e um pré fracionador, ambos equipados com condensador e ebulidor (Brugma, 1939). Wolff e Skogestad chamaram a esta configuração de “pseudo coluna de destilação de Petlyuk”.

- Coluna de parede dividida, implementada por Wright

Anos mais tarde, a coluna descrita anteriormente foi reestruturada por Wright. O autor decidiu eliminar a unidade de pré fracionador e introduzir uma coluna de paredes dividida, oferecendo a vantagem da possibilidade de destilar uma mistura ternária em fluxos de produtos puros, recorrendo apenas a uma estrutura de destilação, um condensador e um ebulidor. Assim, reduzindo o número de unidades de equipamento é possível obter um baixo custo de investimento inicial (Wright, 1949). Esta configuração encontra-se representada na figura 5.

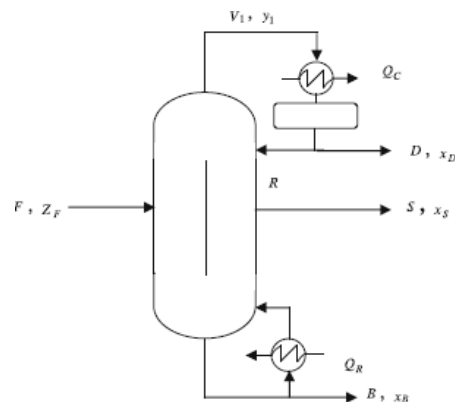


Figura 5 - Coluna de parede dividida, implementada por Wright

- Coluna de destilação de Petlyuk

Após apresentar um estudo teórico mais detalhado, a coluna anteriormente proposta por Wright, foi denominada de coluna Petlyuk. As colunas Petlyuk são equipamentos com acoplamento térmico integral de correntes. Foram inicialmente patenteadas, através de diversas modificações das colunas anteriormente descritas.

Petlyuk, Platonov e Zhvanetskiy demonstraram que a ineficiência termodinâmica que se verifica na destilação multicomponente pode ser melhorada através da remoção de permutadores de calor e pela introdução de acoplamento térmico entre colunas (Caballero and Grossmann, 2006). Apesar do menor consumo de energia, a coluna de Petlyuk apresenta mais graus de liberdade, dificultando o seu design e o controlo do sistema.

- Coluna de destilação de efeitos múltiplos

As colunas de destilação de efeitos múltiplos, utilizadas para separar misturas multicomponentes, consistem em utilizar o vapor de uma coluna como fonte de calor para a próxima coluna. As colunas podem ser integradas com o sentido do fluxo de massa, ou em sentido contrário. Apesar destas colunas já terem comprovado a possível poupança de energia, a potencial desvantagem que impede a comercialização do processo são as dificuldades operacionais (W. L. Luyben and Cheng, 1985).

- Coluna de destilação com auxílio de bomba de calor

Contrariamente ao esquema de efeitos múltiplos, a utilização de bombas de calor é um método utilizado somente para aumentar a economia térmica de uma coluna. As colunas de destilação assistidas por bombas de calor, foram implementadas como um processo de eficiência energética nas indústrias químicas e de petróleo, após a crise do petróleo de 1973. Apesar destas colunas serem vantajosas no que diz respeito a poupanças de energia, são extremamente dispendiosas economicamente. Para melhorar a configuração desta coluna, têm sido desenvolvidas outras formas avançadas de bombas de calor baseadas na absorção e adsorção para processos de destilação (Alarcón-Padilla and García - Rodríguez, 2007).

- Coluna de destilação diabática

Nas colunas de destilação adiabáticas, o calor é apenas fornecido ao ebulidor e extraído do condensador, o que promove o fenómeno de degradação de energia. Esta situação pode ser melhorada, dispersando o calor necessário através de toda a coluna de destilação, cuja nova designação é denominada de coluna de destilação diabática. Nesta configuração, a transferência de calor entre a coluna e a vizinhança ocorre em cada prato, utilizando um fluido através de uma bobina (Fonyo, 1974). Uma vez que, todos os pratos necessitam de um circuito de troca de calor, a implementação desta configuração possui alguns problemas. De modo a aliviar estas complicações, Rivero, Le Goff et al., simplificaram esta coluna utilizando duas redes de troca de calor, uma para a zona de retificação e outra para a zona de esgotamento. (Le Goff, Cachot, and Rivero, 1996)

Das restantes colunas de destilação com aumento de eficiência energética, podemos destacar as colunas de destilação com integração interna de calor.

1.4.1. Colunas de destilação com integração interna de calor

As colunas de destilação são conhecidas pela sua baixa eficiência energética. Dado que a destilação é o processo de separação de fluidos mais utilizado pela indústria, é necessário rentabilizar a energia gasta neste mecanismo de separação. A irreversibilidade do processo de separação resultante da diferença de temperaturas, concentrações e pressões, causa um grande impacto energético na indústria da destilação (Fang et al., 2019). Neste sentido, e como já referido anteriormente, têm surgido diversas técnicas de destilação de modo a rentabilizar esta energia, tendo todas por base a integração de calor. Uma dessas técnicas é a destilação com integração interna de calor.

O conceito de integração de calor foi introduzido pela primeira vez há quase 70 anos. A ideia básica de integração de calor consiste na troca de fluxos quentes do processo com fluxos frios, através de um arranjo concêntrico das zonas da coluna. Sendo assim, a zona de retificação opera a uma maior pressão e temperatura, relativamente à zona de esgotamento (Fang et al., 2019).

No caso das colunas de destilação com integração de calor ideais existe a possibilidade de operar sem recurso a condensador e ebulidor. Por razões de complexidade, nesta dissertação, os casos de estudo realizados irão necessitar de condensador e ebulidor. Em seguida, apresenta-se um esquema da configuração da coluna de destilação com integração interna de calor.

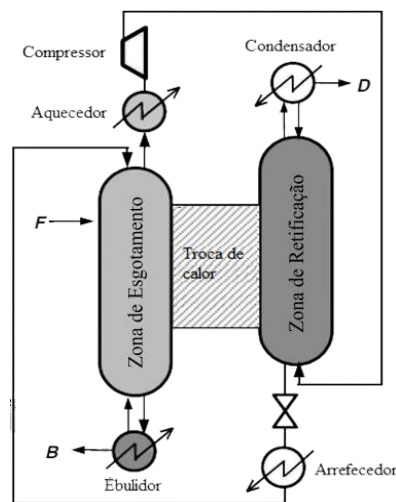


Figura 6 - Coluna de destilação com integração interna de calor

Mah et al, estabeleceu um modelo matemático de estado, baseado no modelo de equilíbrio, descrito pelas seguintes equações (Mah et al., 2010):

- Balanço do componente material para o componente i no estágio j:

$$L_{j-1} x_{ij-1} + V_{j+1} y_{ij-1} - (W_j + V_j) y_{ij} - (U_j + L_j) x_{ij} + F_{ij} = 0$$

- Equação normalizada:

$$\sum_i y_{ij} - 1 = 0$$

- Cálculo térmico no estágio j

$$V_{j+1} H_{j+1} + L_{j-1} h_{j-1} - (W_j + V_j) H_j - (U_j + L_j) h_j + F_j h_{Fj} - Q_j = 0$$

- Balanço material global para a zona de retificação incluindo o estágio j

$$\sum_{k=2}^j (W_k + U_k - F_k) + L_j - V_{j+1} + D = 0$$

- Balanço material global para a zona de esgotamento incluindo o estágio f

$$\sum_{k=j}^{n-1} (W_k + U_k - F_k) - L_{j-1} - V_j + B = 0$$

E onde podemos definir a equação da transferência de calor da seguinte maneira:

$$Q_j = U_j A_j \Delta T$$

em que ΔT se refere à diferença de temperatura entre os estágios emparelhados. Para ser possível resolver as equações descritas acima foi usado o método de Wang-Henke modificado (Henke & Wang, 1966).

Todos os modelos de transferência de calor são baseados em modelos matemáticos. No entanto, uma vez que a coluna opera com pouca linearidade e assimetria devido ao alto acoplamento térmico entre as duas zonas da coluna, torna-se difícil desenhar o modelo e controladores. De modo a corrigir o modelo para corresponder à dinâmica do sistema, Hwang estabeleceu uma teoria não linear para colunas de destilação binárias convencionais.

Como já enunciado anteriormente, as colunas de destilação com integração interna de calor podem ajudar na redução da irreversibilidade do processo de destilação e melhorar a sua eficiência energética. Contudo, um dos principais problemas é como reduzir o calor do ebulidor e do condensador para o mais próximo de 0 possível. Dado que dois dos principais fatores que afetam a transferência de massa e a troca de calor são a estrutura da coluna e o armazenamento interno da mesma foram propostas várias configurações da coluna, por investigadores de toda a parte do mundo.

- Configuração proposta por Haselden (1977)

Em 1977, Haselden propôs uma configuração de duas colunas, ilustrada na figura 7. A zona de retificação e a zona de esgotamento estavam ligadas através de uma série de mecanismos tubulares de troca de calor. Os vapores ascendentes da coluna de alta pressão, em diferentes alturas, passavam pelos tubos e atingiam a posição correspondente na coluna de baixa pressão, e desta forma, o vapor ascendente na zona de retificação e o líquido que caía na zona de esgotamento alcançava a transferência de calor através da parede do tubo. O excesso de vapor retornava para a zona de esgotamento através do próprio tubo. Uma vez que, o tubo que transportava o vapor estava exposto fora da coluna, a perda de calor resultante era severa (Haselden, 1977)

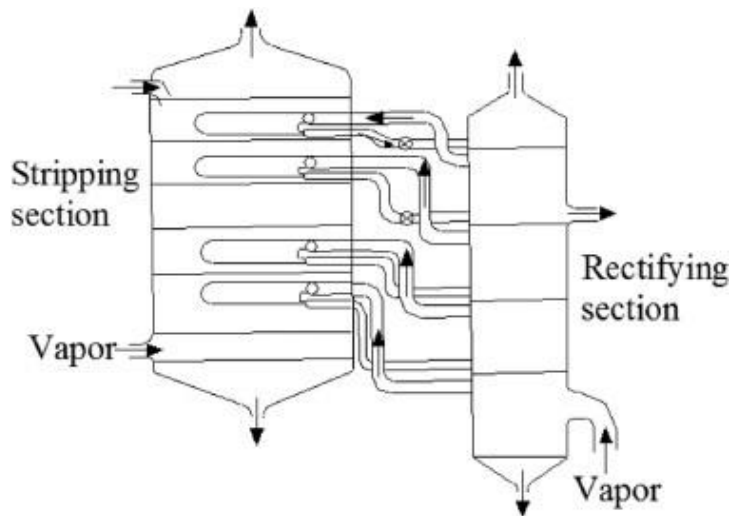


Figura 7 - Configuração de duas colunas, proposta por Haselden (Fang et al., 2019)

- Configuração proposta por Seader (1980)

Anos mais tarde, Seader propôs a coluna dividida, como demonstrado na figura 8. Os tubos de calor instalados, a meio da coluna, servem como mecanismo de transferência de calor, de modo a transferir a energia térmica da zona de retificação para a zona de esgotamento. A coluna encontra-se dividida verticalmente em duas zonas, retificação e esgotamento. Este tipo de estrutura revelou poupanças energéticas na ordem dos 50 %, quando comparadas com a destilação convencional (Seader, 1980).

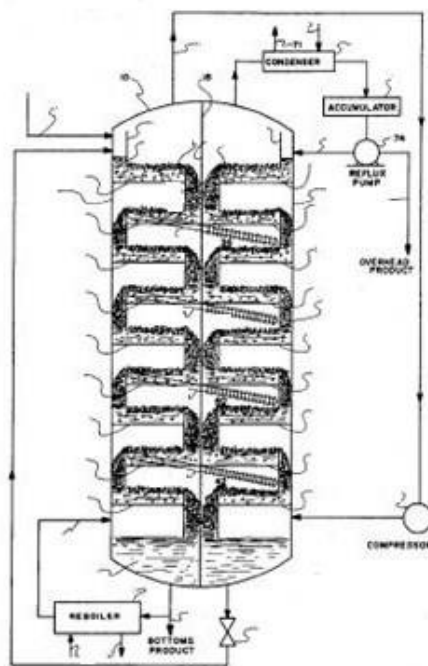


Figura 8 - Coluna dividida, proposta por Seader (Seader, 1980)

- Configuração proposta por Hugill (2003)

Tendo por base a literatura desenvolvida por Mah et al, em 1986, (R. Mah et al., 1986), Hugill propôs pela primeira vez uma coluna de destilação com integração interna de calor de placas e aletas. A zona de retificação e a zona de esgotamento dentro da coluna estão dispostas alternadamente e neste caso, ambas as zonas da coluna podem ser consideradas como placas de troca de calor aumentando a área de transferência de calor. O material da aleta utilizado na coluna é disposto de forma semelhante a um enchimento estruturado. Não só o material da aleta aumenta a área de transferência de calor entre as duas zonas da coluna, mas também, devido à superfície rugosa do material, fortalece o processo de transferência de massa da coluna (Hugill, 2003). Nas figuras 9 e 10, é possível observar um esquema das placas de calor e a respectiva coluna de destilação, proposta por Hugill.

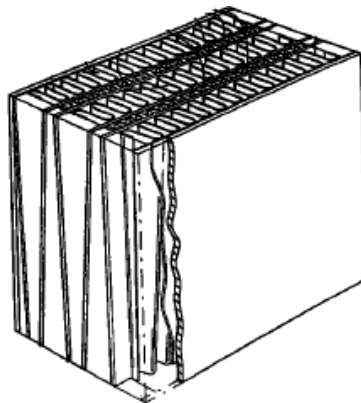


Figura 9 -Placas de troca de calor, para a coluna proposta por Hugill (Hugill, 2003)

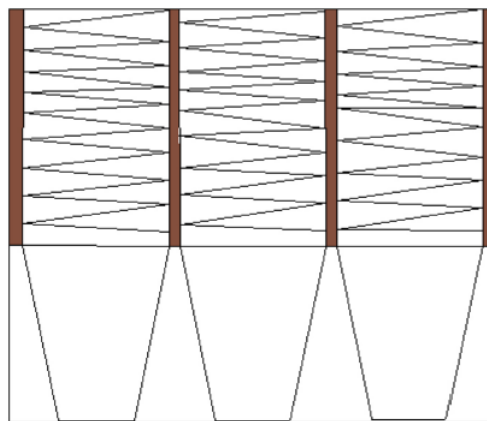


Figura 10 - Coluna de placas e aletas, proposta por Hugill

- Configuração proposta por Gavind (1986)

Gavind propôs uma Coluna de destilação concêntrica com integração interna de calor, dado que a estrutura anteriormente descrita apresentava complicações no que diz respeito à estrutura de troca de calor. O calor é transferido desde a parte interna da coluna de alta pressão para a coluna externa de baixa pressão, através de uma parede comum (Gavind, 1986). Na figura 11, é possível observar o esquema patenteado por Gavind.

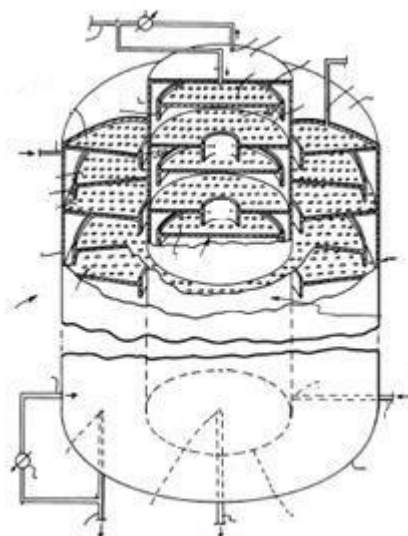


Figura 11 - Coluna concêntrica, proposta por Gavind (Gavind, 1986)

- Modificação proposta por Graauw et al (2010)

A área de troca de calor da coluna concêntrica é unicamente a área da superfície da parede e, para que a área de troca de calor fosse significativamente maior, Graauw et al adicionou pratos de troca de calor de estrutura especial, baseando-se na coluna concêntrica, representados na figura 12. Os pratos de troca de calor podem ser acomodados na zona de retificação ou na zona de esgotamento e a área de transferência de calor pode ser mudada flexivelmente, tendo em consideração a diferença de temperatura da troca de calor. (Graauw et al., 2010).

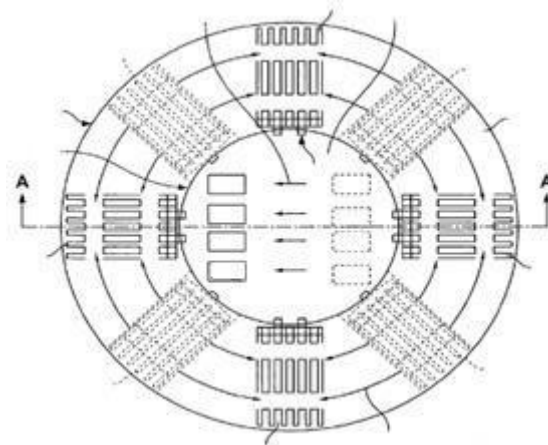


Figura 12 - Pratos de troca de calor, adicionados por Graauw et al (Graauw et al., 2010)

– Configuração proposta por Aso et al. (2000)

A coluna de destilação de cascos e tubos com integração de calor foi proposta por Aso et al. Semelhante à coluna anteriormente descrita, a área de transferência de calor é aumentada substancialmente. O tubo interno adequado para colocar a coluna internamente, devido ao seu pequeno diâmetro, resultando numa menor perda de calor. Em contrapartida, o design estrutural é complexo, dado que existe a necessidade de fixar cada zona de retificação concêntrica de pequeno diâmetro (Fang et al., 2019). Em seguida, é possível observar um pequeno esquema da coluna de cascos e tubos:

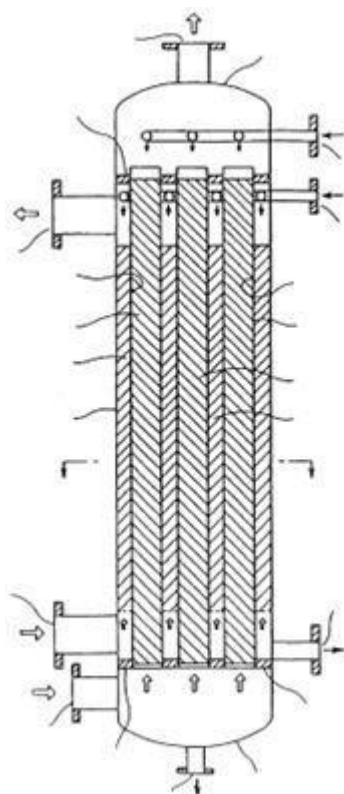


Figura 13 - Coluna de destilação de cascos e tubos com integração de calor (Aso et al., 2003)

Após o estudo de várias estruturas para a coluna de destilação com integração de calor, no ano 2000, Naito et al apresentaram um estudo experimental da primeira planta piloto da coluna de destilação com integração de calor, construída por Kimura Chemical Plants. O design estrutural utilizado para a coluna da planta piloto foi baseado numa coluna de destilação de cascos e tubos, tendo sido separada uma mistura de benzeno e tolueno. Os resultados para este caso de estudo demonstraram uma redução de aproximadamente 40 % no consumo energético, quando comparado com o sistema de destilação convencional. (Naito et al., 2000)

1.5. Destilação de Benzeno-Tolueno

Na presente dissertação, têm-se como principal objetivo separar a mistura benzeno-tolueno recorrendo a uma coluna de destilação convencional e a uma coluna de destilação com integração interna de calor, de forma a tentar demonstrar as vantagens e a possibilidade de poupanças energéticas. Em seguida, apresenta-se uma pequena revisão bibliográfica sobre cada um dos componentes a serem tratados.

1.5.1. Benzeno

O benzeno é um hidrocarboneto de fórmula molecular C_6H_6 . Trata-se de um composto orgânico volátil, com odor doce e incolor, constituindo a unidade fundamental dos hidrocarbonetos aromáticos. Na figura 14, encontra-se representado a estrutura molecular do benzeno:

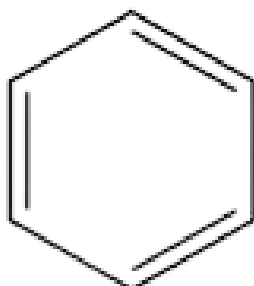


Figura 14 - Estrutura molecular do benzeno

O benzeno apresenta-se como um líquido tóxico, inflamável e praticamente insolúvel em água e, de acordo com a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos, é emitido para atmosfera durante os processos de produção e aplicação, durante a extração do petróleo, carvão e gás natural, nos aterros, pela indústria de papel e pelos veículos automotivos. Dos vários processos de produção de benzeno, podemos destacar o *reforming* catalítico, a desalquilação do tolueno e a destilação de óleos leves do forno de coque (Wilbur et al, 2007).

O benzeno pode entrar no organismo do ser humano principalmente por inalação, mas também é possível acontecer pela absorção gastrointestinal ou através da pele, onde existe o contacto com produtos que contenham o hidrocarboneto na sua constituição (Wilbur et al, 2007).

Após a exposição a este composto, existem diversos fatores que determinam o tipo de consequências que irão ocorrer e a severidade que as mesmas poderão ter na saúde humana. Dentro desses fatores, podemos realçar o tempo e o grau de exposição (Wilbur et al, 2007).

As breves exposições ao benzeno podem causar vômitos, tonturas, dores de cabeça e perda de consciência. A ingestão de alimentos que contêm elevados níveis de benzeno podem causar tonturas, convulsões, coma, podendo mesmo levar à morte. A exposição ao benzeno pode também causar problemas no sistema hematológico, promovendo a redução de glóbulos vermelhos, plaquetas e leucócitos (Wilbur et al, 2007).

Existem vários processos que utilizam benzeno como matéria-prima, podendo-se destacar o processo de produção de etilbenzeno, cumeno, nitrobenzeno e alquilbenzenos. O benzeno é também utilizado como solvente na produção de gorduras, ceras, resina, óleos, tintas plásticas, borrachas, lubrificantes, fibras sintéticas e nylon (Wilbur et al, 2007).

Certos compostos aromáticos, incluindo o benzeno, são adicionados aos combustíveis (gasolina e gásóleo) de modo a melhorar o índice de octano. A concentração do benzeno na gasolina refinada depende de muitas variáveis, tais como a origem do crude, o tipo de gasolina e o processo de refinação utilizado.

Na tabela 1, podemos observar várias características físicas e químicas do benzeno.

Tabela 1 - Características físicas e químicas do benzeno

Massa molar (g mol ⁻¹)	Densidade (g cm ⁻³)	Ponto de fusão (°C)	Ponto de ebulição (°C)	Solubilidade em H ₂ O (g L ⁻¹ a 20 °C)	Estado físico	
					Cor	Odor
78,11	0,876	5,5	80,1	Baixa solubilidade	Incolor	Adocicado

1.5.2. Tolueno

O tolueno é um composto orgânico volátil, sendo teoricamente o hidrocarboneto aromático em maior abundância na atmosfera terrestre (Fan, Zhao, and Zhang, 2005). Apresenta-se como um líquido transparente e límpido, com um odor aromático bastante característico. Na figura 15, encontra-se a estrutura molecular do tolueno:

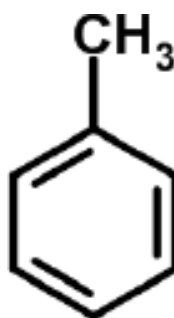


Figura 15 - Estrutura molecular do tolueno

É uma substância inflamável, explosiva e não corrosiva (Beauregard, 1993), não reagindo com ácidos nem com bases diluídas. Apesar de apresentar baixa solubilidade em água, esta solubilidade é superior em solventes orgânicos.

De uma forma natural, o tolueno pode ser encontrado e obtido em alcatrão de carvão, em petróleo bruto e numa vasta gama de produtos petrolíferos (Leusch and Bartkow, 2010). Apesar de existir de uma forma natural, é um composto predominantemente produzido por via industrial. A sua produção pode ser efetuada por processos de refinação, tais como o hidrotreatamento, pela própria recuperação e através da reforma catalítica.

A principal forma do tolueno entrar no organismo de um ser vivo é através da inspiração ou inalação. No entanto, também pode acontecer pela absorção gastrointestinal ou absorvido pela pele através do contacto com produtos que contenham tolueno na sua constituição (WHO, 2000).

Uma vez que é um composto tóxico, apresenta várias consequências nocivas para a saúde dos seres humanos e dos animais. Os efeitos nocivos encontram-se maioritariamente associados a danos no sistema nervoso central, dado que é o órgão alvo para a toxicidade do tolueno. Ao afetar o sistema nervoso central, o tolueno pode provocar a disfunção do mesmo, podendo também causar dores de cabeça, cansaço, sonolência, fraqueza, perda de memória, náuseas, etc. A inalação deste composto pode também originar problemas na fala, visão e audição, perda do controlo muscular, problemas em determinados órgãos (rins, fígado e pulmões), arritmias e depressão (Dorsey et al, 2017).

O tolueno possui várias aplicações, sendo predominantemente utilizado na indústria de solventes de modo a originar tintas, adesivos, produtos de limpeza, detergentes, pesticidas, fármacos e fragâncias. É também muito utilizado na indústria dos combustíveis, com principal destaque para a gasolina. Um diverso uso deste composto é na produção de polímeros, utilizados para produzir nylon, plásticos, produtos cosméticos e garrafas de refrigerantes.

Na tabela 2, podemos observar várias características físicas e químicas do tolueno.

Tabela 2 - Características físicas e químicas do tolueno

Massa molar (g mol ⁻¹)	Densidade (g cm ⁻³)	Ponto de fusão (°C)	Ponto de ebulição (°C)	Solubilidade em H ₂ O (g L ⁻¹ a 20 °C)	Estado físico	
					Cor	Odor
92,14	0,867	-95	110,6	0,535	Transparente	Caraterístico

Tendo em consideração as características físicas e químicas tanto do benzeno como do tolueno, é necessário definir o pacote de propriedades desejado para trabalhar no sistema de destilação. Deste modo, existem um conjunto de regras heurísticas a cumprir, para que a simulação seja o mais consistente possível. Uma vez que trabalhamos com dois líquidos, decidiu-se utilizar o modelo *NRTL – Non-random-two-liquid*. Na figura 16, podemos observar o diagrama liquido-vapor, fornecido pelo Aspen HYSYS®, para a mistura entre benzeno e tolueno a 1 atm.

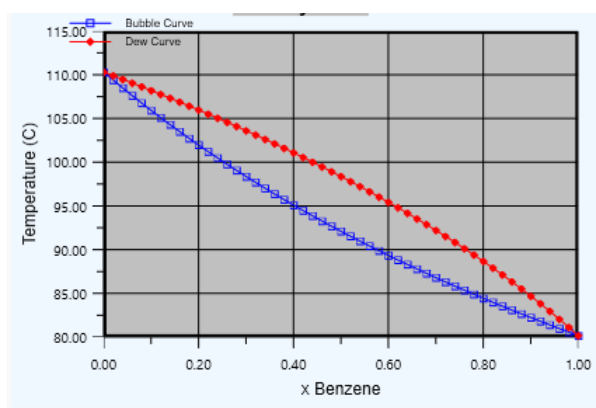


Figura 16 - Diagrama Líquido-Vapor, para a mistura benzeno/tolueno a 1 atm

1.6. Otimização de Processos

A necessidade de modificar processos e as condições de operação da indústria química com o intuito de aumentar a eficiência, quer em termos energéticos quer em termos económicos, tem levado à procura de metodologias de otimização. O conceito de otimização encontra-se relacionado com vários processos químicos, contribuindo muitas vezes de forma decisiva para a tomada de decisões.

O principal objetivo da otimização de processos é encontrar soluções ótimas que melhorem o desempenho produtivo, económico, ambiental e/ou de outros critérios como a robustez, a segurança de um complexo industrial, de uma unidade industrial ou de um simples equipamento. A otimização pode ser aplicada numa fase inicial, nomeadamente no projeto de novas unidades industriais e/ou novos equipamentos ou na melhoria de instalações/equipamentos já existentes.

Geralmente, a resolução de um problema de otimização inclui 6 passos (Edgar, Himmelblau, and Lasdon, 2001):

- Definição do problema - Análise do processo, de forma que as variáveis e as características de interesse sejam definidas;
- Construção de um modelo - Determinação do critério de otimização e especificação da função objetivo em termos das variáveis definidas anteriormente;
- Formulação matemática das funções objetivo - Desenvolvimento de um processo que relacione as variáveis de entrada-saída do processo com os coeficientes associados, através de expressões matemáticas;
- Escolha do algoritmo de otimização - Aplicação de uma técnica de otimização adequada;
- Determinação da solução ótima - Verificação das respostas;
- Análise da sensibilidade - Examinação da sensibilidade do resultado a mudanças nos coeficientes do problema;

A solução de problemas de otimização envolve geralmente conceitos matemáticos, apesar de existirem problemas que não necessitam desta formulação e análise.

1.7. Avaliação Financeira e Económica

1.7.1. Avaliação financeira

A avaliação financeira trata-se do ponto de partida para a avaliação económica. Faculta todos os dados necessários relativamente aos custos e benefícios. A análise financeira apresenta-se como o instrumento metodológico a utilizar para avaliar a rentabilidade dos investimentos submetidos a financiamento, em função das condições atuais e da projeção da sua evolução, a verificação da possibilidade de os capitais investidos serem remunerados e reembolsados de modo que as receitas superem as despesas de investimento e de funcionamento (POSEUR, 2015).

Uma correta abordagem neste contexto pressupõe que um conjunto de etapas sequenciais sejam percorridas, de modo a garantir que todas as características técnicas e as especificidades de um projeto são relevadas de modo a garantir que os melhores pressupostos são incluídos na análise (POSEUR, 2015).

Os métodos de avaliação financeira que permitem calcular a rentabilidade financeira de investimento e que servem de suporte para uma tomada de decisão são, o Valor Atual Líquido (VAL), a Taxa Interna de Rentabilidade (TIR), o Índice de Rentabilidade (IR) e o Período de Recuperação do Investimento (Payback Period).

O valor atual líquido, VAL, é um indicador simplificado, que resulta da diferença entre os rendimentos provenientes de um projeto e o custo capital que foi necessário para o financiamento (Soares et al. 2015). Por outros termos, o VAL pretende comparar o valor atual dos fluxos financeiros produzidos pelo projeto de investimento face ao investimento que se foi feito inicialmente. (Mota et al., 2015). Assim, é possível calcular o VAL através da seguinte expressão:

$$VAL = \sum_{t=0}^n \frac{\text{Cash Flow Líquido}}{(1+i)^t} \quad (5)$$

Onde t é o tempo, n a vida útil do projeto e i a taxa de atualização.

Se o VAL for positivo, assume-se que o investimento é favorável. Em contrapartida, quando o VAL é negativo, o projeto deverá ser rejeitado. Por fim, ainda é possível obter um VAL igual a zero, onde nesse caso, o investimento não produz ganhos ou perdas pelo que é indiferente a sua execução. Contudo, a aplicação do VAL apresenta algumas desvantagens nomeadamente, por, apesar de elucidar acerca da recuperação ou não do investimento inicial, não permitir saber quanto tempo este retorno irá demorar a acontecer (Queirós e Silva, 2013).

Outro critério de análise é a Taxa Interna de Rentabilidade. De acordo com Barros, a taxa interna de rentabilidade representa a taxa de atualização que torna o valor atual líquido igual a zero, isto é, a remuneração máxima que o projeto pode conceder aos investidores, sem pôr em causa a cobertura do investimento inicial. A TIR pode ser calculada através da expressão 5, igualando a zero. O valor de i corresponde á taxa interna de rentabilidade (Barros, 2014).

O Índice de Rentabilidade (IR) surge da derivação do critério VAL e permite medir a rentabilidade efetiva por cada unidade de capital investido. Este índice é obtido através da razão entre o valor anual dos Cash-Flows atualizados e o custo do investimento (Soares et al., 2015), como se pode verificar na expressão seguinte:

$$IR = \sum_{t=0}^n \frac{CF_t + I_t}{(1+i)} / \sum_{t=0}^n \frac{I_t}{(1+i)} \quad (6)$$

onde CF_t representa o cash flow no momento, I_t representa o investimento no momento, t representa o tempo e i representa a taxa de atualização.

Assim, para interpretar e tomar decisões com base neste índice, é necessário ter em consideração que se o IR for superior a 1, o projeto revela-se rentável na medida que os retornos futuros serão superiores ao capital investido e por isso deve ser aceite. Caso não se suceda, isto é, se o IR for igual a 1, significa que o VAL é nulo, e como referido anteriormente, neste caso é indiferente aceitar ou rejeitar o projeto, uma vez que não produz benefícios futuros (Silva, 1999).

O período de recuperação do investimento, muitas vezes denominado por *payback time*, tem como objetivo indicar o tempo necessário para que seja recuperado totalmente, através dos fluxos gerados, todo o capital investido no projeto. De modo a calcular este tempo, é utilizada a seguinte expressão:

$$PRI = t + \left(\frac{\text{Despesa de investimento} - \sum_{i=1}^t CFE}{CFE_{t+1}} \right) \quad (7)$$

onde CFE corresponde ao Cash-Flow de exploração, t corresponde ao tempo e i representa a taxa de atualização.

Para facilitar a tomada de decisão, considera-se como melhor investimento aquele que apresentar o menor valor de PRI, dado que representa o menor risco. Esta escolha também deve ter como base o número de anos de vida do projeto, uma vez que se este *payback time* ultrapassar o número de anos de vida do projeto, o projeto revela-se pouco rentável (Soares et al., 2015).

1.7.2. Avaliação económica

A avaliação económica é um conceito mais abrangente que a avaliação financeira, incluindo outros parâmetros, para além das questões estritamente financeiras. Este tipo de avaliação envolve a identificação, medição e avaliação e a comparação dos custos e benefícios que estão associados a um ou mais investimentos. Neste tipo de avaliação surgem preocupações relevantes, tais como o impacto na atividade económica, os efeitos, quer sejam diretos ou indiretos, que resultam de um investimento em determinada área.

As avaliações podem mudar de acordo com o seu propósito, dado que é possível utilizar este tipo de avaliação para determinar a eficácia de um investimento anteriormente efetuado, bem como comparar duas ou mais alternativas de investimento.

Como alternativa, é possível utilizar o simulador para efetuar os cálculos económicos, recorrendo à ferramenta Aspen Economic Analyzer, do simulador Aspen HYSYS®. Esta nova ferramenta

permite a incorporação dos custos relativos nos projetos, apresentando como vantagem a possibilidade de obter um processo que interliga capital e custos operatórios com parâmetros técnicos.

O Aspen Economic Analyzer permite ao utilizador um rápido acesso aos custos relativos de um determinado processo, proporcionando os meios para procurar a melhor alternativa baseada no equilíbrio entre fatores ambientais, técnicos, económicos e de segurança (Tremblay, McCarthy, and Beck, 2011).

A integração da análise económica com o processo promove o rendimento e os benefícios do projeto, permitindo ao utilizador compreender os resultados das suas decisões ao nível da conceção do projeto (Beck and Hockley, 2009).

2. Metodologia da Simulação

2.1. Objetivo

A presente dissertação e respetivo trabalho informático tem como objetivo a simulação do funcionamento de uma coluna de destilação com integração de calor no simulador Aspen HYSYS® e a sua comparação com o sistema tradicional de destilação.

2.1.1. Objetivos específicos

- Implementação do modelo de destilação convencional e destilação com integração interna de calor no software de simulação Aspen HYSYS®
- Otimização do sistema de destilação convencional, através de sucessivos casos de estudo para definição das melhores condições operatórias, variando a pressão do sistema, a temperatura de alimentação, o número de pratos e a posição do prato de alimentação (caso de estudo I)
- Otimização do sistema de destilação com integração interna de calor no software, através de sucessivos casos de estudo para definição das melhores condições operatórias, onde foram analisadas a pressão da zona de retificação, a temperatura de alimentação, o número de pratos e o T_{min} da troca de calor (caso de estudo II)
- Comparação dos dois sistemas de destilação em termos energéticos e económicos (caso de estudo III, IV, V e VI e VII)
- Análise de sensibilidade ao custo de eletricidade e custo do gás natural (casos de estudo VIII, IX, X e XI)
- Implementação do sistema em conceito de fábrica industrial

2.2. Implementação do processo no simulador Aspen HYSYS®

No presente subcapítulo, pretende-se expor os passos efetuados para a implementação de ambos os sistemas de destilação, convencional e com integração de calor, de modo a ser possível reconstruir o simulador para futuras análises complementares.

Para proceder à simulação rigorosa de um sistema de destilação nos softwares comerciais de simulação, é normalmente necessário o conhecimento da informação estrutural das colunas de destilação, sem a qual se verifica a necessidade de efetuar ciclos de cálculos iterativos até que uma estrutura aceitável seja encontrada.

De notar, que para a simulação de processos em HYSYS® é necessário a escolha prévia dos componentes que fazem parte do processo a simular e do(s) pacote(s) de propriedades associado(s), cuja finalidade é a previsão das propriedades físicas de espécies químicas. No uso de simuladores de processos, a seleção do modelo termodinâmico adequado é um requisito absolutamente necessário como ponto de partida para uma correta simulação do processo dado

que a inexistência e/ou inadequação de propriedades físicas podem diminuir a precisão do modelo ou mesmo impedir a execução da simulação.

2.2.1. Implementação do sistema de destilação convencional

Primeiramente, foi necessário introduzir no simulador Aspen HYSYS® os componentes com que se desejava trabalhar, tolueno e benzeno, recorrendo à ferramenta *Component List*, presente no simulador. As adições dos componentes necessários para a simulação encontram-se representados na figura 8:

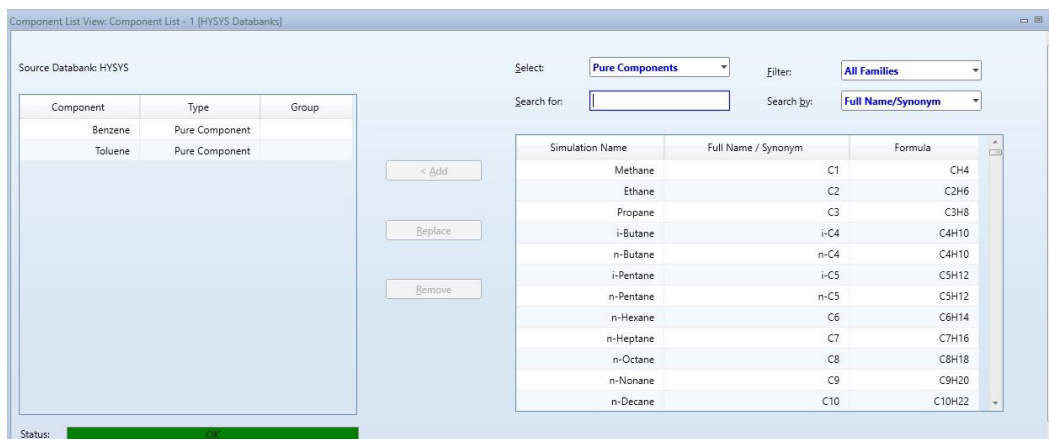


Figura 17 - Componentes adicionados no simulador Aspen HYSYS®

Em seguida, recorreu-se à ferramenta *Fluid Package*, de modo a selecionar o pacote de propriedades desejado. Esta escolha foi baseada nas regras heurísticas (Carlson, 1996), sendo o modelo NRTL o mais apropriado para o sistema em questão.

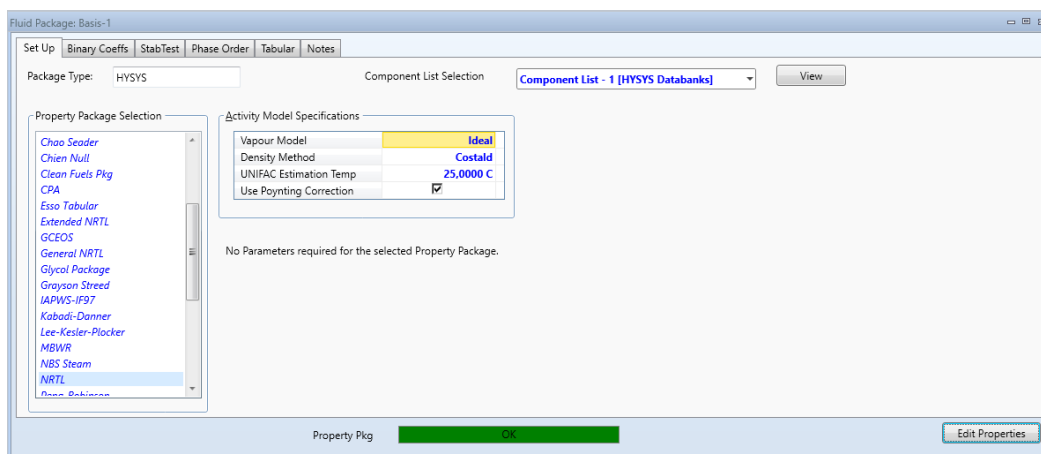


Figura 18 - Pacote de propriedades escolhido para o sistema

Posteriormente, e já na parte da simulação propriamente dita, foi necessário criar uma corrente de alimentação e introduzir as condições iniciais (estas serão alteradas ao longo dos ensaios, para uma análise profunda) para ser possível executar a separação entre os dois componentes (benzeno e tolueno). Assim, as condições iniciais implementadas encontram-se na figura 18:

	Alimentação	Liquid Phase
Stream Name		
Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Temperature [C]	20,00	20,00
Pressure [atm]	1,000	1,000
Molar Flow (kgmole/h)	100,0	100,0
Mass Flow (kg/h)	8513	8513
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	9,722	9,722
Molar Enthalpy (kcal/kgmole)	7301	7301
Molar Entropy (kJ/kgmole-C)	-109,8	-109,8
Heat Flow (kcal/h)	7,301e+005	7,301e+005
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	9,674	9,674
Fluid Package	Basis-1	
Utility Type		

Figura 19 - Condições da alimentação

Foi ainda necessário introduzir a fração molar da alimentação com que se desejava trabalhar, sendo esta de 50 % para cada um dos componentes, como se verifica na figura 19:

	Mole Fractions	Liquid Phase
Benzene	0,5000	0,5000
Toluene	0,5000	0,5000

Total: 1,00000

Figura 20 - Razão molar da alimentação

Logo de seguida, foi implementada a coluna de destilação necessária para efetuar a separação da mistura, através do atalho *Column T-100*. Para a mesma funcionar, foram introduzidos os parâmetros - número de pratos, pressão do sistema, tipo de condensador, e entrada do prato de alimentação. Na figura 20, é possível observar um Flowsheet da coluna implementada.

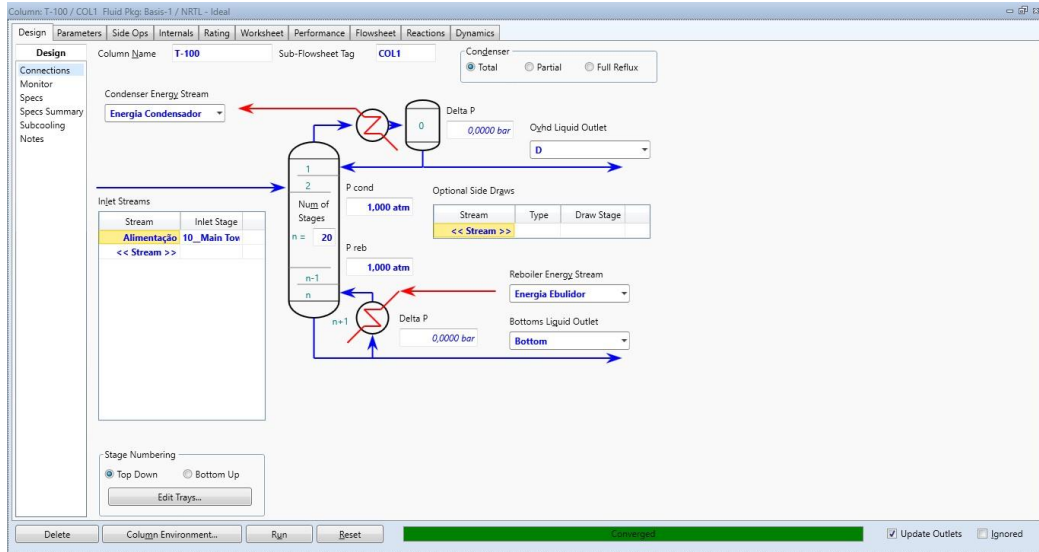


Figura 21 - Flowsheet da coluna de destilação

Através da observação da figura 20, é possível reparar que o sistema opera com 20 pratos, sendo a mistura alimentada no décimo prato, a pressão de funcionamento é de 1 atm, e a coluna trabalha com um condensador total.

Por fim, de modo que a coluna conseguisse operar, foi necessário também definir a separação desejada, isto é, a fração molar que se quer obter de benzeno e tolueno no destilado e no resíduo, respetivamente, através do separador *Monitor*, presente na coluna de destilação. Assim, através da figura 21 é possível constatar que se efetuou uma separação de 86 %. Analogamente ao realizado nas condições acima descritas, também estes valores sofreram alterações ao longo da simulação efetuada.

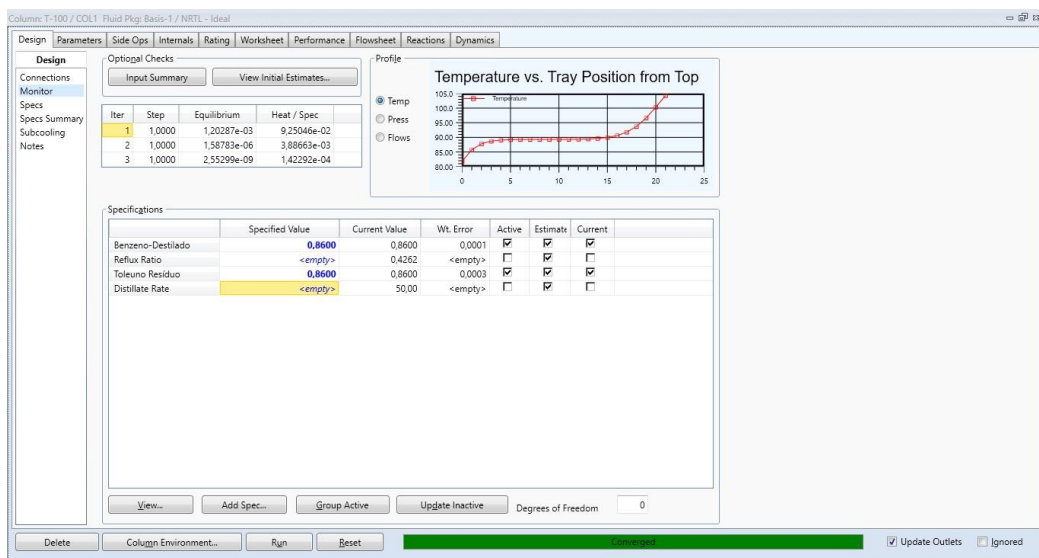


Figura 22 - Separação desejada para o sistema

Por fim, foi necessário definir a existência de perda de carga ao longo da coluna, para uma simulação mais real. Deste modo, foi necessário ir ao separador “Internals” presente na coluna de destilação. Através da figura 22 verifica-se que a coluna possui um diâmetro de 0,89 m e um espaçamento entre pratos de 0,61 m. Em seguida, é necessário exportar a perda de carga ao longo da coluna através do botão “Export Pressure Drop from Bottom”

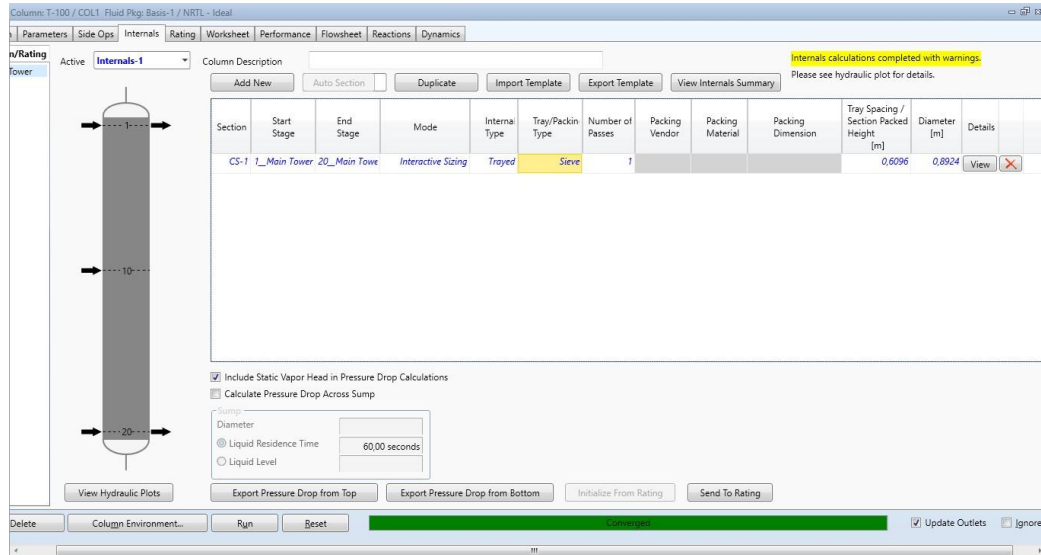


Figura 23 - Internals da Coluna de Destilação

Assim, o Flowsheet final para a separação da mistura por destilação convencional foi o apresentado na figura 23.

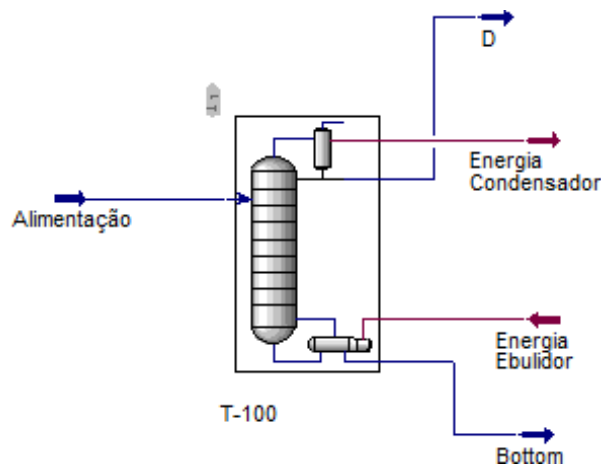


Figura 24 - Flowsheet do sistema implementado para a coluna de destilação convencional

2.2.2. Implementação do sistema de destilação com integração interna de calor

Relativamente ao sistema de coluna de destilação com integração interna de calor, a introdução dos componentes da alimentação e a escolha do melhor pacote de propriedades foi realizado de forma análoga à apresentada para a coluna de destilação convencional, pelo que os passos a executar são os mesmos.

Na parte de simulação, foi necessário introduzir um absorvedor com ebulidor e outro absorvedor com condensador, de modo a replicar uma coluna de destilação. As condições impostas na zona de retificação e na zona de esgotamento encontram-se demonstradas nas figuras 24 e 25:

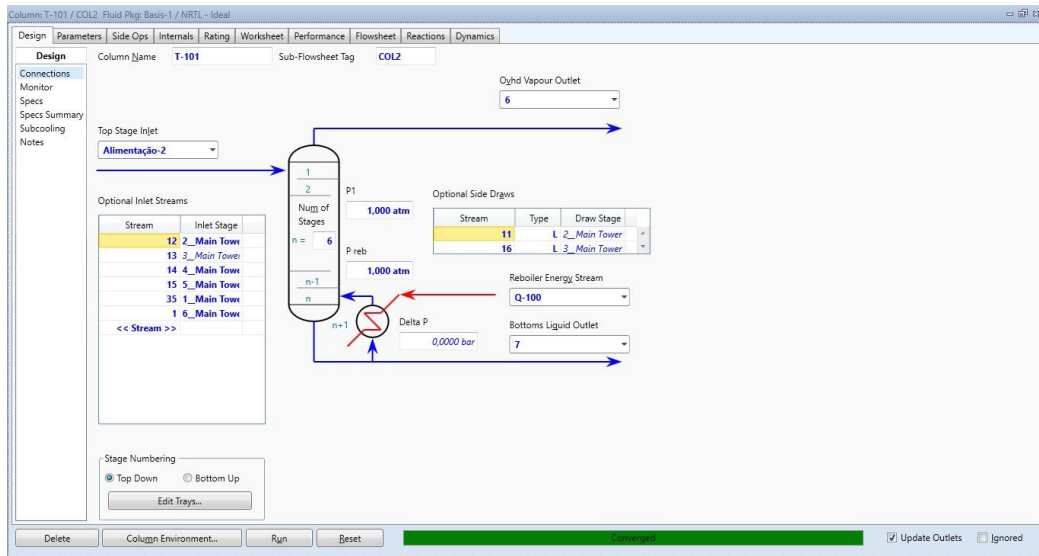


Figura 25 - Flowsheet da Zona de Esgotamento com Ebulidor da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor

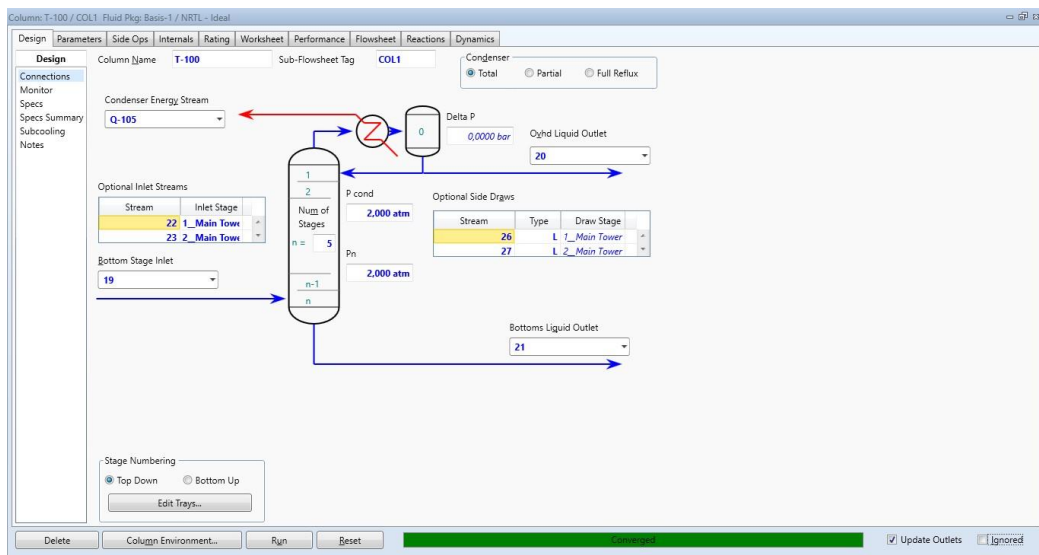


Figura 26 - Flowsheet da Zona de Retificação com Condensador da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor

Através

, é possível constatar que a zona de esgotamento opera a uma pressão mais baixa e com um número de pratos maior. Dado que se pretende transferir calor da parte superior da coluna para a parte inferior, esta pressão necessita de ser superior, pois é fundamental que a zona de retificação possua uma temperatura superior à zona de esgotamento, possibilitando a troca de calor entre as duas zonas através de permutadores. Esta pressão deve ser escolhida tendo em consideração as necessidades energéticas quer do ebulidor quer do condensador.

Em seguida, foi necessário implementar as devidas trocas de calor. Para tal, introduziram-se diversas correntes de entrada e saída da coluna, de modo a não existir perda nem ganho de matéria. Dado que no exemplo apresentado apenas se trabalhou com 11 pratos, foi necessário introduzir 5 correntes de troca de calor, todas a entrar em diferentes pratos da coluna, como demonstrado nas figuras 23 e 24. Uma vez implementadas as correntes de matéria, foi necessário efetuar as trocas de calor, recorrendo a permutadores. Estes permutadores são utilizados para trocar calor entre o topo e a base da coluna. É importante salientar que cada troca de calor ocorre prato a prato. Assim, as especificações introduzidas em cada permutador encontram-se descritas nas figuras 26 e 27:

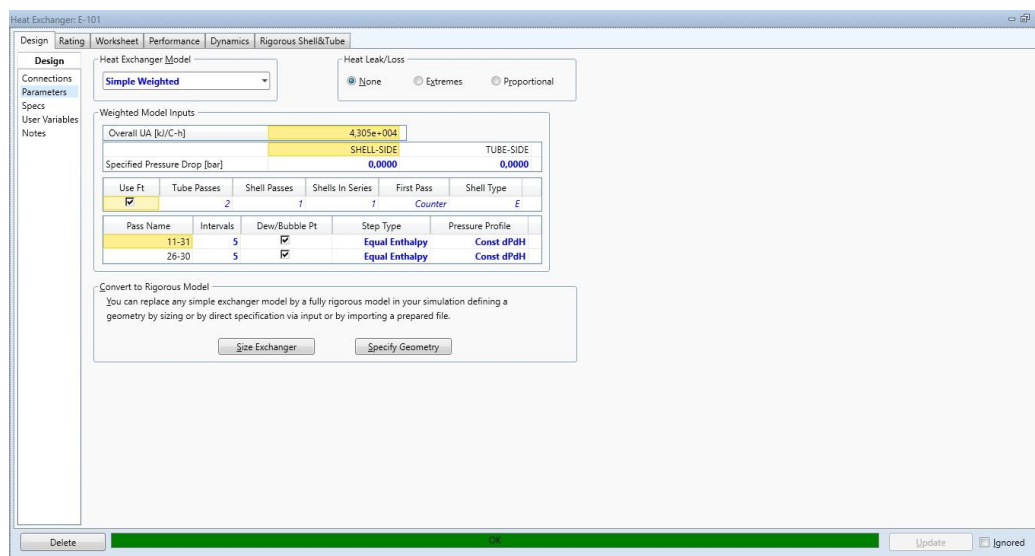


Figura 27 - Especificações do permutador de calor

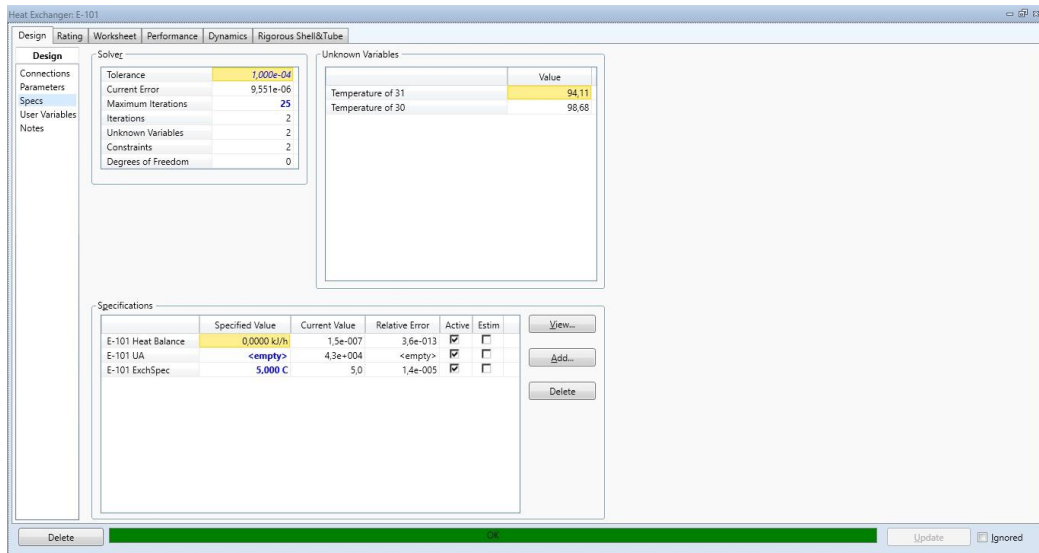


Figura 28 - Especificações do permutador de calor

É de referir que para a coluna operar, foi necessário introduzir várias especificações, através do separador *Monitor*, encontrando-se as mesmas descritas na figura 28

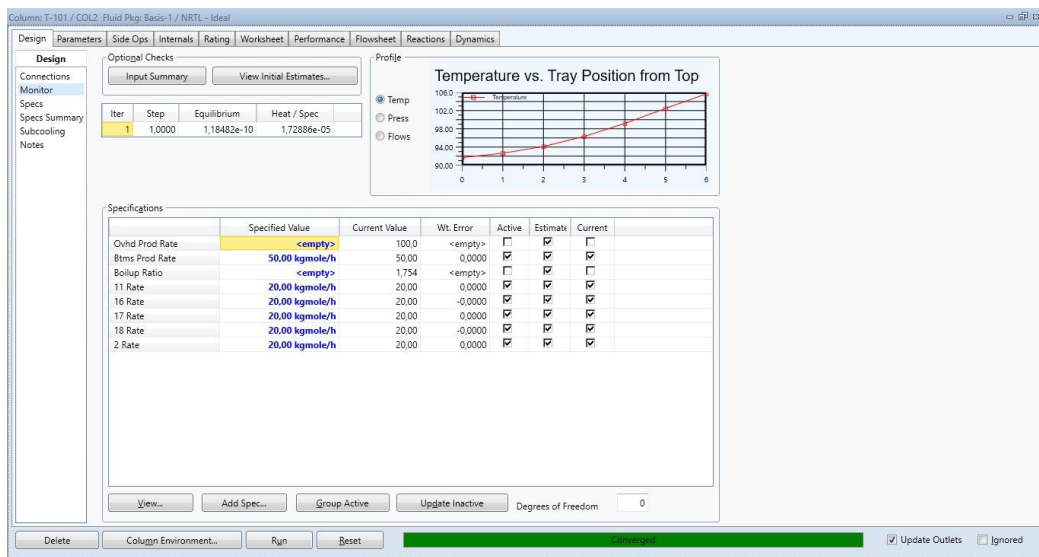


Figura 29 - Especificações da Zona de Retificação da Coluna

As massas à saída do ebulidor e do condensador devem ser iguais às massas de entrada, de modo que não exista perda ou ganho de matéria em nenhuma outra corrente. Uma vez que também se pretende estudar qual as melhores condições de funcionamento do sistema, estas massas foram variando ao longo do trabalho. De um modo idêntico ao realizado na coluna de destilação convencional, foi necessário definir a perda de carga ao longo da zona de retificação.

Assim, o flowsheet final desta coluna de destilação para uma configuração de 11 pratos apresenta-se na figura 29.

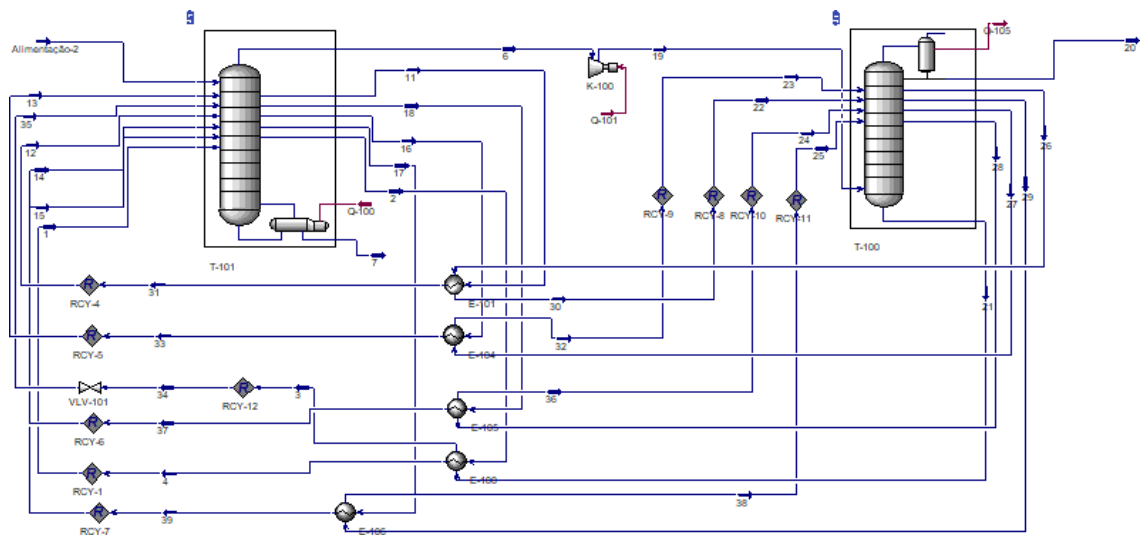


Figura 30 - Flowsheet para a Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor

3. Resultados

3.1. Otimização de sistemas

A otimização de um processo industrial, consiste no aumento da rentabilidade do processo, tendo em consideração a segurança do processo, mantendo a qualidade do produto. Tradicionalmente, podemos distinguir duas vertentes principais da otimização - otimização de design e a otimização de operação.

A otimização de design está normalmente, associada à otimização estrutural e à determinação das melhores condições de operação associadas ao design. Por outro lado, a otimização de operação está associada ao design do controlo de otimização, que por sua vez leva ao ajuste das condições de operação, de modo que se possam cumprir, igualmente, objetivos relacionados com consumos energéticos e custos associados.

3.1.1. Otimização de um sistema de destilação

Na otimização de um sistema de destilação, é necessário introduzir um *trade-off* entre a minimização do consumo de energia e dos custos de operação com o custo capital. Mediante o tipo de otimização a realizar, existem diferentes variáveis que se podem avaliar, podendo ser genericamente divididas em duas categorias - otimização energética e otimização de custos (Stichlmair and Fair, 1998).

No caso da otimização energética, podemos destacar os consumos no ebulidor e no condensador e ainda, os consumos associados a equipamentos auxiliares, tais como bombas e compressores. No caso da otimização de custos, para além dos custos de operação e de utilidades, podemos incluir os custos de capital. As principais variáveis dos custos de capital dizem respeito ao número de pratos da coluna e ao diâmetro das mesmas, às dimensões do ebulidor e condensador e ao número e dimensão dos equipamentos auxiliares.

Para as colunas convencionais, considerando como especificações do processo o caudal e composição da alimentação, as principais variáveis a considerar na otimização do design são a posição da alimentação e o número de pratos total da coluna (altura da coluna). No caso da otimização de operação podemos destacar a temperatura da alimentação e a pressão de funcionamento da coluna, sendo também frequente a avaliação da perda de carga na coluna.

A posição do prato de alimentação (N_F) de uma dada coluna com um determinado número de pratos (N_T) define a dimensão das zonas de esgotamento e retificação. A localização do prato de alimentação é essencialmente dirigida pela posição que conduz à menor ineficiência termodinâmica resultante da mistura da corrente de alimentação com as correntes internas da coluna. A otimização desta variável, segundo a avaliação de consumo energético conduz igualmente à otimização dos custos.

Quanto à altura da coluna, a otimização é realizada após o dimensionamento do prato de alimentação, e considera-se independente deste, desde que se mantenha a posição relativa do mesmo, o que se traduz na igual variação do número total de pratos associado a cada seção.

A temperatura de alimentação determina a diferença dos caudais de vapor e líquido nas seções de retificação e esgotamento da coluna, o que se reflete nos caudais internos da coluna (Doherty e Halone, 2001). O valor ótimo da condição térmica irá depender sobretudo das condições das correntes de produtos e do tipo de equipamentos de troca de calor e utilidades necessárias ao processo.

Por fim, a pressão de funcionamento é normalmente ajustada para que utilidades menos dispendiosas possam ser utilizadas no aquecimento ou arrefecimento, tendo em conta que o aumento de pressão, implica um aumento do consumo de energia do ebulidor. A pressão de funcionamento está também relacionada com a eficiência da coluna, sendo esperado que com o aumento da pressão, a eficiência da coluna aumente também, dado que a temperatura de ebulição aumenta, levando à diminuição da viscosidade da mistura (Doherty and Malone, 2001). No entanto, ao escolher a pressão de funcionamento do sistema, é necessário também ter em consideração a volatilidade relativa, uma vez que existem casos onde esta pode diminuir e tornar a separação da mistura mais difícil, necessitando de mais energia.

3.2. Otimização da coluna de destilação convencional (caso de estudo I)

No caso de estudo I, pretende-se separar a mistura benzeno-tolueno através de uma coluna de destilação convencional. Pretende-se também, dimensionar a coluna para operar nas melhores condições possíveis, quer em termos económicos, quer em termos energéticos. Na figura 23 (apresentada anteriormente), está representado o flowsheet utilizado para este sistema.

Com a coluna a operar corretamente e com as condições iniciais definidas, apresentadas na tabela 3, a próxima etapa passa pela otimização do sistema, através de sucessivos casos de estudos, de modo a saber quais as condições que permitam a separação com o menor custo energético. Na tabela 4 encontram-se esquematizados os casos de estudo que foram realizados, para cada variável de otimização.

Tabela 3 - Condições iniciais para a alimentação da Coluna de Destilação Convencional, referente ao caso de estudo I

Pressão do sistema (atm)	Temperatura de Alimentação (° C)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo	Fração Molar (%)	
						Benzeno	Tolueno
1	20	20	10	0,86	0,86	50	50

Tabela 4 - Casos de estudo para a otimização do sistema de destilação convencional

Variável de estudo	Condição Inicial	Condição Final	Step Size
Pressão do sistema (atm)	1 atm	10 atm	1 atm
Temperatura da alimentação (°C)	20 °C	90 °C	10 °C
Número de pratos (N_T)	20	50 pratos	5 pratos
Entrada do prato de alimentação (N_F)	Prato 1	Prato 10	1 prato

Deste modo, foram estudadas as variáveis de otimização enunciadas anteriormente, do qual resultaram as figuras 31 a 38.

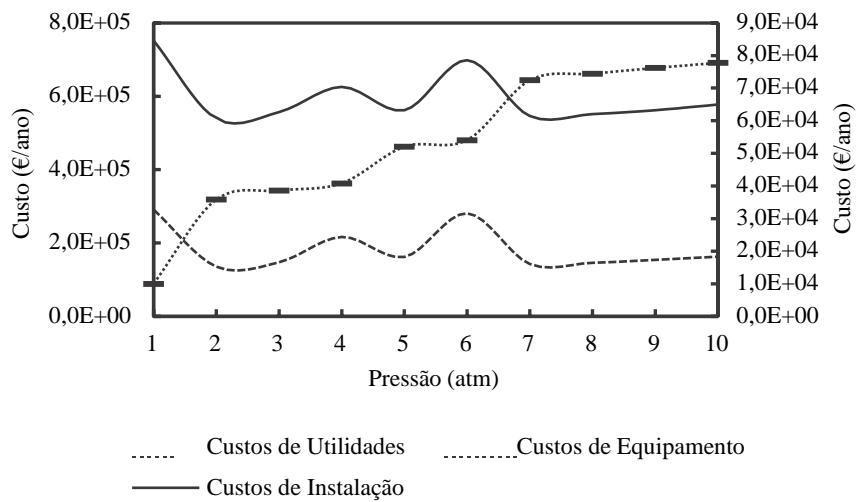


Figura 31 - Custos de Utilidades (eixo principal) e Custos de Equipamento/Instalação (eixo secundário) em função da pressão do sistema (atm), referentes ao caso de estudo I

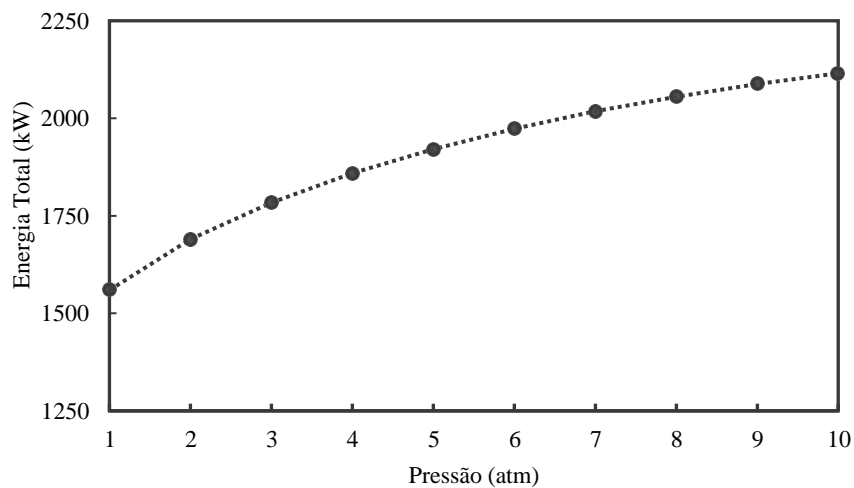


Figura 32 - Energia Total em função da pressão do sistema, referente ao caso de estudo I

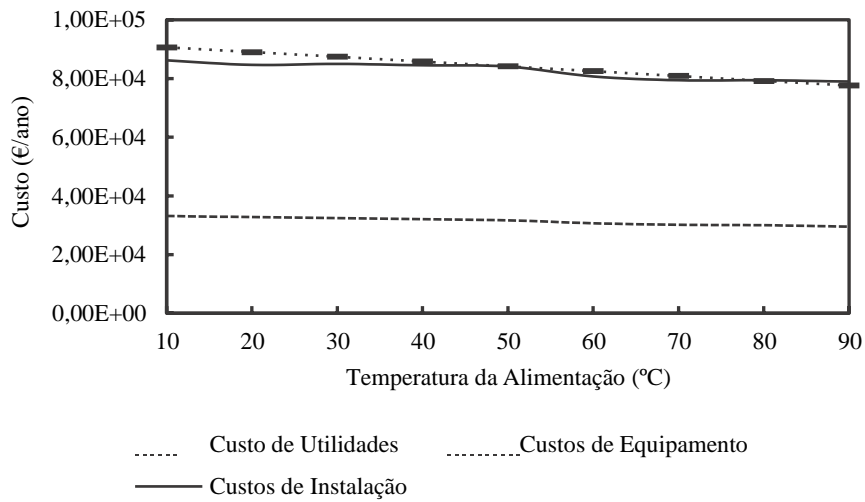


Figura 33 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da Temperatura da Alimentação do sistema (°C), referentes ao caso de estudo I

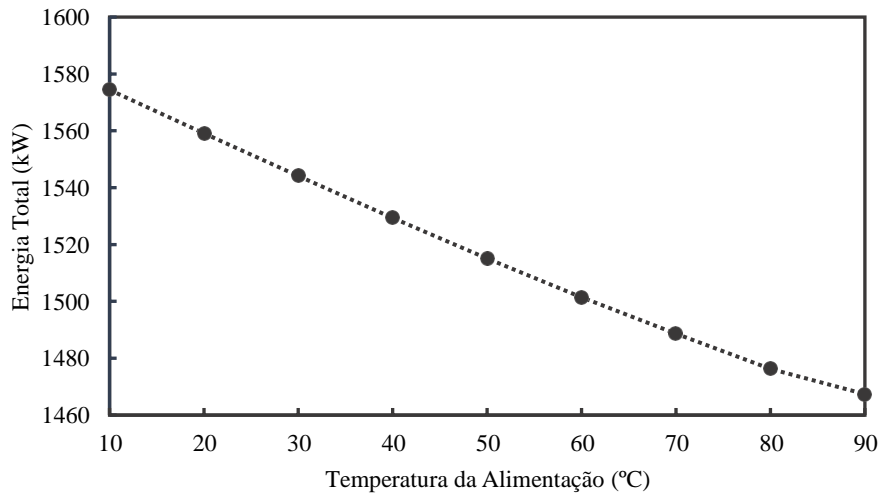


Figura 34 - Energia Total em função da temperatura de alimentação do sistema (°C), referente ao caso de estudo I

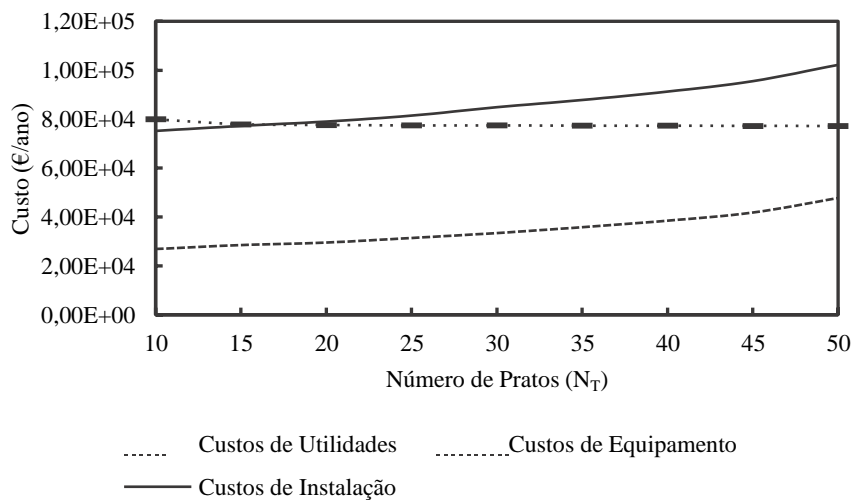


Figura 35 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função do Número de Pratos da coluna (Nr), referentes ao caso de estudo

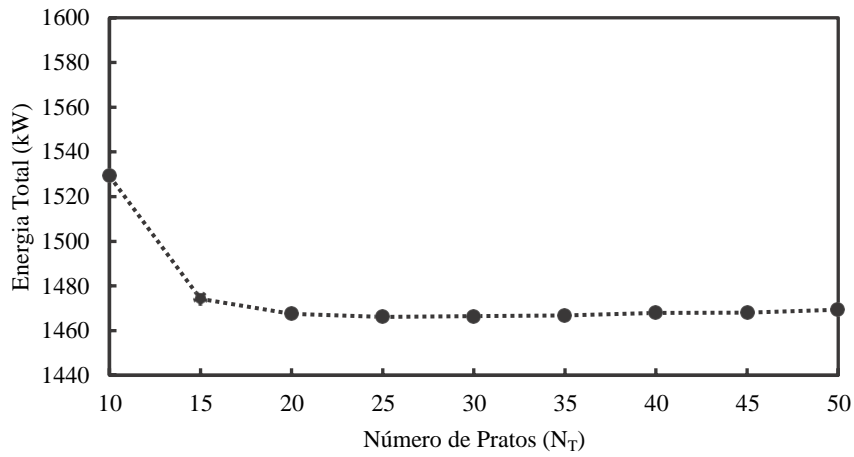


Figura 36 - Energia Total em função do Número de Pratos da coluna (N_T), referente ao caso de estudo I

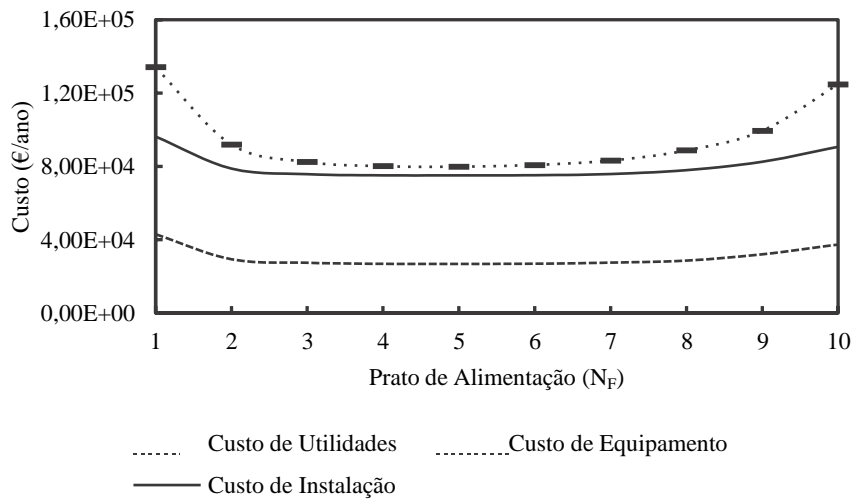


Figura 37 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da entrada do prato de alimentação (N_F), referentes ao caso de estudo I

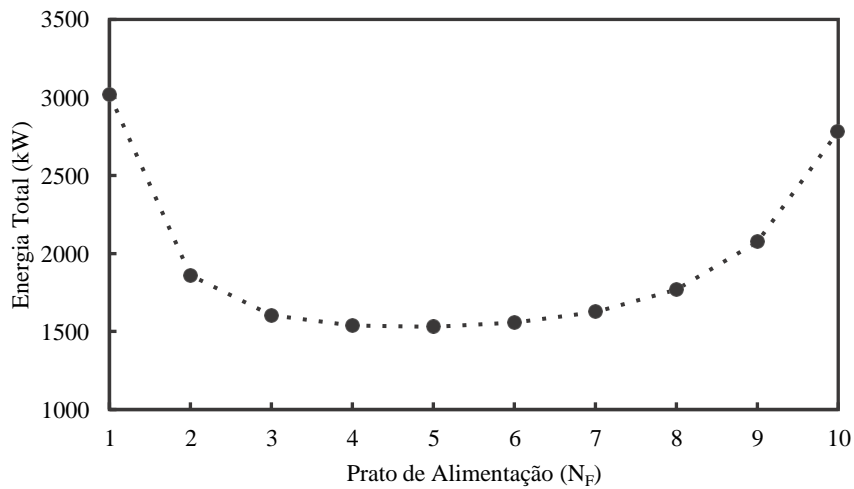


Figura 38 - Energia Total em função em função da entrada do prato de alimentação (N_F), referente ao caso de estudo I

Através das figuras 31 a 38, é possível realçar a variação diretamente proporcional entre os custos do sistema e a pressão do mesmo. No entanto, os custos das utilidades relevam um comportamento sem oscilações, contrariamente ao que sucede com os custos de equipamento e custos de instalação. Igualmente aos custos totais do sistema, o mesmo sucede com a energia gasta pelo sistema, dado que aumenta ao longo do aumento da pressão.

Relativamente à temperatura de alimentação do sistema, observa-se que os custos de utilidades e os custos de equipamento vão decrescendo à medida que se aumenta a temperatura de entrada da alimentação. Pelo contrário, os custos de instalação apresentam uma pequena oscilação. Em contrapartida, a energia necessária para o funcionamento do ebulidor e do condensador vai diminuindo à medida que a temperatura da alimentação aumenta, mostrando a necessidade de a mistura estar a uma temperatura mais elevada.

Verifica-se que os custos de utilidades e os custos de equipamento são altamente influenciados pelo número de pratos do sistema. Assim, constatou-se um aumento dos custos quando o número de pratos foi superior, sendo benéfico operar com uma coluna de menor altura. Pelo contrário, a energia do sistema sofre uma ligeira diminuição da mesma quando o número de pratos é superior. No entanto, dado que numa fábrica é importante analisar os custos totais em conjunto com a energia gasta pelo sistema, verifica-se que é conveniente escolher uma altura da coluna inferior.

Por fim, constata-se que os custos de utilidades, custos de equipamento e os custos de instalação não apresentam um comportamento constante ao longo do prato de entrada da alimentação. Uma vez que, na indústria se pretende sempre poupar energia e diminuir os custos, conclui-se que estes dois parâmetros são beneficiados quando a entrada da alimentação é realizada a meio da coluna. Assim, as melhores condições de operação encontram-se representadas na tabela 5.

Tabela 5 - Condições Operatórias ideais para o sistema de Destilação Convencional, referente ao caso de estudo I

Pressão do sistema (atm)	Temperatura de Alimentação (° C)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo	Fração Molar (%)	
						Benzeno	Tolueno
1	90	10	5	0,86	0,86	50	50

3.2.1. Influência da perda de carga no sistema de destilação convencional

De forma a entender se o sistema responde melhor quando opera com ou sem perda de carga, efetuou-se à parte, a otimização do sistema não considerando a existência de perda de carga ao longo da coluna. Em seguida, compararam-se cada variável de estudo para ambas as situações, tendo-se obtido os resultados apresentados na tabela 6, com as variáveis otimizadas.

Tabela 6- Comparação entre o sistema de destilação convencional sem e com perda de carga, para as diferentes variáveis

Variável de estudo	Destilação Convencional	Custos Totais (€/ano)	Energia do Sistema (kW)
Pressão do sistema (atm)	Sem perda de carga	$1,2525 \times 10^6$	1561,7
	Com perda de carga	$1,2524 \times 10^6$	1559,1
Temperatura da alimentação (°C)	Sem perda de carga	$1,2181 \times 10^6$	1467,0
	Com perda de carga	$1,2171 \times 10^6$	1467,4
Número de pratos (N_T)	Sem perda de carga	$1,2085 \times 10^6$	1530,3
	Com perda de carga	$1,2097 \times 10^6$	1529,2
Entrada do prato de alimentação (N_F)	Sem perda de carga	$1,2085 \times 10^6$	1530,3
	Com perda de carga	$1,2097 \times 10^6$	1529,2

Relativamente ao estudo da pressão de funcionamento do sistema, constatou-se que os custos totais e a energia total são menores quando a simulação é realizada com perda de carga, sendo os valores relativamente semelhantes quer em termos económico quer energéticos.

O estudo da temperatura de alimentação do sistema demonstrou valores económicos bastante próximos. No entanto, apresentaram-se superiores quando a coluna operou com perda de carga nula. No que toca aos valores energéticos, revelaram-se superiores quando o sistema operou com perda de carga.

Quanto ao estudo do número de pratos (N_T), foi possível concluir que os custos totais do sistema foram bastante similares nos dois casos. Ainda assim, estes foram superiores quando o sistema funcionou com existência de perda de carga. Contudo, os valores energéticos do sistema, revelaram-se inversos, favorecendo o sistema com perda de carga.

Por último, o estudo da entrada do prato de alimentação (N_F) apresentou valores semelhantes no que toca aos custos económicos totais. Todavia, a energia do sistema foi superior quando a destilação foi efetuada considerando a não existência de perda de carga.

Em suma, verifica-se através dos resultados obtidos que os valores são praticamente idênticos para ambos os casos. Uma vez que se pretende simular o que acontece numa coluna real, é imprescindível operar com uma coluna sem considerar a existência de perda de carga.

3.3. Otimização da coluna de destilação com integração interna de calor (caso de estudo II)

No caso de estudo II, pretende-se implementar o processo de coluna de destilação com integração interna de calor e a posterior otimização do sistema, no que toca ao consumo energético e aos custos económicos. Foram implementadas as condições iniciais presentes na tabela 7, sendo estas as condições mais próximas possíveis das melhores condições operatórias obtidas anteriormente para o sistema de destilação convencional. O flowsheet para esta coluna de destilação encontra-se representado na figura 29.

Tabela 7 - Condições iniciais para a alimentação da Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor, referentes ao caso de estudo II

Pressão da zona de esgotamento (atm)	Pressão da zona de retificação(atm)	Temperatura de Alimentação (° C)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Separação	Fração Molar (%)	
						Benzeno	Tolueno
1	2	20	11	6	86 %	50	50

Na tabela 8 encontram-se esquematizados os casos de estudo que foram realizados, para cada variável de otimização.

Tabela 8 - Casos de estudo para a otimização do sistema de destilação com integração de calor

Variável de estudo	Condição Inicial	Condição Final	Step Size
Pressão da zona de retificação (atm)	2 atm	5 atm	1 atm
Temperatura da alimentação (°C)	20 °C	90 °C	10 °C
Número de pratos (N_T)	11 pratos	31 pratos	5 pratos
ΔT_{\min} da troca de calor dos permutadores (°C)	1 °C	10 °C	1 °C

Assim, foram obtidos os seguintes resultados, ilustrados nas figuras 39 a 46.

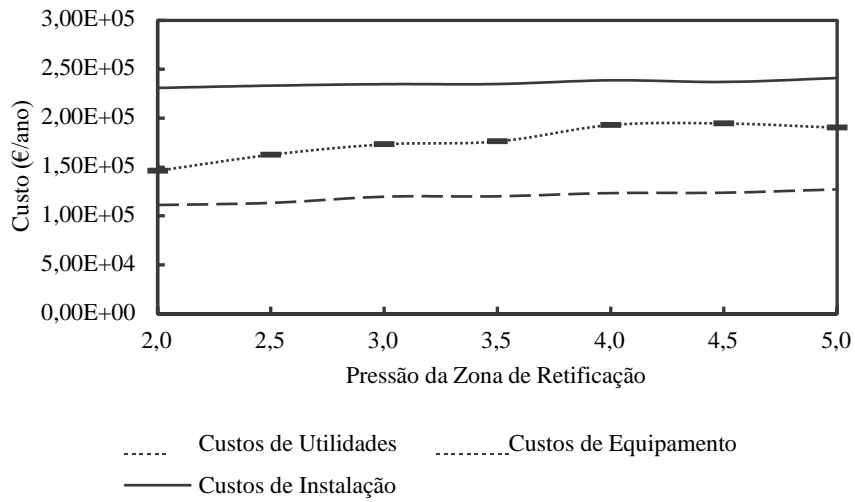


Figura 39 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da pressão da Zona de Retificação do sistema (atm), referentes ao caso de estudo II

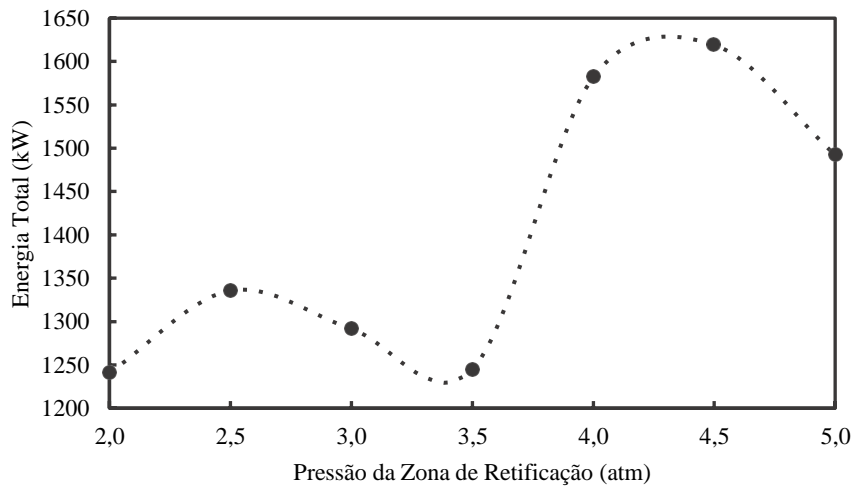


Figura 40 - Energia Total em função da pressão da Zona de Retificação do sistema (atm), referente ao caso de estudo II

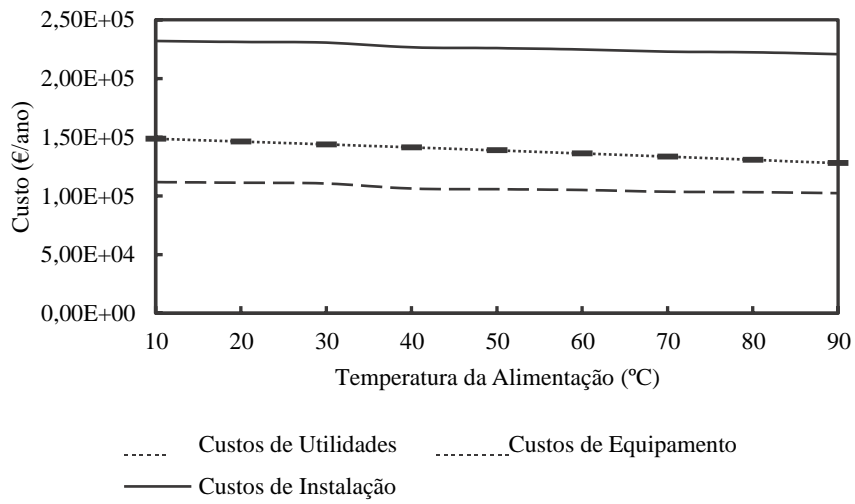


Figura 41 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função da Temperatura da Alimentação do sistema (°C), referentes ao caso de estudo II

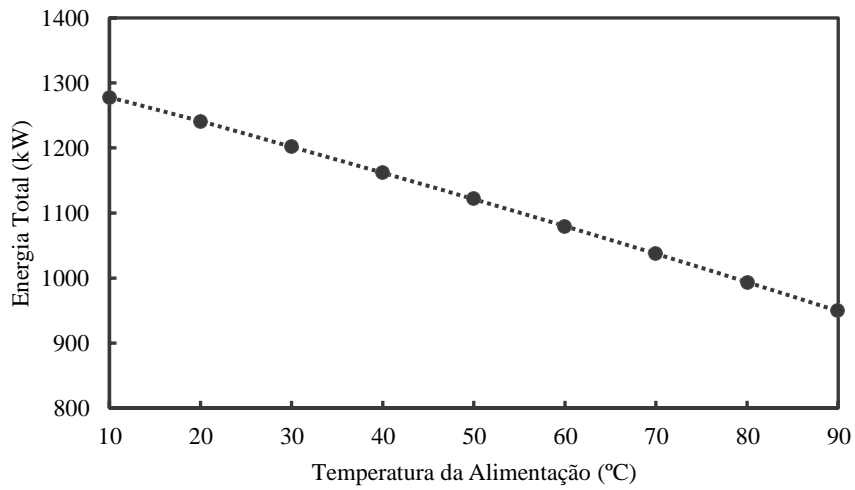


Figura 42 - Energia total em função da Temperatura de Alimentação do sistema (°C), referente ao caso de estudo II

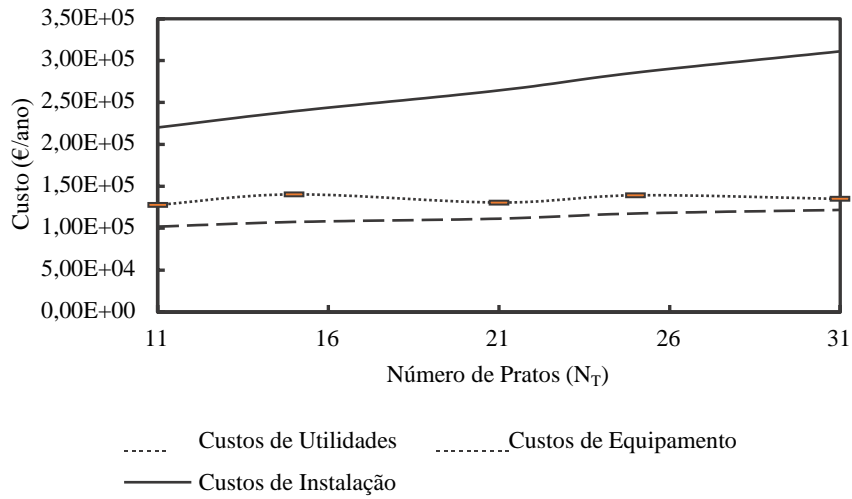


Figura 43 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função do Número de Pratos (N_T) do sistema, referentes ao caso de estudo II

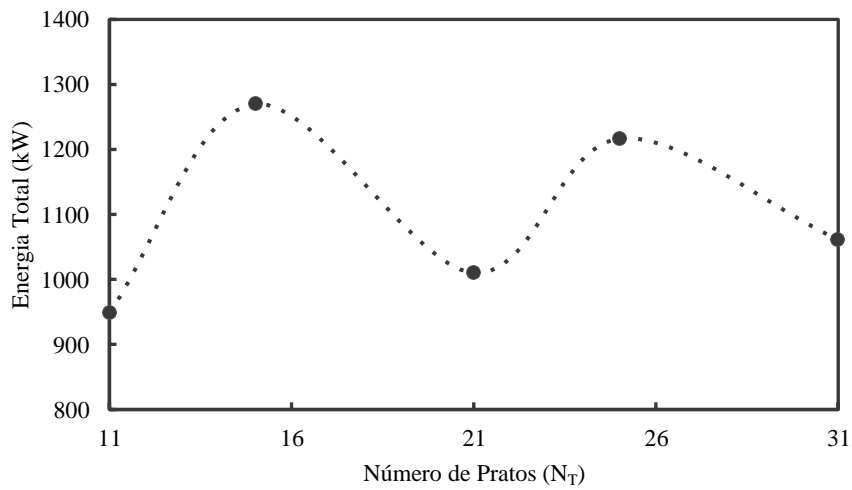


Figura 44 - Energia total em função do Número de Pratos da coluna (N_T), referente ao caso de estudo II

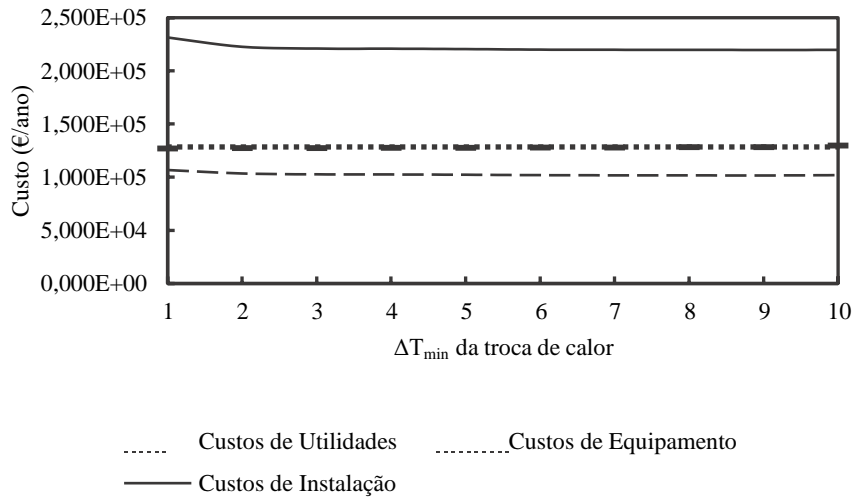


Figura 45 - Custos de Utilidades/Equipamento/Instalação em função do ΔT_{\min} de cada permutador de calor, referentes ao caso de estudo II

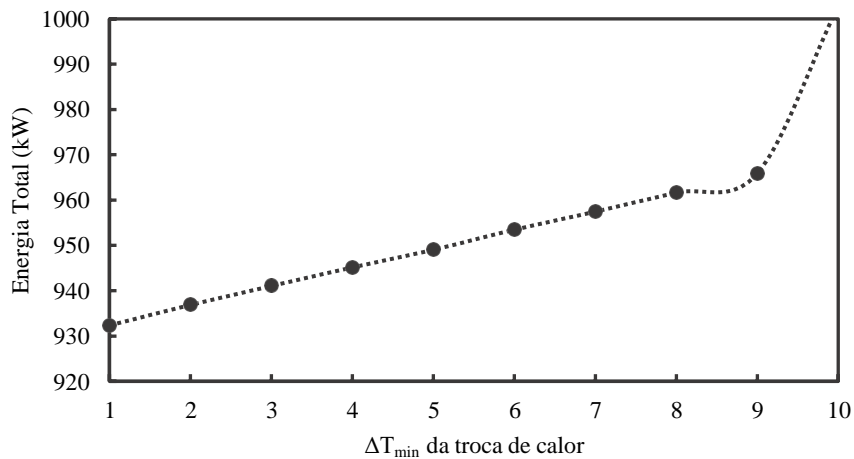


Figura 46 - Energia total em função do ΔT_{\min} de cada permutador de calor, referente ao caso de estudo II

Através da análise dos gráficos, é possível constatar na figura 39, uma relação de proporcionalidade direta, praticamente ao longo de todo o ensaio, isto é, à medida que a pressão da zona de retificação aumenta, também os custos associados ao sistema aumentam, quer estes sejam, custos de utilidades, custos de equipamento e custos de instalação.

Relativamente à energia total do sistema, apresenta um comportamento oscilatório à medida que se aumenta a pressão da secção de retificação, verificando-se um mínimo de energia gasta para 2 atm. Uma vez que, não é possível colocar o sistema a funcionar à mesma pressão em ambas as zonas da coluna, admite-se que a pressão de 2 atm é a solução ideal para a zona de retificação e 1 atm para a zona de esgotamento.

No que toca à temperatura de alimentação, verifica-se que todos os custos envolvidos no sistema apresentam uma razão de proporcionalidade inversa com a temperatura de entrada da alimentação, visto que à medida que se aumenta a temperatura do sistema, os custos associados diminuem. De igual modo, a energia necessária para o sistema também diminui com o aumento da temperatura de entrada da alimentação. Assim, observa-se que tanto os custos totais do sistema, como a energia gasta apresentam um valor mínimo quando a temperatura de entrada da alimentação é de 90 °C.

Relativamente ao ΔT_{\min} da troca de calor entre as duas zonas da coluna, verifica-se que o sistema se apresenta maioritariamente constante, apenas sendo notória a influência do ΔT_{\min} no que diz respeito aos custos operatórios do sistema. Pelo contrário, a energia necessária para o sistema operar apresenta uma razão de proporcionalidade direta com a temperatura mínima necessária para a troca de calor entre as duas zonas da coluna. Deste modo, e uma vez que se avalia os custos económicos e os valores energéticos como um todo, decidiu-se colocar o sistema a operar com um ΔT_{\min} de 5 °C.

Quanto ao número de pratos, verifica-se um comportamento oscilatório no que diz respeito aos custos operatórios e aos custos de utilidades. No sentido inverso, os custos de equipamento e os custos de instalação são diretamente proporcionais ao número de pratos. Assim, é benéfico operar com um número de pratos mais reduzido. Quanto à energia total do sistema, verifica-se também um comportamento oscilatório, apresentando o seu gasto mínimo para um total de 11 pratos.

Deste modo, as condições ideais para o sistema encontram-se representadas na tabela 9.

Tabela 9 - Condições Operatórias ideais para o sistema de Destilação com Integração Interna de Calor, referente ao caso de estudo II

Pressão da zona de retificação (atm)	Pressão da zona de esgotamento (atm)	Temperatura de Alimentação (° C)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Separação	ΔT_{\min} dos permutadores de calor (°C)
1	2	90	11	6	86 %	5

3.3.1. Influência da perda de carga no sistema de destilação com integração interna de calor

De modo análogo ao realizado para o sistema de destilação convencional, este subcapítulo tem como objetivo entender se o sistema responde melhor quando funciona com ou sem perda de carga. Deste modo, comparar-se-á cada variável de estudo otimizada para ambas as situações. Os resultados obtidos encontram-se representados na tabela 10.

Tabela 10 - Comparação entre o sistema de destilação com integração interna de calor sem e com perda de carga, para as diferentes variáveis

Variável de estudo	Destilação Convencional	Custos Totais (€/ano)	Energia do Sistema (kW)
Pressão da zona de retificação do sistema (atm)	Sem perda de carga	$2,3066 \times 10^6$	1243,5
	Com perda de carga	$2,3031 \times 10^6$	1241,1
Temperatura da alimentação (°C)	Sem perda de carga	$2,2359 \times 10^6$	949,3
	Com perda de carga	$2,2363 \times 10^6$	949,1
Número de pratos (N_T)	Sem perda de carga	$2,2359 \times 10^6$	949,3
	Com perda de carga	$2,2363 \times 10^6$	949,1
ΔT_{\min} da troca de calor	Sem perda de carga	$2,2359 \times 10^6$	949,3
	Com perda de carga	$2,2363 \times 10^6$	949,1

Relativamente ao estudo da pressão da zona de retificação do sistema, constatou-se que os custos totais do sistema e a energia total são menores quando o sistema opera com perda de carga.

Quanto ao estudo da temperatura de alimentação do sistema, demonstrou valores económicos bastante similares. No entanto, os mesmos demonstraram ser superiores quando a coluna operou com perda de carga. No que toca aos valores energéticos, revelaram-se superiores quando o sistema operou sem perda de carga.

Quanto ao estudo do número de pratos (N_T), foi possível concluir que os custos totais do sistema foram superiores quando a simulação funcionou com a existência de perda de carga. Contudo, os valores energéticos do sistema, revelaram-se inversos, favorecendo o sistema com perda de carga. Por fim, verifica-se que os valores obtidos para o ΔT_{\min} da troca de calor são semelhantes aos obtidos para o estudo do número de pratos (N_T), pelo que a análise descrita acima é idêntica.

Em suma, através dos resultados obtidos, verifica-se que o sistema não é particularmente influenciado pela existência de perda de carga, dado que os valores económicos e energéticos são bastante semelhantes para ambos os casos. Uma vez que se pretende estudar detalhadamente o sistema de destilação, decidiu-se trabalhar para os casos de estudo adiante com a existência de perda de carga.

3.4. Comparação entre o sistema de destilação convencional e o sistema de destilação com integração interna de calor

3.4.1. Caso de estudo III- Condições Ideais

Primeiramente, é necessário implementar as condições operatórias de ambos os sistemas de destilação. De modo a ser possível comparar os dois sistemas, estas condições iniciais serão as mais aproximadas possíveis, exceto os casos onde tal é inexecutável. As condições operatórias para o caso de estudo III encontram-se representadas nas tabelas 11 e 12:

Tabela 11 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo III

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	1	11	6	0,8769	0,8754

Tabela 12 - Condições Operatórias do Sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo III

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	1	2	11	6	0,8769	0,8754

Definidas as condições de operação, o ensaio foi realizado tendo-se obtidos os resultados dos apresentados nas figuras 47 a 51.

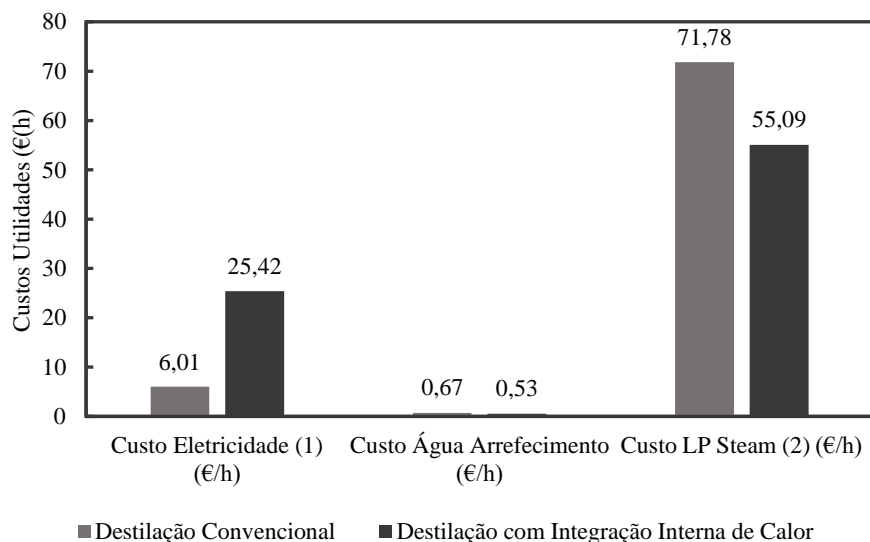


Figura 47 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

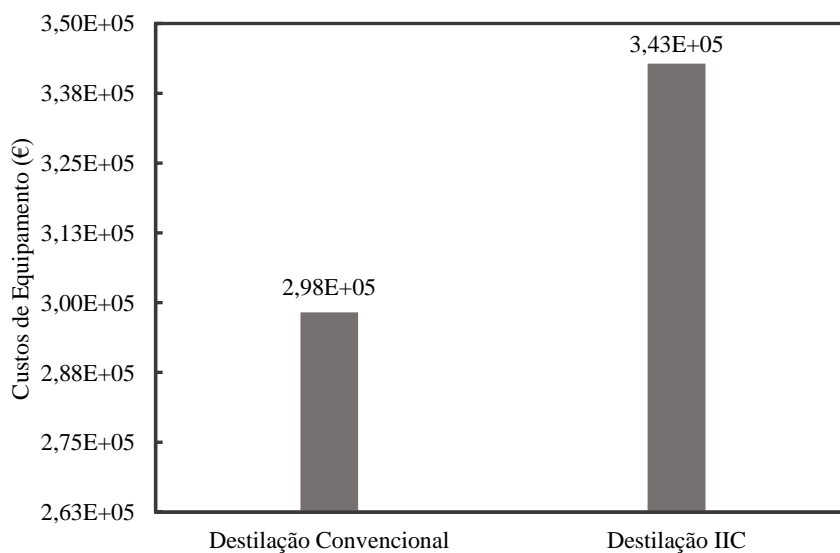


Figura 48 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

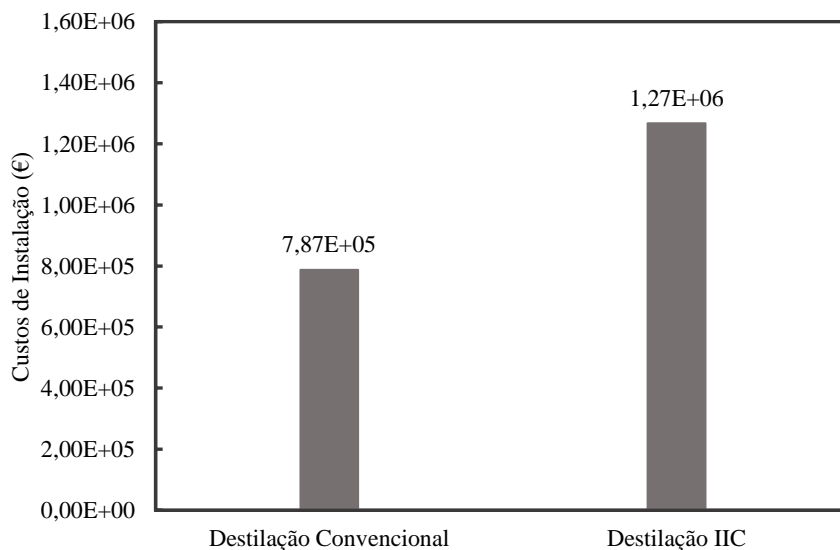


Figura 49 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

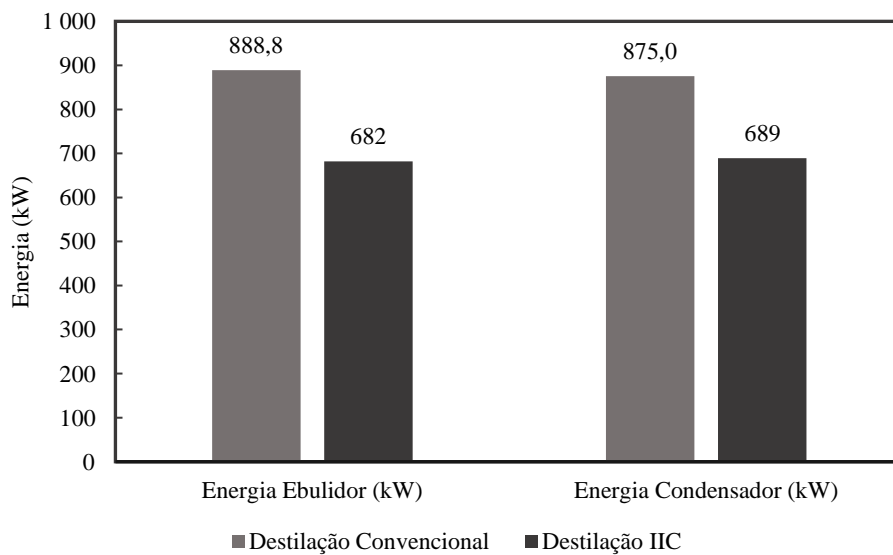


Figura 50 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

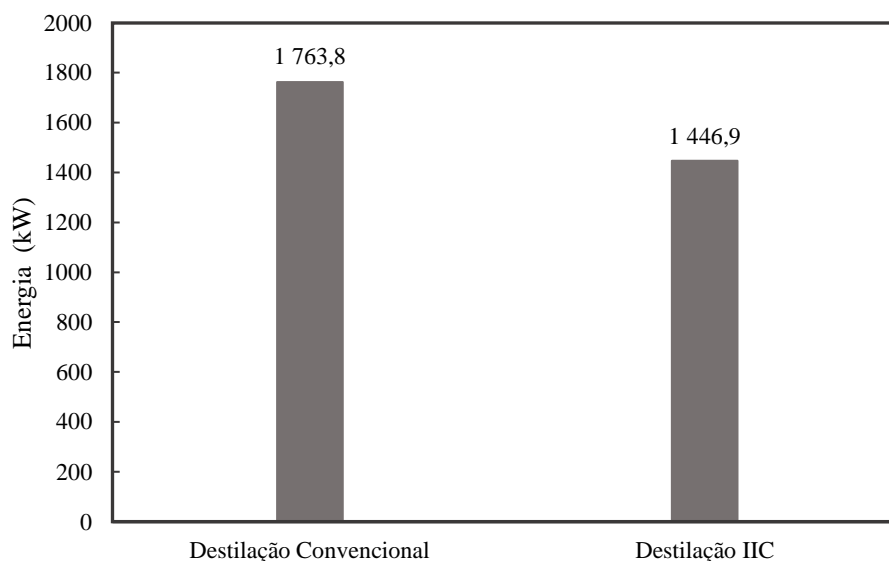


Figura 51 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo III, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos, é possível constatar as diferenças económicas e energéticas entre os dois tipos de destilação. Quanto aos custos de utilidades, isto é, os custos de eletricidade, custo de água de arrefecimento e custo de vapor de baixa pressão, podemos notar uma diferença significativa, no que diz respeito à água de arrefecimento e ao vapor de baixa pressão, dado que a destilação com integração tem um custo económico de somente metade, quando comparada com a destilação convencional. Relativamente aos custos de eletricidade, a destilação com recurso a trocas de calor, necessita de um investimento 4 vezes maior uma vez que necessita de um compressor para atingir a pressão desejada, aumentando assim os custos de eletricidade. Tendo em consideração todos os custos de utilidades, não é possível observar qualquer poupança significativa que ocorra quando o sistema opera com integração interna de calor.

No que diz respeito aos custos de instalação e custos de equipamento, pode verificar-se um custo de investimento muito superior para a destilação com integração interna de calor. Uma vez que existem mais equipamentos e uma maior dificuldade para a destilação ocorrer, estes valores eram os esperados face à destilação convencional, bastante mais simples.

Tendo em consideração os níveis energéticos, foi possível observar valores muito diferentes em relação aos dois tipos de destilação. No primeiro caso, na destilação convencional, temos valores na ordem dos 1763 kW (divididos por ebulidor e condensador), face aos 1446 kW necessários para ocorrer a destilação com integração interna de calor (divididos por ebulidor, condensador e compressor). Assim, verifica-se que a utilização do sistema com integração torna-se altamente necessária, dado que revelou valores de poupança na ordem dos 18%, valores desejáveis para uma alta rentabilidade energética da indústria. Desta forma, tendo em conta os valores obtidos

anteriormente, para este caso de estudo em concreto, verifica-se que não é benéfico trabalhar com o sistema com integração de calor.

3.4.2. Caso de estudo IV – Condições Iniciais

No caso de estudo IV, pretende-se implementar as condições inicialmente definidas para ambos os tipos de destilação, de modo a perceber a influência nos custos energéticos e económicos, dos dois sistemas e compará-los, analogamente ao caso de estudo anterior. As condições operatórias para o caso de estudo IV encontram-se representadas nas tabelas 13 e 14:

Tabela 13 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo IV

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	1	11	6	0,8769	0,8754

Tabela 14 - Condições Operatórias do Sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo IV

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	1	2	11	6	0,8769	0,8754

Após a realização de ambos os ensaios no simulador Aspen HYSYS[®], construíram-se seguintes os gráficos apresentados nas figuras 52 a 56 com os resultados obtidos:

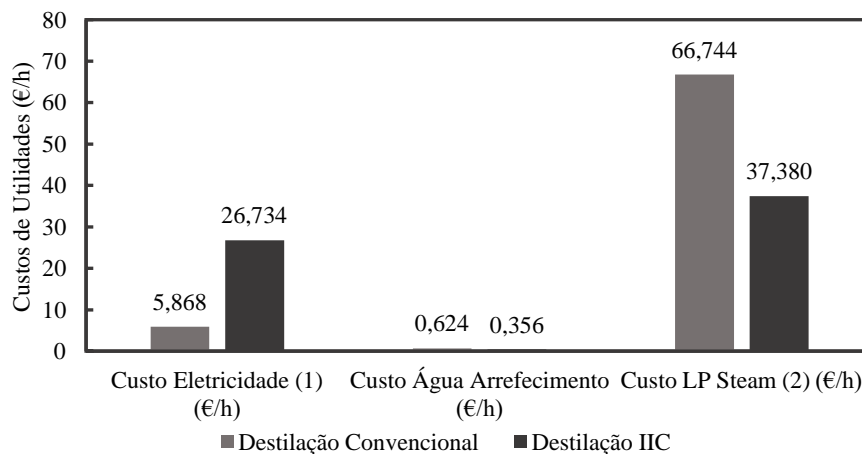


Figura 52- Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

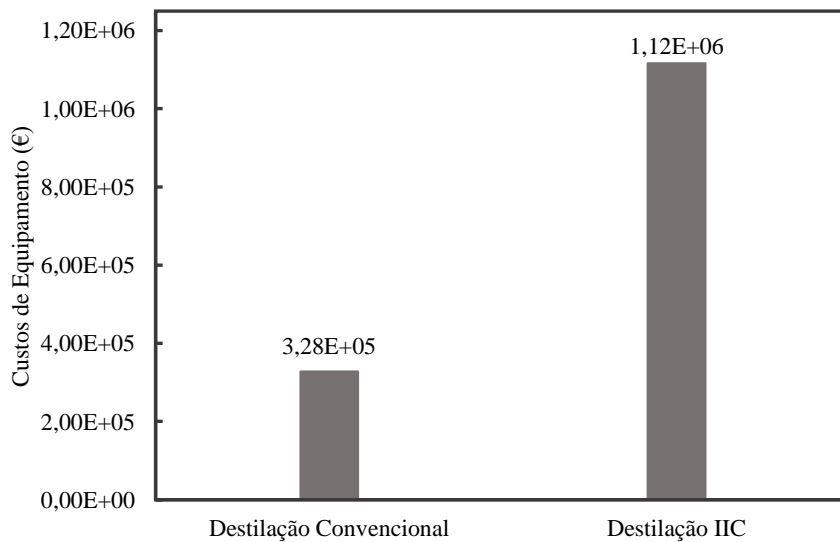


Figura 53 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

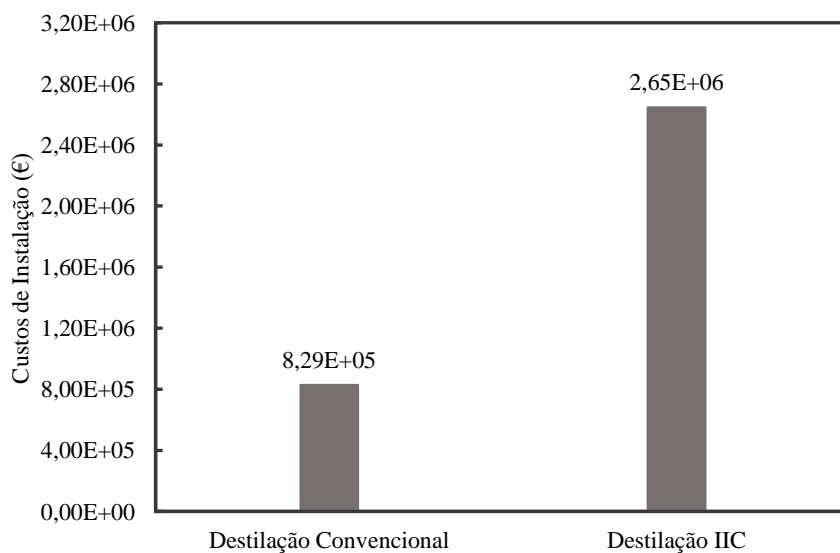


Figura 54 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

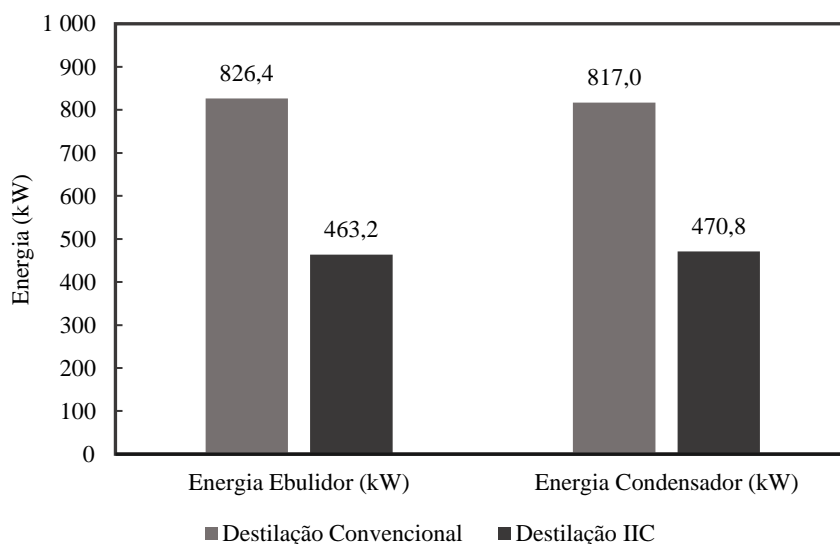


Figura 55 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

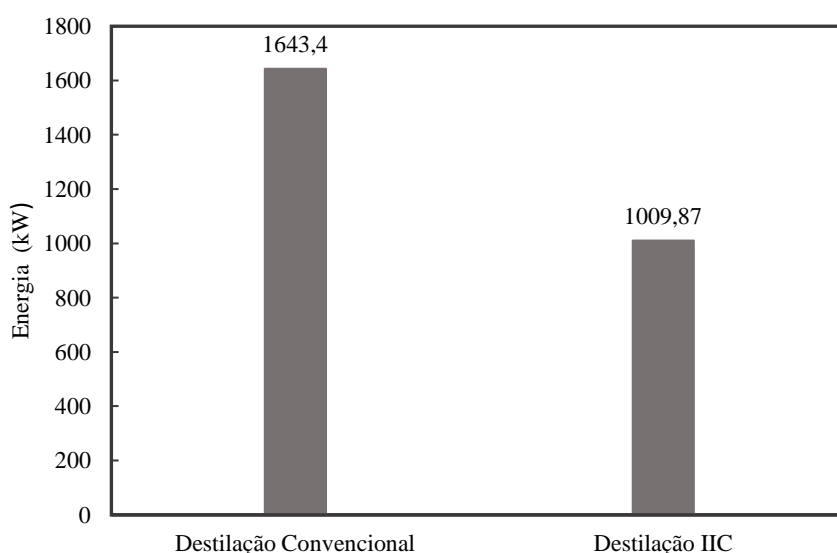


Figura 56 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo IV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos, é possível constatar as diferenças económicas e energéticas entre os dois tipos de destilação. Quanto aos custos de utilidades, onde podemos integrar os custos de eletricidade, os custos de água de arrefecimento e custos de vapor de baixa pressão, podemos notar uma diferença significativa no que diz respeito à água de arrefecimento e ao vapor de baixa pressão, dado que a destilação convencional requer o dobro dos custos, face aos que são necessários para a destilação com integração de calor. Analogamente ao sucedido no caso de estudo anterior, verificou-se a necessidade de um maior investimento nos custos da eletricidade, 4 vezes superior para a destilação com integração de calor. Em suma, ao utilizar o sistema com integração de calor, estamos a poupar cerca de 76 000 € ao ano, valor este bastante significativo para uma rentabilidade energética na Indústria.

No que diz respeito aos custos de instalação e custos de equipamento, a destilação com integração interna de calor carece de um custo de investimento muito superior face à destilação convencional. Dado que existem mais equipamentos e uma maior dificuldade para a destilação ocorrer, estes valores eram os esperados, perante a destilação convencional, bastante mais simples.

Tendo em consideração os valores energéticos, foi possível observar valores muito diferentes entre os dois tipos de destilação. No primeiro caso, na destilação convencional, temos valores na ordem dos 1644 kW para a destilação ser bem-sucedida, (divididos por ebulidor e condensador), contrariamente aos 1009 kW necessários para ocorrer a destilação com integração interna de calor (divididos por ebulidor, condensador e compressor). Deste modo, e mais uma vez, constatou-se a imprescindibilidade da implementação dos sistemas de destilação com integração de calor, em termos energéticos. Uma vez que na indústria é altamente necessário a existência de rentabilidade energética, as poupanças na ordem dos 38% para a destilação com integração de calor, revelam mais um ponto favorável para a sua implementação.

Em suma, verifica-se uma poupança de 92 000 € anuais, perante um investimento adicional de 2 600 620 €. Assim, estes valores resultam num tempo de retorno de aproximadamente 34 anos.

3.4.3. Aumento do n.º de pratos do sistema (caso de estudo V)

No caso de estudo V pretende-se aumentar o número de pratos da coluna de ambos os sistemas, de modo a perceber a influência na mesma nos custos dos dois sistemas e compará-los, como feito no caso de estudo anterior. Em seguida, apresentam-se as condições implementadas no simulador para os dois sistemas de destilação.

Tabela 15 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo V

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	1	31	16	0,9130	0,9132

Tabela 16 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo V

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	1	2	31	16	0,9130	0,9132

Após a simulação do ensaio para ambos os sistemas, foi possível obter os seguintes resultados, representados graficamente em seguida:

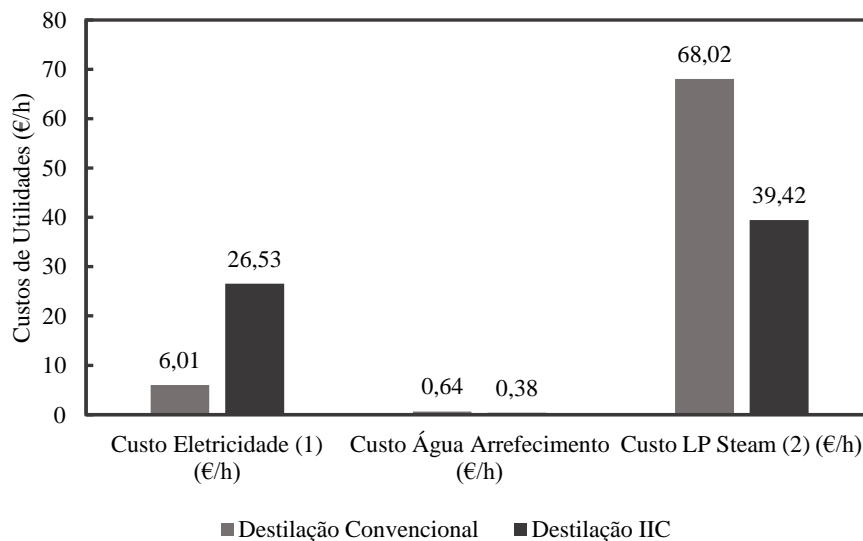


Figura 57 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

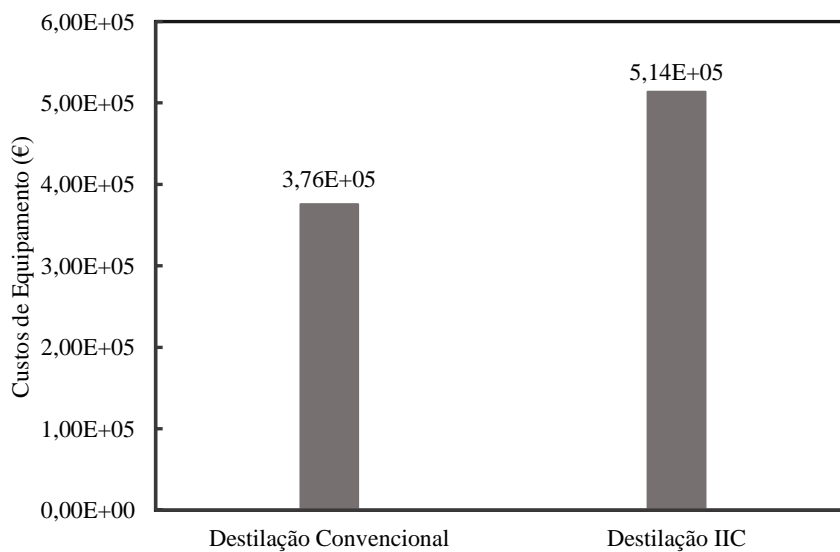


Figura 58 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

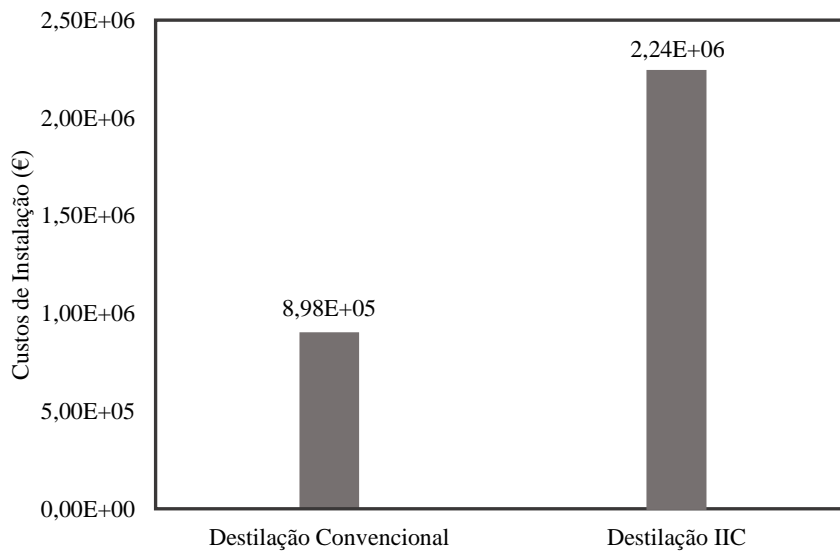


Figura 59 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

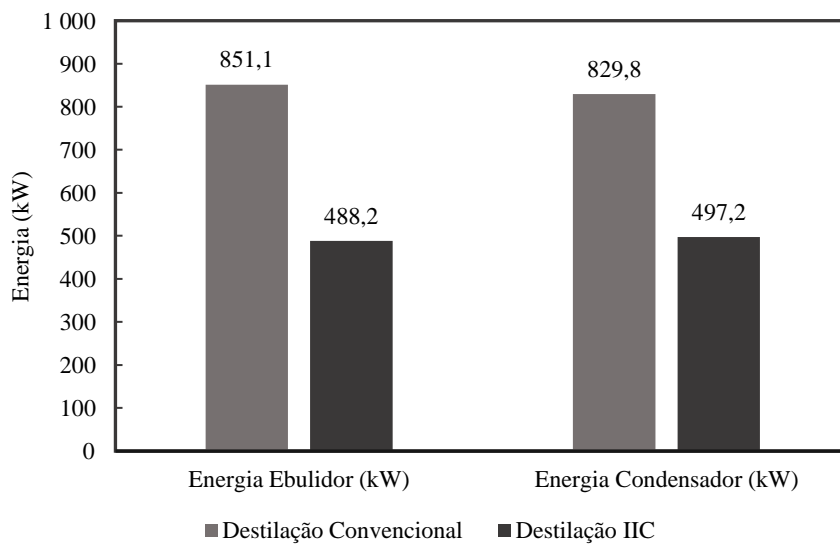


Figura 60 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

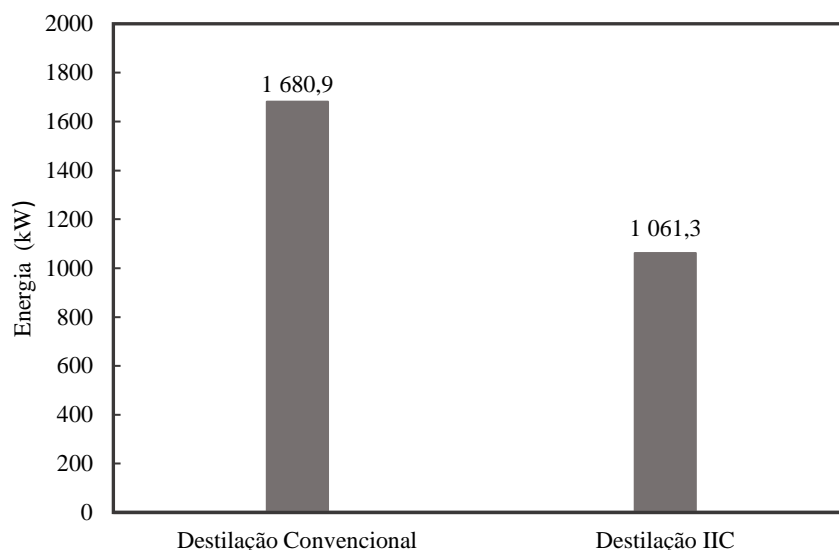


Figura 61 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo V, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Tendo em consideração os resultados obtidos, podemos novamente destacar as diferenças económicas e energéticas entre os dois tipos de destilação. Inicialmente, quanto aos custos de utilidades, onde podemos abranger os custos de eletricidade, os custos de água de arrefecimento e custos de vapor de baixa pressão, podemos notar uma diferença significativa no que diz respeito à água de arrefecimento e ao vapor de baixa pressão, dado que a destilação convencional requer o dobro dos custos face aos que são necessários para a destilação com integração de calor. Analogamente ao sucedido no caso de estudo anterior, verificou-se a necessidade de um maior investimento nos custos da eletricidade, investimento esse 4 vezes superior para a destilação com integração de calor. Em suma, ao utilizar o sistema com integração de calor, pode-se observar uma poupança de aproximadamente 73 200 € ao ano, valor este que contribui para uma elevada rentabilidade energética na indústria. De acordo com os resultados obtidos anteriormente, não se verifica uma relação de proporcionalidade direta entre o número de pratos da coluna (N_T) e a poupança anual aliada aos custos de utilidades do sistema, apesar de existir sempre uma elevada poupança.

No que diz respeito aos custos de instalação e custos de equipamento, a destilação com integração interna de calor necessita de um custo de investimento muito superior face à destilação convencional. Uma vez que a destilação com integração requer mais unidades de equipamento e a separação dos componentes é mais difícil devido à existência de troca de calor, os valores estão congruentes com os esperados.

Relativamente aos valores energéticos, mais uma vez, foi possível observar valores muito diferentes entre os dois tipos de destilação. No primeiro caso, na destilação convencional, temos

valores na ordem dos 1681 kW para a destilação ser bem-sucedida, (divididos por ebulidor e condensador), contrariamente aos 1061 kW necessários para ocorrer a destilação com integração interna de calor (divididos por ebulidor, condensador e compressor). Deste modo, e mais uma vez, constatou-se a imprescindibilidade da implementação dos sistemas de destilação com integração de calor, em termos energéticos.

Com os resultados obtidos neste caso de estudo, podemos observar a necessidade de um investimento adicional de aproximadamente 1 481 200 €, porém, existe a poupança de 73 200 € ao ano, valor já mencionado anteriormente. Assim, estes valores traduzem-se num tempo de amortização de 20 anos. Deste modo, verifica-se que com o aumento da altura da coluna, o tempo de retorno esperado para o investimento adicional é menor.

3.4.4. Aumento da pressão operatória do sistema (caso de estudo VI)

No caso de estudo VI, pretende-se aumentar a pressão operatória da coluna de ambos os sistemas, de modo a perceber a influência da mesma, nos custos dos dois sistemas e compará-los, como feito nos casos de estudos anteriores. Em seguida, apresentam-se as condições implementadas no simulador para os dois sistemas de destilação nas tabelas 17 e 18:

Tabela 17 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo VI

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	11	6	0,8968	0,8953

Tabela 18 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo VI

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	3	11	6	0,8968	0,8953

Após a realização de ambos os ensaios no simulador Aspen HYSYS[®], construíram-se seguintes os gráficos apresentados nas figuras 62 a 66 com os resultados obtidos:

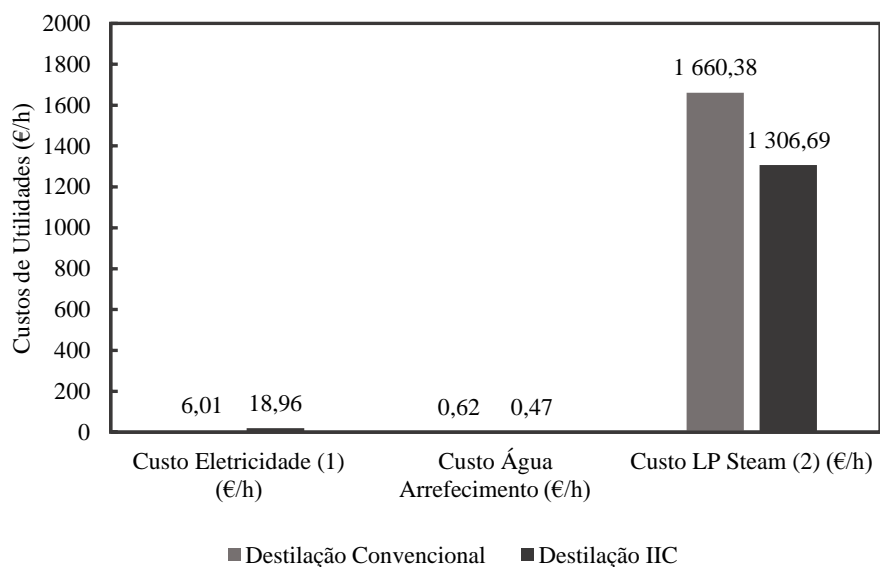


Figura 62 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

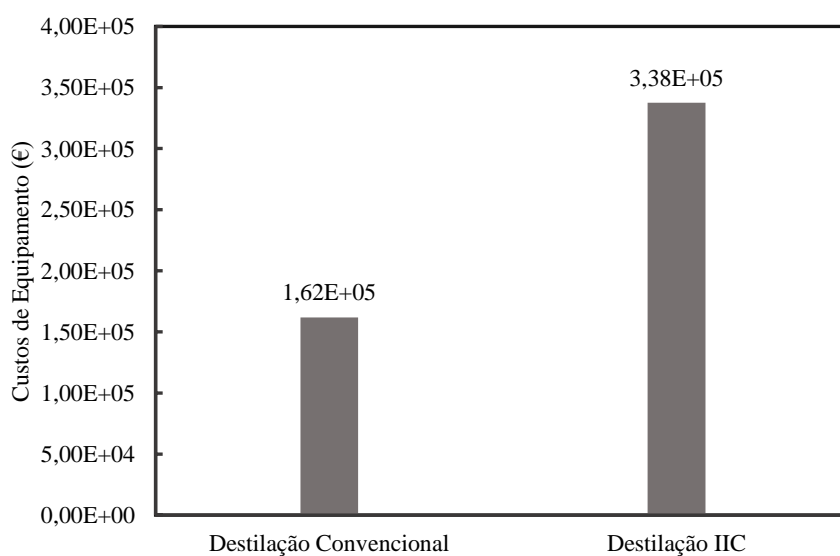


Figura 63 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

³Para este caso de estudo foi necessário recorrer ao poder calorífico do Gás Natural, retirado do Despacho n.º 17313/2008

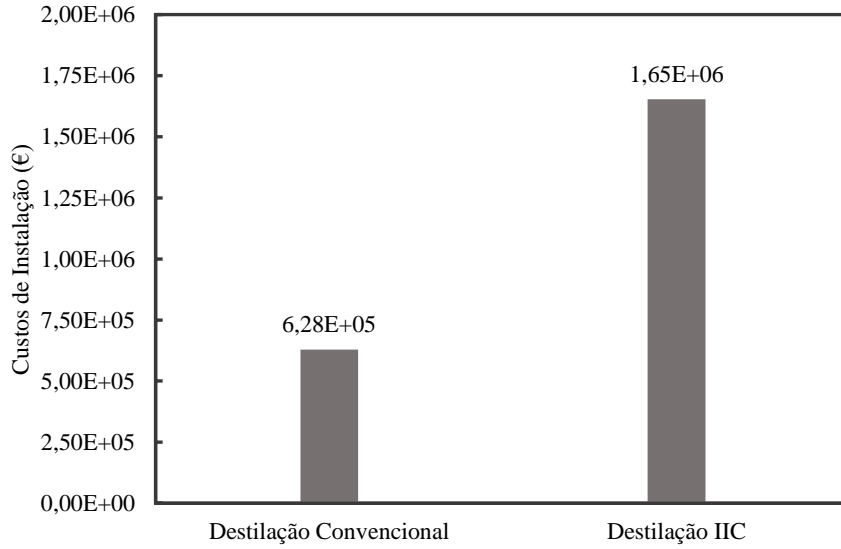


Figura 64 - Custos de Instalações, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

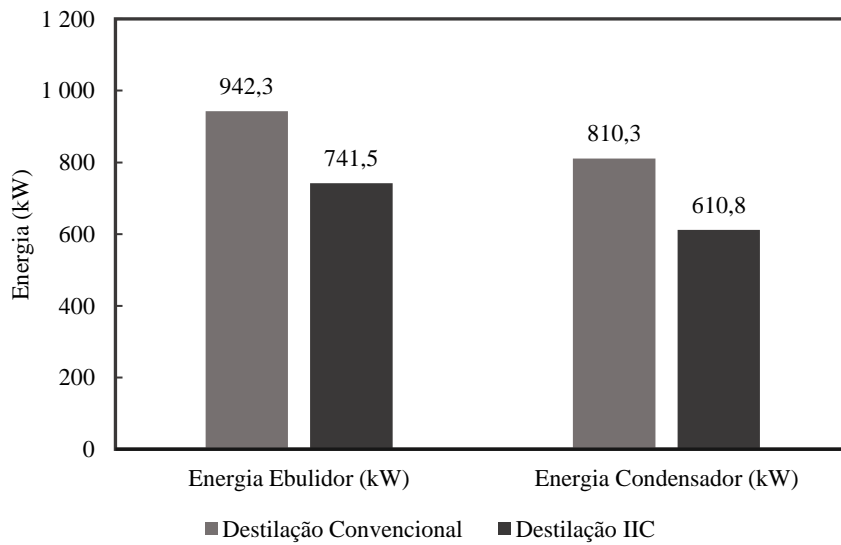


Figura 65- Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

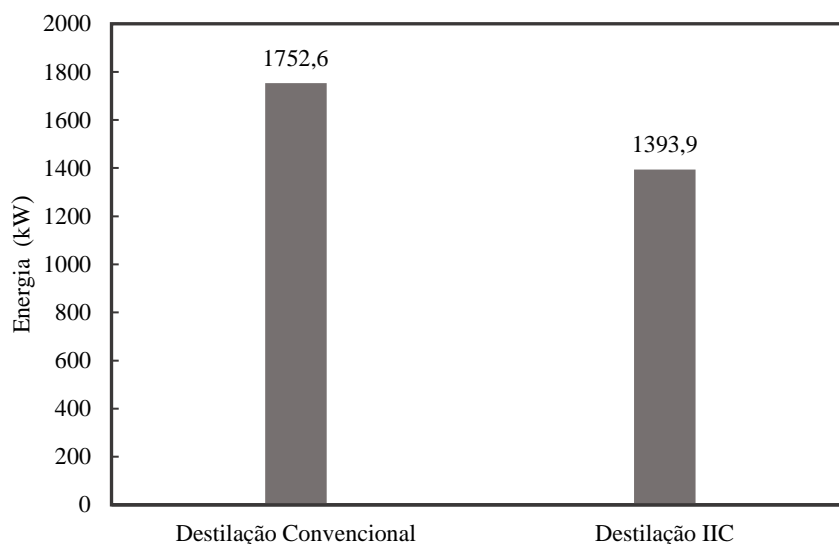


Figura 66 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo VI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

De acordo com os resultados obtidos, é possível constatar as diferenças quer em termos económicos, quer em termos energéticos. Em primeiro lugar, relativamente aos custos de utilidades, onde podemos incluir os custos de eletricidade, os custos de água de arrefecimento e custos de vapor de baixa pressão, podemos apontar uma diferença significativa no que diz respeito à água de arrefecimento e ao vapor de baixa pressão, dado que a destilação convencional requer um valor de custos maiores face aos que são necessários para a destilação com integração de calor. Em concordância com o sucedido nos casos de estudo anteriores, verificou-se a necessidade de um maior investimento nos custos da eletricidade, superior para a destilação com integração de calor. Relativamente ao vapor de baixa pressão, verificou-se uma elevada diferença nos custos. Enquanto na destilação convencional necessitamos de um gasto de 1660 €/h, na destilação com integração interna de calor, verifica-se uma poupança de aproximadamente 353 €/h, valor este que tem um impacto bastante considerável na poupança de utilidades total, onde este valor é na ordem de 2,9 M €/ano.

No que diz respeito aos custos de instalação e custos de equipamento, a destilação com integração interna de calor necessita de um custo de investimento superior à destilação convencional, onde se observa uma necessidade de um investimento adicional de 1 201 000 € para a destilação com integração de calor.

Relativamente aos valores energéticos de ambos os sistemas, o sistema com integração verificou-se mais rentável, traduzido no decréscimo de 358 kW, revelando uma poupança energética de aproximadamente 20 %.

Em suma, este caso de estudo revelou que o sistema com integração de calor é muito mais apelativo, quer em termos económicos, quer em termos energéticos. Contrariamente ao sucedido nos casos de estudo anteriores, onde existia a necessidade de esperar vários anos até o sistema ser rentável, este caso de estudo demonstrou que o sistema pode ser rentável ao fim de 3 meses. Deste modo, verifica-se a necessidade de implementação destes tipos de sistema em termos industriais constatando-se da mesma maneira que o aumento da pressão do sistema se torna benéfico para uma indústria economicamente mais atrativa.

3.4.5. Aumento da pressão do sistema (caso de estudo VII)

No caso de estudo VII, pretende-se novamente aumentar a pressão operatória da coluna de ambos os sistemas, de modo a perceber a influência da mesma, nos custos dos dois sistemas e compará-los, como feito nos casos de estudos anteriores. Em seguida, apresentam-se as condições implementadas no simulador para os dois sistemas de destilação, nas tabelas 19 e 20 e os resultados obtidos para este caso de estudo, nas figuras 67 a 71.

Tabela 19-Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo VII

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	3	11	6	0,8781	0,8815

Tabela 20 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo VII

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	3	5	11	6	0,8781	0,8815

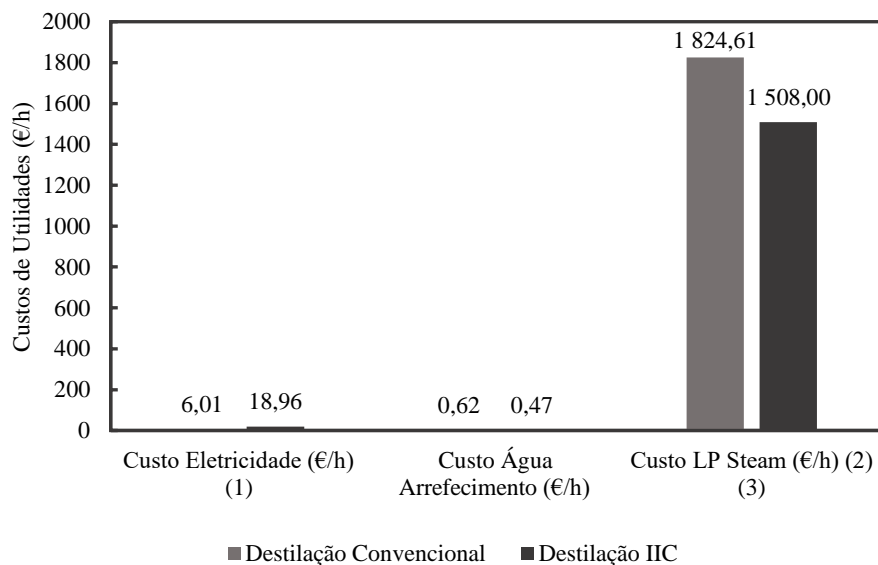


Figura 67 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

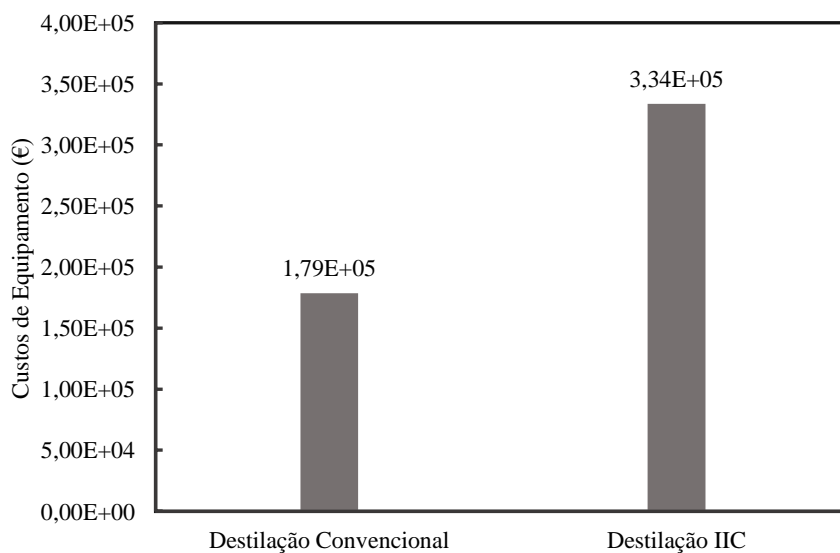


Figura 68 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

³Para este caso de estudo foi necessário recorrer ao poder calorífico do Gás Natural, retirado do Despacho n.º 17313/2008

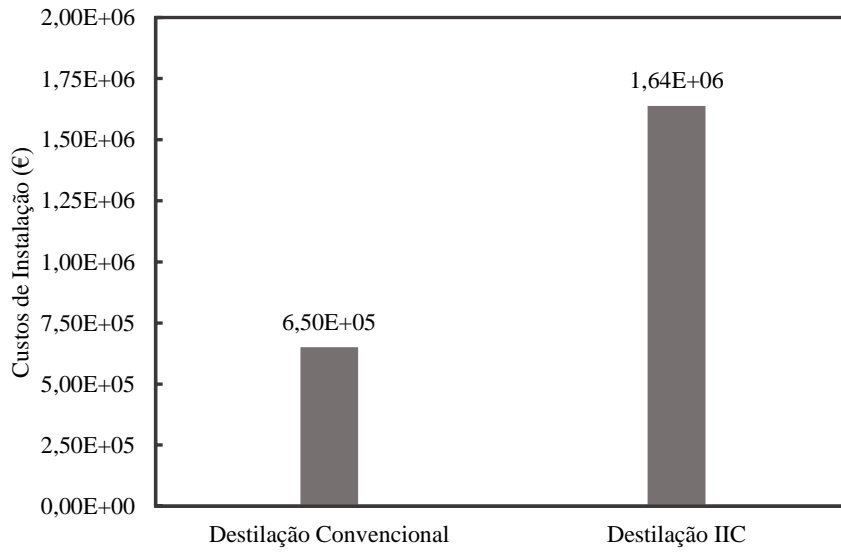


Figura 69 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

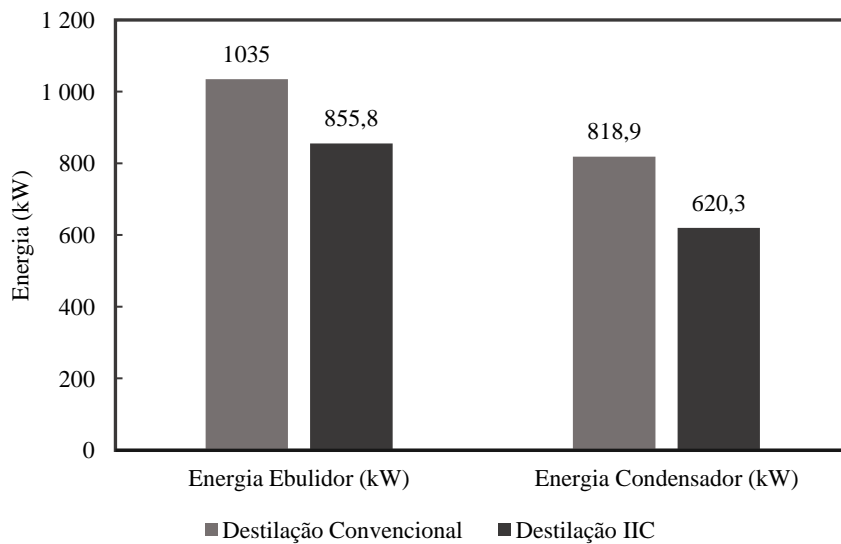


Figura 70 - Energias gastas pelo Ebulidor e Condensador, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

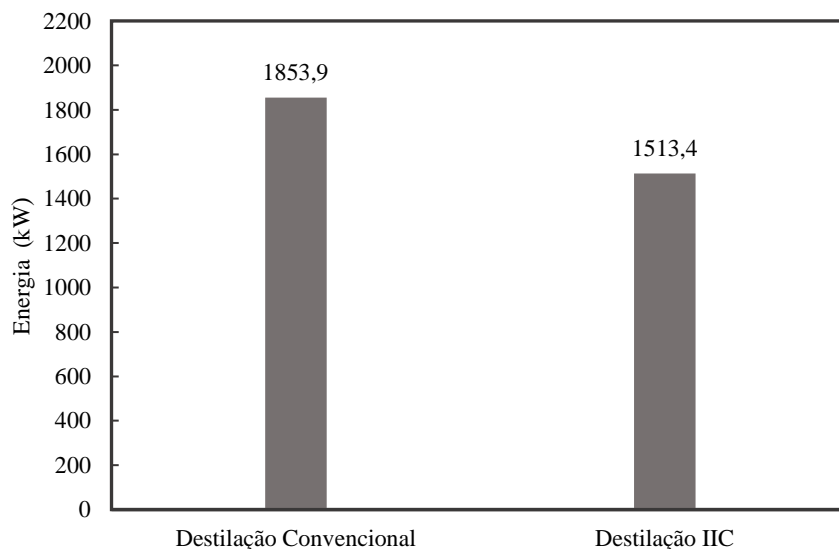


Figura 71 - Energias totais necessárias, referentes ao caso de estudo VII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos neste caso de estudo é possível comprovar as diferenças entre ambos os sistemas em termos energéticos e económicos. Em primeiro lugar, quanto aos custos de utilidades, onde podemos destacar os custos de eletricidade, os custos de água de arrefecimento e custos de vapor de baixa pressão, podemos apontar uma diferença significativa em todos estes parâmetros. Em concordância com o sucedido nos casos de estudo anteriores, verificou-se a necessidade de um maior investimento nos custos da eletricidade, superior para a destilação com integração de calor, sendo este investimento o menor até agora para todos os casos de estudo. Relativamente ao vapor de baixa pressão, verificou-se uma elevada diferença nos custos. Enquanto na destilação convencional, necessitamos de um gasto de 1824 €/h, na destilação com integração interna de calor, verifica-se uma poupança de aproximadamente 316 €/h, valor este que tem um impacto bastante considerável na poupança de utilidades total, onde este valor é na ordem de 2,6 M €/ano.

No que diz respeito aos custos de instalação e custos de equipamento, a destilação com integração interna de calor necessita novamente de um custo de investimento superior face à destilação convencional, onde se observa uma necessidade de um capital adicional de 1 143 200 € para a destilação com integração de calor.

Relativamente aos valores energéticos de ambos os sistemas, neste caso de estudo, voltaram-se a observar diferenças significativas. Pôde-se novamente destacar uma poupança no consumo de energia de aproximadamente 18 %, refletidos nos 340 kW de diferença entre ambos os sistemas, com vantagens para o sistema com integração de calor.

Em suma, este caso de estudo revelou que o sistema onde existe trocas de calor entre a parte superior e a parte inferior da coluna, é muito mais apelativo quer em termos económicos, quer em termos energéticos. Contrariamente ao sucedido nos primeiros dois casos de estudo (III e IV), onde existia a necessidade de esperar vários anos, até o sistema ser rentável, este Caso de estudo demonstrou que o sistema pode sê-lo imediatamente, onde se verifica um *payback time* de pouco mais de três meses. Deste modo, e de modo análogo a todos os casos de estudo, verifica-se a necessidade de implementação destes tipos de sistema em termos industriais.

3.5. Análise de Sensibilidade

Neste subcapítulo pretende-se realizar uma análise de sensibilidade face ao custo de eletricidade e do gás natural. Para cada fator, irão ser realizados dois casos de estudos distintos.

3.5.1. Custo de eletricidade

Pretende-se realizar uma análise de sensibilidade ao custo da eletricidade, de modo a verificar a sua influência nos custos de utilidades e posterior *payback time*. Em primeiro lugar, irá ser realizado um ensaio com um acréscimo de 5 % ao valor da eletricidade. Em seguida, irá ser realizado outro ensaio com um acréscimo de 10 %. As condições experimentais utilizadas para esta análise de sensibilidade serão as mesmas condições do caso de estudo III.

3.5.1.1. Acréscimo de 5 % face ao valor do custo da eletricidade (caso de estudo VIII)

No caso de estudo VIII, pretende-se aumentar em 5 % o valor do custo de eletricidade, e verificar a sua influência nos custos de utilidades e *payback time*. Em seguida, apresentam-se os resultados obtidos para este ensaio na figura 72.

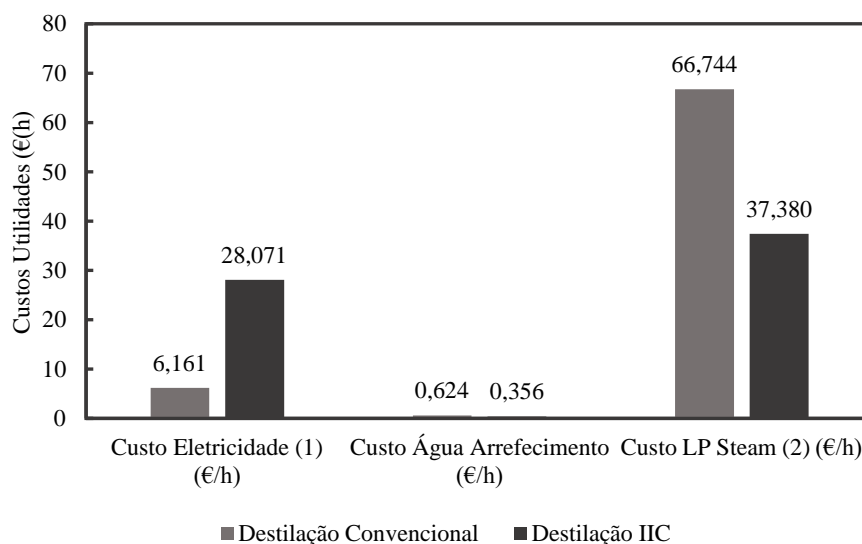


Figura 72 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo VIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos, e comparativamente aos resultados obtidos em 3.1, verifica-se, como era esperado, um aumento do custo de eletricidade que se traduz num aumento dos custos de utilidades do sistema. Uma vez que, apenas o custo de eletricidade sofreu alterações, nenhum dos outros custos foi afetado, exceto os custos totais do sistema. Assim, verifica-se uma poupança de 67 689 €/ano em termos de custos de utilidades, inferior ao demonstrado no caso de estudo III. Deste modo, o *payback time* neste ensaio é superior, estando fixado em 38,5 anos.

3.5.1.2. Acréscimo de 10 % face ao valor do custo da eletricidade (caso de estudo IX)

No caso de estudo IX, pretende-se aumentar em 10 % o valor do custo de eletricidade e verificar a sua influência nos custos de utilidade e posterior *payback time*. Em seguida, apresentam-se os resultados obtidos para este ensaio, na figura 73.

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

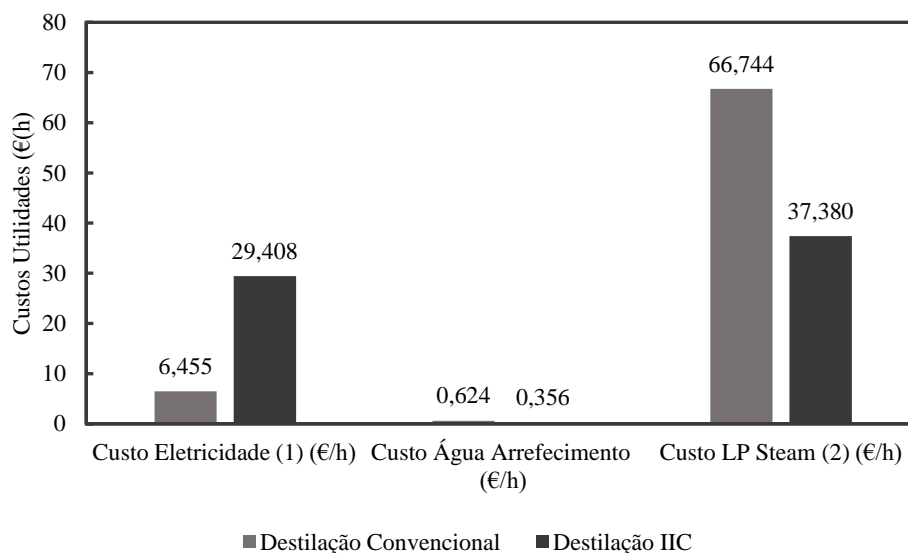


Figura 73 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo IX, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos, e comparativamente aos resultados obtidos em 3.1, verifica-se, como era esperado, um aumento do custo de eletricidade que se traduz num aumento dos custos de utilidades do sistema. Uma vez que, apenas os custos de eletricidade sofreram alterações, nenhum dos outros custos foi afetado, exceto os custos totais do sistema. Assim, verifica-se uma poupança de 58 544 €/ano em termos de custos de utilidades, inferior ao demonstrado no caso de estudo III. Uma vez que o valor poupado por ano voltou a descer, o *payback time* voltou a aumentar, apresentando um valor de 44,5 anos.

Em suma, e tendo em consideração os dois casos de estudo realizados para a análise de sensibilidade do custo de eletricidade, verifica-se que este aumento não é benéfico para o sistema de integração de calor, uma vez que com este aumento, existe um *payback time* superior ao que seria desejado.

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

3.5.2. Custo do gás natural

Em seguida, pretende-se fazer uma análise de sensibilidade ao custo do gás natural, de modo a verificar a sua influência nos custos de utilidades e posterior *payback time*. Em primeiro lugar, irá ser realizado um ensaio com um acréscimo de 5 % ao valor do custo do gás natural. Posteriormente, irá ser realizado outro ensaio com um acréscimo de 10 %. As condições experimentais utilizadas para esta análise de sensibilidade serão as mesmas condições do caso de estudo III.

3.5.2.1. Acréscimo de 5 % face ao valor do custo do gás natural (caso de estudo X)

No caso de estudo X, pretende-se aumentar em 5 % o custo do gás natural e perceber o seu impacto nos custos de utilidades e também no tempo de retorno de investimento. Deste modo, os resultados obtidos para o primeiro ensaio foram os seguintes:

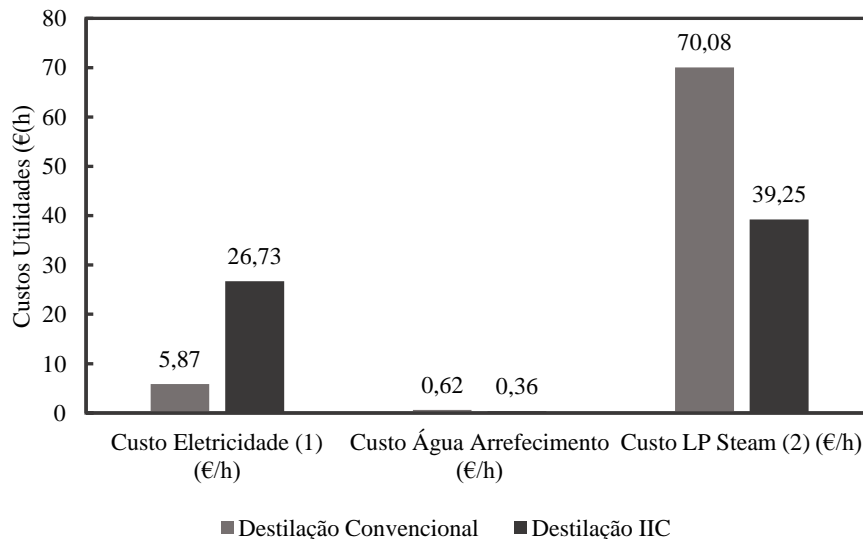


Figura 74 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo X, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos neste ensaio e comparativamente aos resultados obtidos em 3.1, é possível verificar um aumento nos custos do gás natural, observando-se uma diferença superior entre os gastos dos dois tipos de destilação, face ao que acontecia no caso de estudo III. Deste modo, com o aumento do custo do gás natural, existe uma poupança superior, sendo este valor de 89 706 €/ano, levando a um *payback time* inferior, estando este valor próximo dos 29 anos.

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

3.5.2.2. Acréscimo de 10 % face ao valor do custo do gás natural (caso de estudo XI)

No caso de estudo XI, pretende-se aumentar em 10 % o custo do gás natural e perceber o seu impacto nos custos de utilidades e também no tempo de retorno de investimento. Deste modo, os resultados obtidos para o primeiro ensaio foram os seguintes:

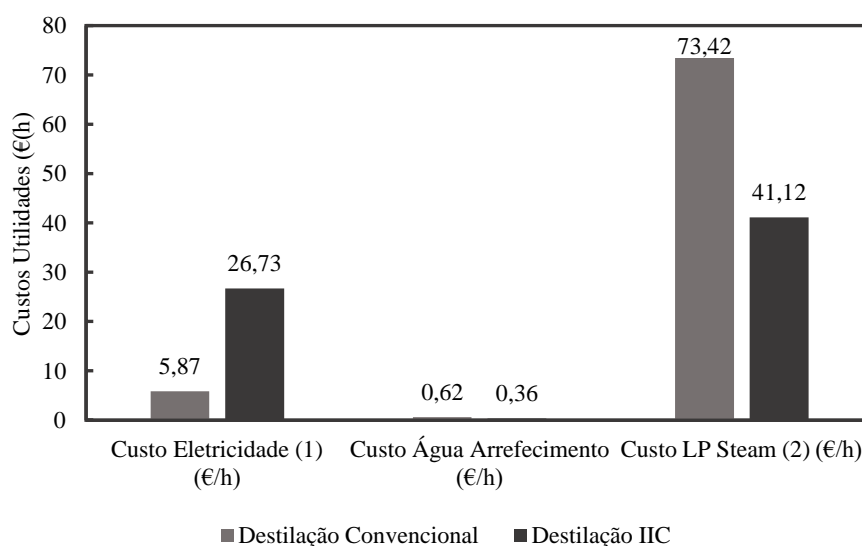


Figura 75 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XI, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Através dos resultados obtidos neste ensaio e comparativamente aos resultados obtidos em 3.1, é possível verificar um aumento nos custos do gás natural, sendo possível observar uma diferença superior entre os gastos dos dois tipos de destilação, face ao que acontecia no caso de estudo III. Deste modo, com o aumento do custo do gás natural, existe uma poupança superior, sendo este valor de 102 576 €/ano, levando a um *payback time* inferior, estando este valor fixado em 25,4 anos.

Em suma, através desta análise de sensibilidade ao custo do gás natural, verifica-se que o sistema de destilação com integração interna de calor beneficia deste aumento, pois existe um *payback time* inferior ao demonstrado quando o custo do gás natural não sofre alterações. Verifica-se também uma relação de proporcionalidade direta entre o custo do gás natural e o tempo de retorno de investimento.

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

3.6. Implementação do processo a escala industrial (caso de estudo XII – Condições Ideais)

Uma vez que o objetivo da dissertação passa pela demonstração da solidez e eficiência energética de um sistema de destilação com integração de calor, no presente subcapítulo pretende-se realizar diversos casos de estudo, simulando a coluna de destilação a uma escala industrial.

Na secção 3.4. determinou-se que para a destilação convencional, a pressão de 2 atm foi a que ofereceu um tempo de retorno menor, pelo que se decidiu trabalhar com este valor nos casos de estudo do presente subcapítulo, para um processo à escala industrial. Foi necessário aumentar o caudal molar da mistura inicial, assumindo-se que se separava uma mistura de 500 barris horários, refletindo assim o que se sucede numa indústria química. Os valores colocados para a alimentação do sistema encontram-se apresentados na figura 76.

Worksheet	Stream Name	Alimentação-2	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000	1,0000
Properties	Temperature [C]	90,00	90,00
Composition	Pressure [atm]	2,000	2,000
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	817,6	817,6
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	6,960e+004	6,960e+004
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/hr]	500,0	500,0
User Variables	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	9794	9794
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-49,82	-49,82
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	3,350e+007	3,350e+007
Normalized Yields	Liq Vol Flow @ Std Cond [m3/h]	79,10	79,10
Emissions	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figura 76 - Alimentação do sistema para um processo a escala industriais

Após definidas as condições da alimentação, foi realizado o caso de estudo XII, onde se operou com as condições presentes nas tabelas 21 e 22.

Tabela 21 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo XII

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N _T)	Prato de Alimentação (N _F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	11	6	0,8158	0,8292

Tabela 22 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XII

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	3	11	6	0,8158	0,8292

Deste modo, foram obtidos os resultados representados nas figuras 77 a 81.

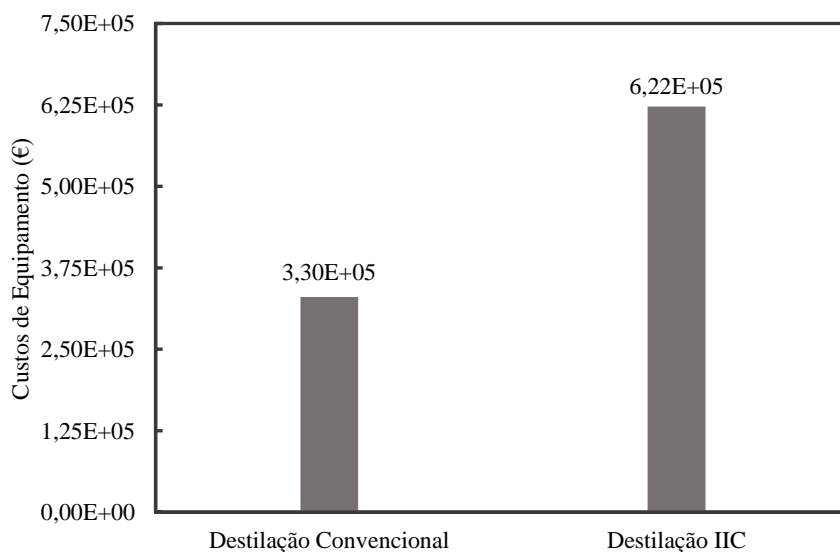


Figura 77 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

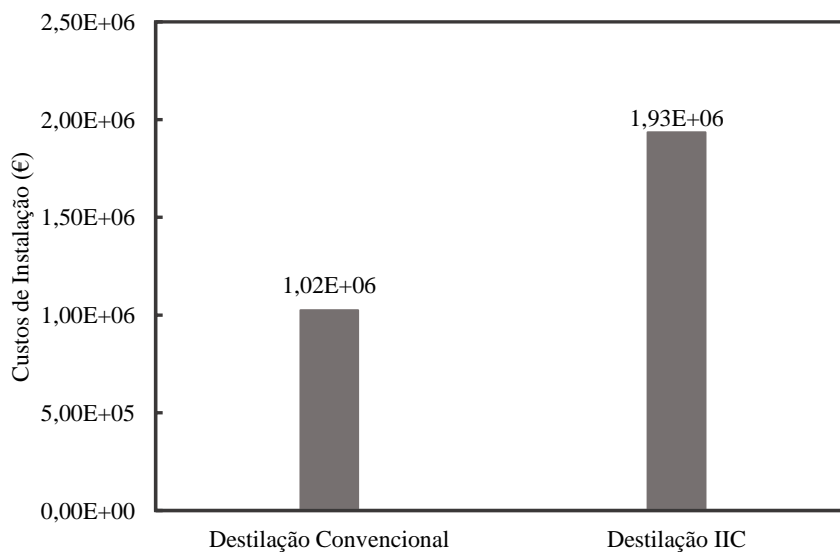


Figura 78 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

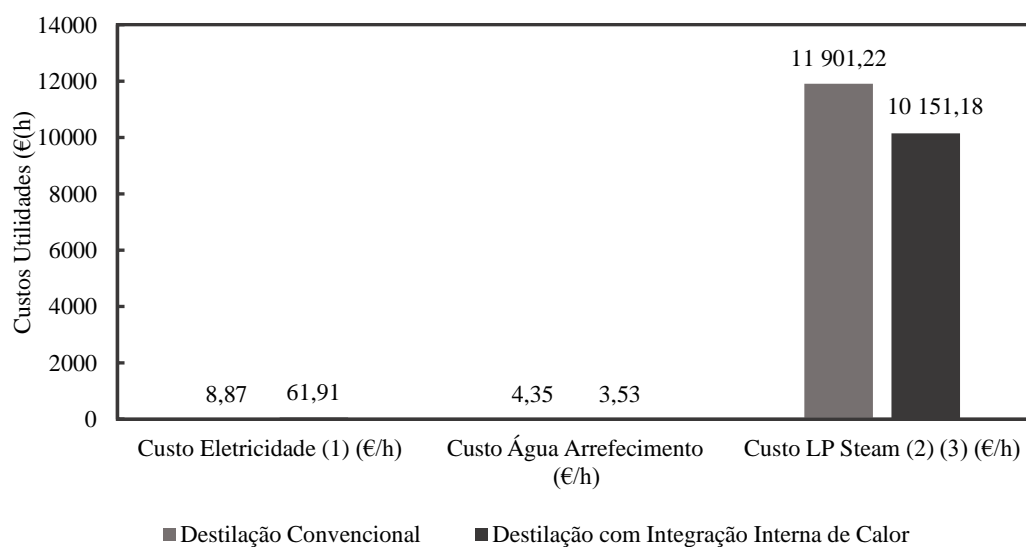


Figura 79 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

³Para este caso de estudo foi necessário recorrer ao poder calorífico do Gás Natural, retirado do Despacho n.º 17313/2008

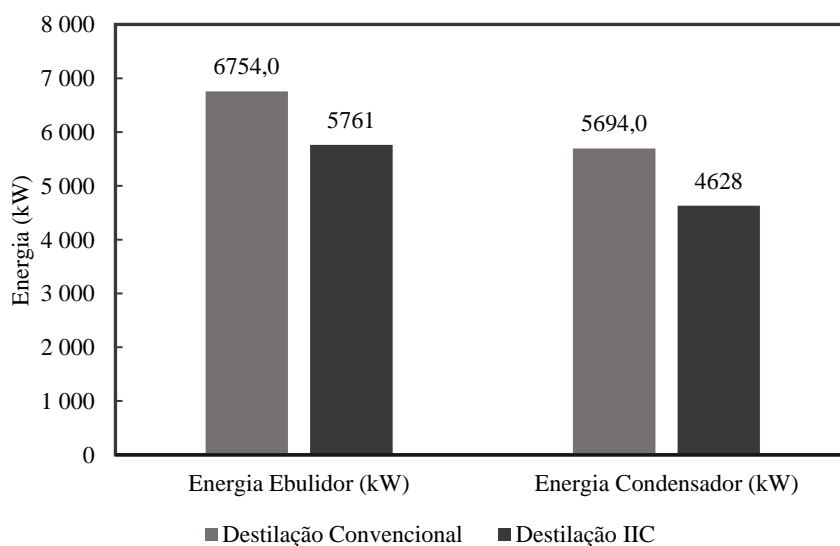


Figura 80 - Energias despendidas pelo ebulidor e pelo condensador, referentes ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

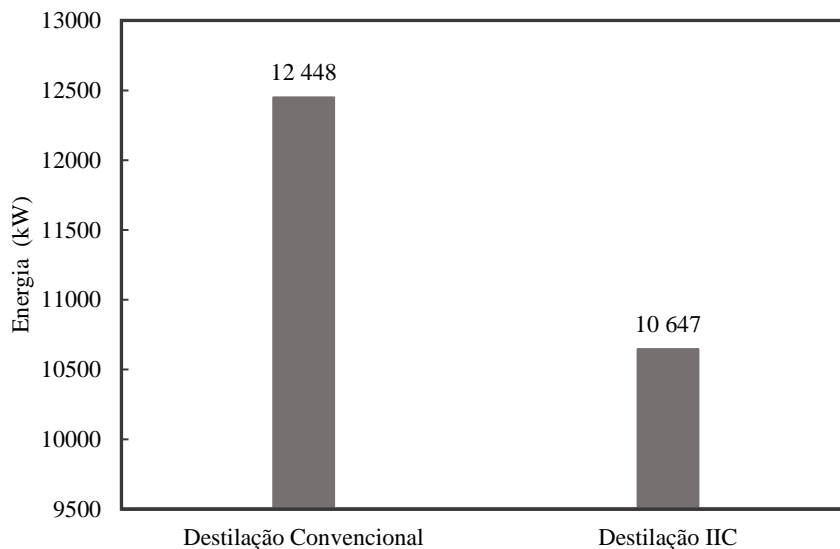


Figura 81 - Energia total necessária, referente ao caso de estudo XII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Após a implementação do sistema, replicando um processo à escala industrial, é possível observar as diferenças entre os dois sistemas, em termos económicos e em termos energéticos.

Primeiramente, é possível verificar a necessidade de um investimento adicional de cerca de 1,2 M € para o sistema de destilação com integração interna de calor, onde podemos incluir os custos de instalação e os custos de equipamento.

No que diz respeito aos custos de utilidades, isto é, os custos de eletricidade, custos de água de arrefecimento e os custos de LP steam, existem disparidades entre os dois sistemas de destilação. O sistema de destilação com integração de calor carece de um custo de eletricidade 7 vezes superior, onde se reflete os 62 €/h necessários. Para os custos de água de arrefecimento, os valores são bastante similares para os dois tipos de destilação. Os custos de LP steam são os que apresentam uma maior desigualdade entre ambos os sistemas. Enquanto o sistema de destilação convencional necessita de um custo de 11 901 €/h, o sistema de destilação com integração de calor necessita apenas de 10 151 €/h. Esta poupança do sistema com integração energética em termos de LP Steam, traduz-se numa poupança anual de utilidades de aproximadamente 14,9 M €/ano.

Relativamente aos valores energéticos de ambos os sistemas, para este caso de estudo, voltaram-se a observar diferenças significativas. Pôde-se novamente destacar uma poupança no consumo de energia de aproximadamente 14 %, refletidos nos 1801 kW de diferença entre ambos os sistemas, com vantagens claras para o sistema com integração de calor.

Em suma, ao simular uma destilação ao nível industrial, com um total de 11 pratos, foi possível verificar os benefícios de operar com uma destilação onde existe troca de calor. Apesar de inicialmente ser necessário um investimento superior em termos de equipamento e instalação, o facto de existir troca de calor entre as duas zonas da coluna faz com que exista uma poupança muito superior em termos de gás natural. Neste caso de estudo em específico, ao optarmos pelo sistema de destilação com integração de calor, podemos observar um tempo de retorno face ao investimento adicional, de aproximadamente 1 mês. Este valor obtido reflete, claramente, a necessidade de implementação deste tipo de sistemas a um nível industrial, uma vez que são notórias as diferenças entre a destilação convencional e a destilação com integração interna de calor.

Em seguida, implementar-se-á um sistema de destilação com 21 pratos, de modo a perceber qual a influência deste aumento para uma operação a nível industrial.

3.6.1. Aumento do número de pratos para um sistema de destilação a nível industrial (caso de estudo XIII – Condições Iniciais)

Após a implementação do primeiro caso de estudo a nível industrial, pretende-se aumentar o número de pratos do sistema, de modo a perceber a sua influência nos custos do processo e a energia necessária para o sistema operar corretamente. Deste modo, foi realizado o caso de estudo XIII, com as condições presentes na tabela 23 e 24.

Tabela 23 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional para o caso de estudo XIII

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	21	11	0,8123	0,8255

Tabela 24 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XIII

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	3	21	11	0,8123	0,8255

Assim, os resultados obtidos encontram-se representados nas figuras 82 a 86.

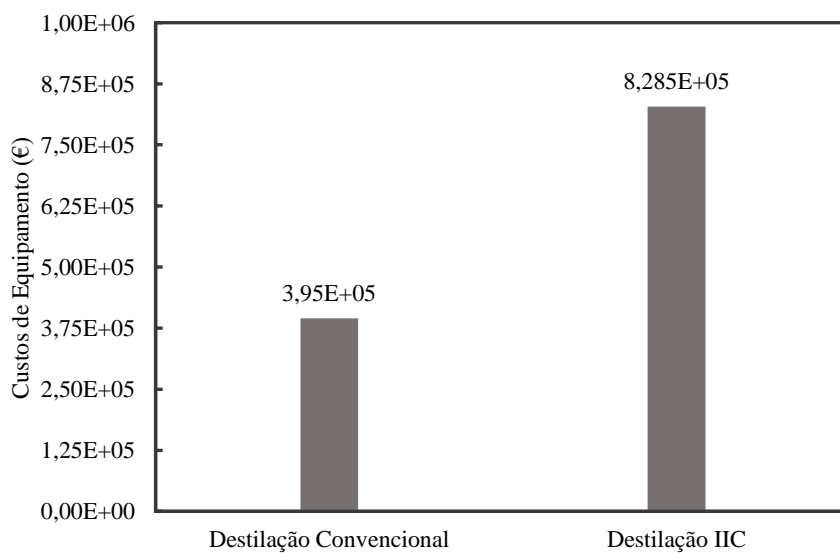


Figura 82 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

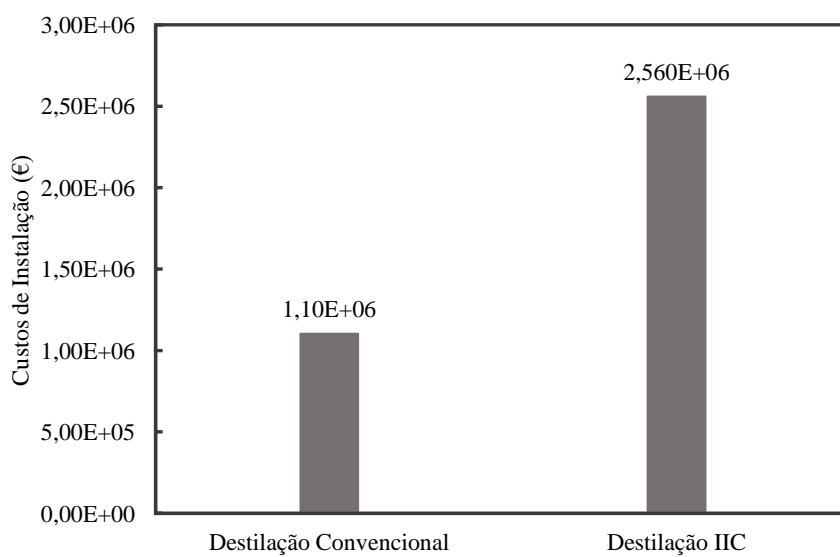


Figura 83 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

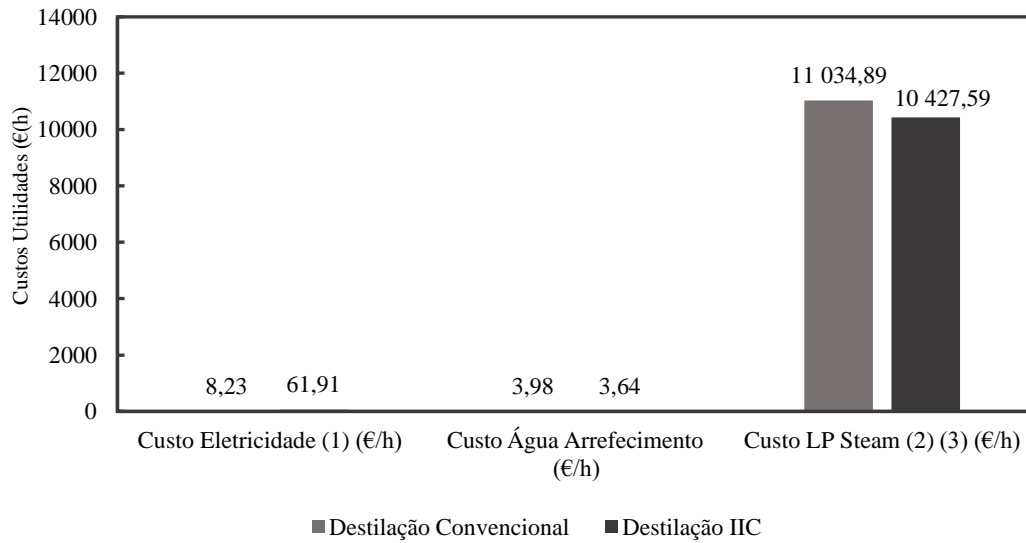


Figura 84 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

³Para este caso de estudo foi necessário recorrer ao poder calorífico do Gás Natural, retirado do Despacho n.º 17313/2008

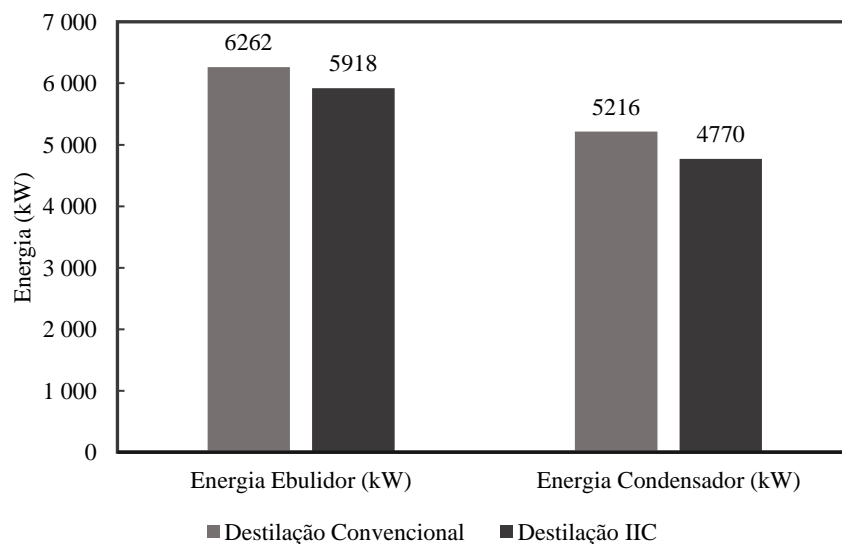


Figura 85 - Energias despendidas pelo ebulidor e pelo condensador, referentes ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

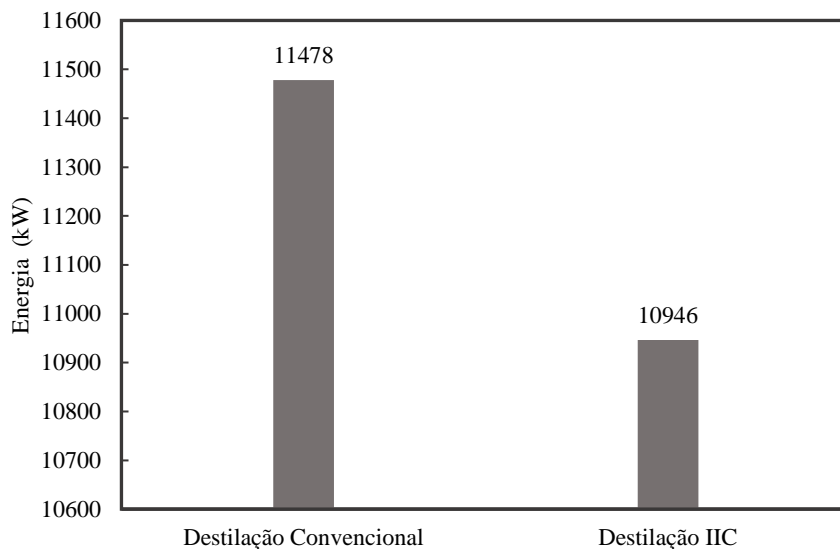


Figura 86 - Energia total necessária, referente ao caso de estudo XIII, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Com o aumento do número de pratos do sistema a um nível industrial, foram novamente notórias as diferenças entre os dois sistemas de destilação. No que diz respeito ao investimento adicional, onde podemos incluir os custos de equipamento e os custos de instalação, verifica-se que o sistema com integração de calor necessita de um investimento adicional de aproximadamente 1,9 M €, uma vez que carece de um maior número de equipamentos face à destilação convencional.

No que diz respeito aos custos de utilidades, onde podemos incluir os custos de eletricidade, os custos de água de arrefecimento e os custos de gás natural (LP Steam), foi possível constatar disparidades entre os dois sistemas de destilação. Quanto aos custos de eletricidade, o sistema de destilação com integração de calor, implica novamente um custo 7 vezes superior. Relativamente aos custos de água de arrefecimento, os valores obtidos são bastante similares para os dois tipos de destilação. Por fim, nos custos de gás natural é onde se verifica as maiores desigualdades entre os dois sistemas. Enquanto o sistema de destilação convencional necessita de um custo anual de quase 97 M €, o sistema de destilação com integração interna de calor revela poupanças anuais na ordem dos 5,3 M €. Deste modo, o sistema de destilação com integração interna de calor mostra poupanças anuais totais de aproximadamente 4,8 M €, face ao necessário investimento inicialmente superior.

Relativamente aos valores energéticos de ambos os sistemas, para este caso de estudo voltaram-se a observar diferenças significativas. Apesar de a poupança energética ser apenas de 5 %, o sistema com integração interna de calor voltou a mostrar-se mais eficiente energeticamente para a separação da mistura de benzeno e tolueno.

Em suma, ao aumentar o número de pratos do sistema previamente analisado, voltou a ser notória a necessidade de implementação de sistemas com integração de calor a nível industrial. Apesar de inicialmente ser preciso um investimento adicional para este sistema, as poupanças oferecidas anualmente pelo sistema são bastante superiores face a este investimento. Para o caso de estudo analisado, este investimento adicional poderá ser totalmente rentabilizado em menos de 5 meses, mostrando o benefício de sistemas com troca de calor entre as duas zonas da coluna.

Em seguida, pretende-se novamente aumentar o número de pratos do sistema, de modo a compreender a sua influência na operação à escala industrial

3.6.2. Aumento do número de pratos do sistema a escala industrial (caso de estudo XIV)

Após a implementação do segundo caso de estudo a nível industrial, pretende-se novamente aumentar o número de pratos do sistema, de modo a perceber a sua influência nos custos do processo e a energia necessária para o sistema operar corretamente. Deste modo, foi realizado o caso de estudo XIV, com as seguintes condições operatórias:

Tabela 25 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XIV

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	31	16	0,8134	0,8263

Tabela 26 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração Interna de Calor para o caso de estudo XIV

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	3	31	16	0,8134	0,8263

Após a realização de ambos os ensaios no simulador Aspen HYSYS[®], construíram-se seguintes os gráficos apresentados nas figuras 87 a 91 com os resultados obtidos:

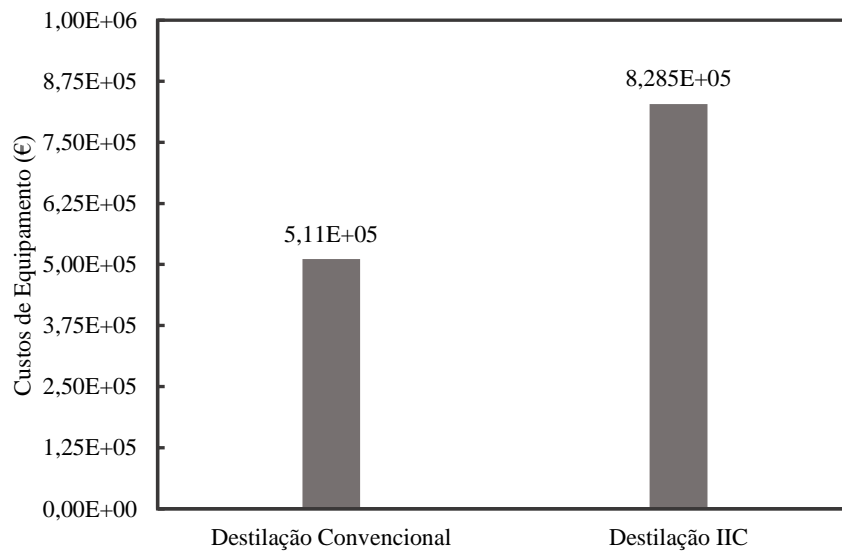


Figura 87 - Custos de Equipamento, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

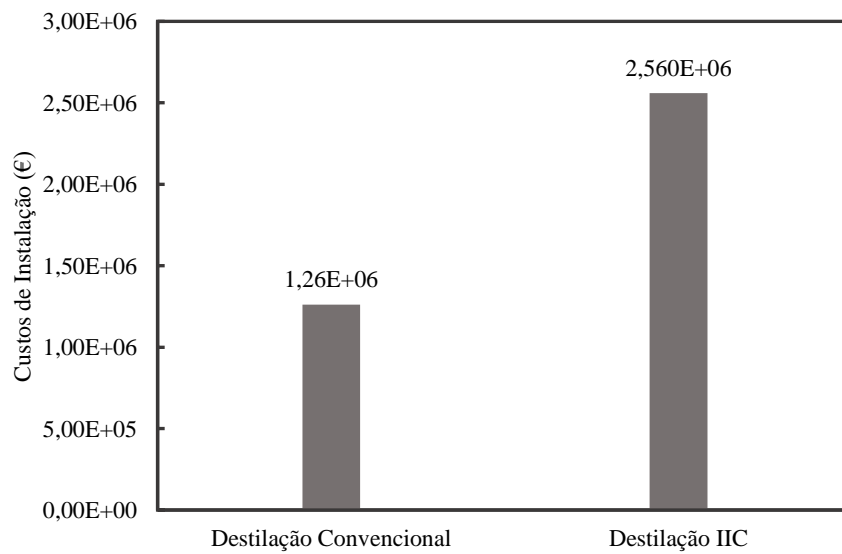


Figura 88 - Custos de Instalação, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

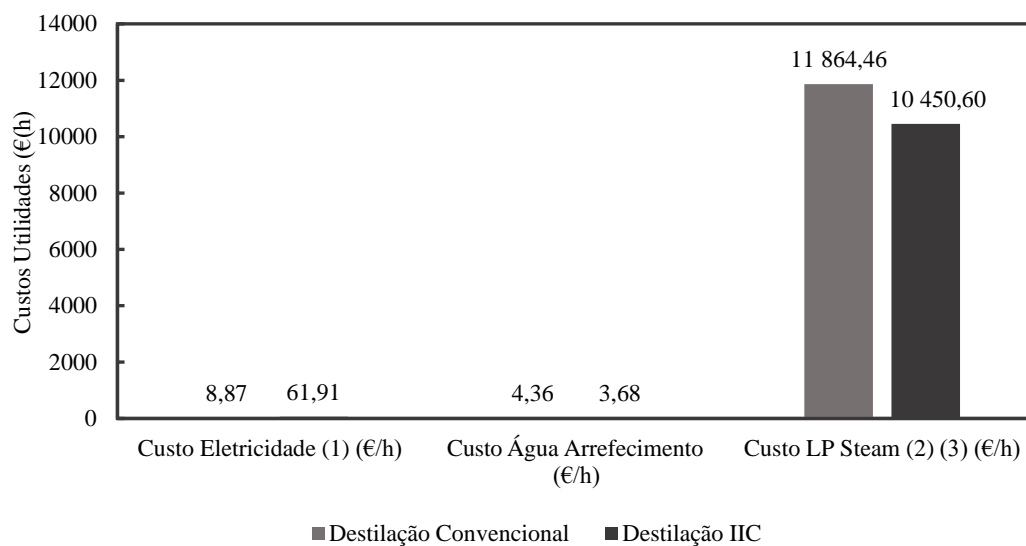


Figura 89 - Custos de Utilidades, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

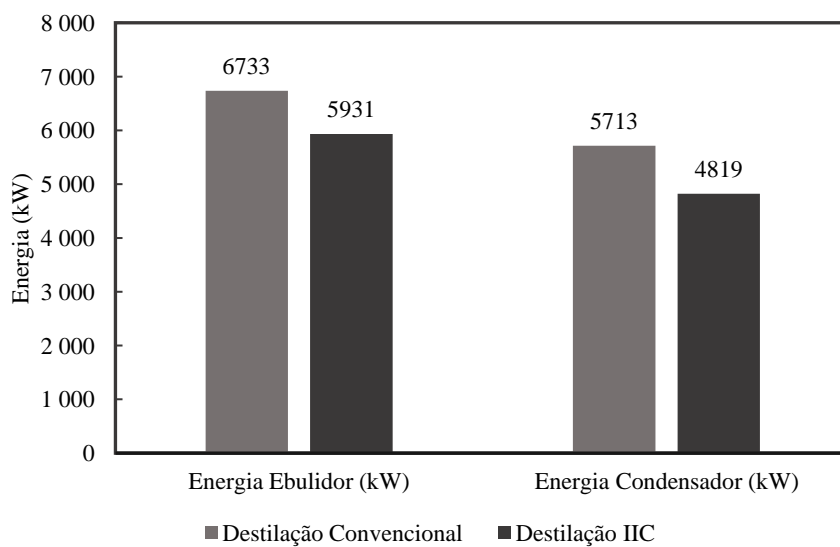


Figura 90 - Energias despendidas pelo ebulidor e pelo condensador, referentes ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

³Para este caso de estudo foi necessário recorrer ao poder calorífico do Gás Natural, retirado do Despacho n.º 17313/2008

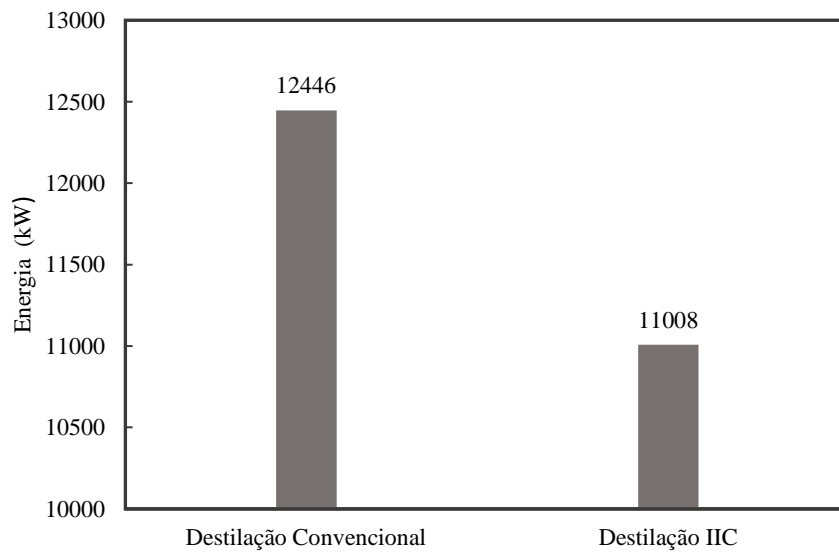


Figura 91 - Energia total necessária, referente ao caso de estudo XIV, para os sistemas de Destilação Convencional e Destilação IIC

Com o novo incremento do número de pratos (31 pratos) do sistema a um nível industrial, foram novamente visíveis as diferenças entre os dois sistemas de destilação. No que diz respeito ao investimento adicional, onde podemos incluir os custos de equipamento e os custos de instalação, verifica-se que o sistema com integração de calor necessita de um investimento adicional de aproximadamente 1,6 M €, uma vez que requer de um maior número de equipamentos face à destilação convencional.

No que diz respeito aos custos de utilidades, onde podemos incluir os custos de eletricidade, os custos de água de arrefecimento e os custos de gás natural (LP Steam), foi possível constatar desigualdades entre os dois sistemas de destilação.

Quanto aos custos de eletricidade, o sistema de destilação com integração de calor, requer novamente um custo 7 vezes superior. Relativamente aos custos de água de arrefecimento, os valores obtidos são bastante similares para os dois tipos de destilação. Quanto aos custos de gás natural é onde se verificam as maiores diferenças entre os dois sistemas. Enquanto o sistema de destilação convencional necessita de um custo anual de quase 104 M €, o sistema de destilação com integração interna de calor tem um custo anual de aproximadamente 92 M €. Deste modo, o sistema de destilação com integração interna de calor mostra poupanças anuais de aproximadamente 11 M €, face ao investimento inicialmente superior necessário.

Quanto aos valores energéticos de ambos os sistemas, para este caso de estudo voltaram-se a constatar diferenças significativas. Apesar de a poupança energética ser apenas de 11 %, o sistema

com integração interna de calor voltou a mostrar-se mais eficiente energeticamente para a separação da mistura inicial.

Em suma, ao aumentar novamente o número de pratos do sistema previamente construído voltou-se a verificar a necessidade de implementação de sistemas com integração de calor a nível industrial. Apesar de inicialmente ser preciso um investimento adicional para este sistema, as poupanças que o sistema oferece anualmente são bastante superiores face a este investimento prévio. Para o caso de estudo analisado este investimento adicional poderá ser totalmente rentabilizado em menos de 2 meses, mostrando a vantagem de sistemas com troca de calor entre as duas zonas da coluna.

Ao implementar um sistema de destilação a nível industrial, são evidentes os benefícios que o sistema de destilação com integração de calor oferece. Ao operar com uma pressão entre 2 e 3 atm, qualquer que seja o número de pratos, verifica-se que o sistema que permite trocas de calor ao longo da coluna é muito mais rentável que o sistema de destilação convencional. Apesar do investimento adicional que é necessário previamente, o sistema de destilação com integração de calor, oferece vantagens quer em termos económicos, com poupanças superiores a 10 milhões de euros, quer em termos energéticos, com poupanças superiores a 1000 kW.

3.7. Influência do caudal molar de alimentação nos sistemas de destilação

O objetivo da dissertação passa pela demonstração da necessidade de implementação de sistemas de destilação com integração de calor. No presente subcapítulo, pretende-se determinar qual é a influência do caudal molar da alimentação para o tempo de retorno do investimento inicial previamente necessário.

Assim, neste subcapítulo foram feitos vários casos de estudo, onde se variou o caudal molar de alimentação, tendo sido obtido os resultados demonstrados nas figuras 92 a 96. As condições operatórias iniciais para cada sistema encontram-se nas tabelas 27 e 28.

Tabela 27 - Condições Operatórias do sistema de Destilação Convencional, para o estudo da influência do caudal molar

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão do Sistema (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
				Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	11	6	0,871	0,871

Tabela 28 - Condições Operatórias do sistema de Destilação com Integração de Calor, para o estudo da influência do caudal molar

Temperatura da Alimentação (°C)	Pressão da Zona de Esgotamento (atm)	Pressão da Zona de Retificação (atm)	Número de Pratos (N_T)	Prato de Alimentação (N_F)	Recuperação	
					Fração Benzeno Destilado	Fração Tolueno Resíduo
90	2	3	11	6	0,871	0,871

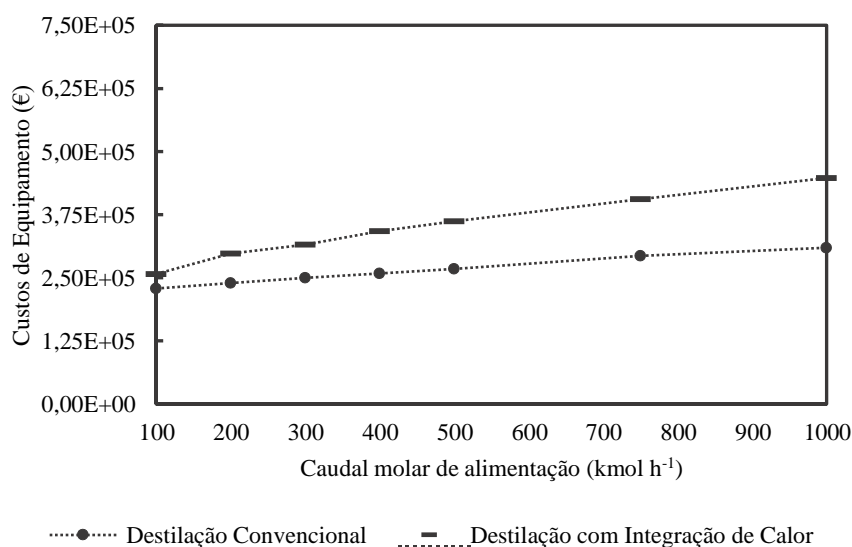


Figura 92 - Custos de Equipamento em função do caudal molar do sistema

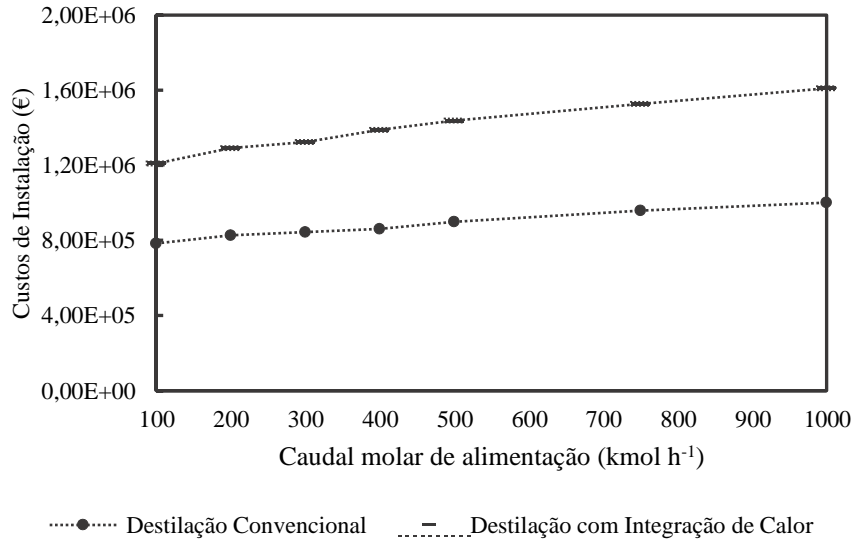


Figura 93 - Custos de Instalação em função do caudal molar do sistema

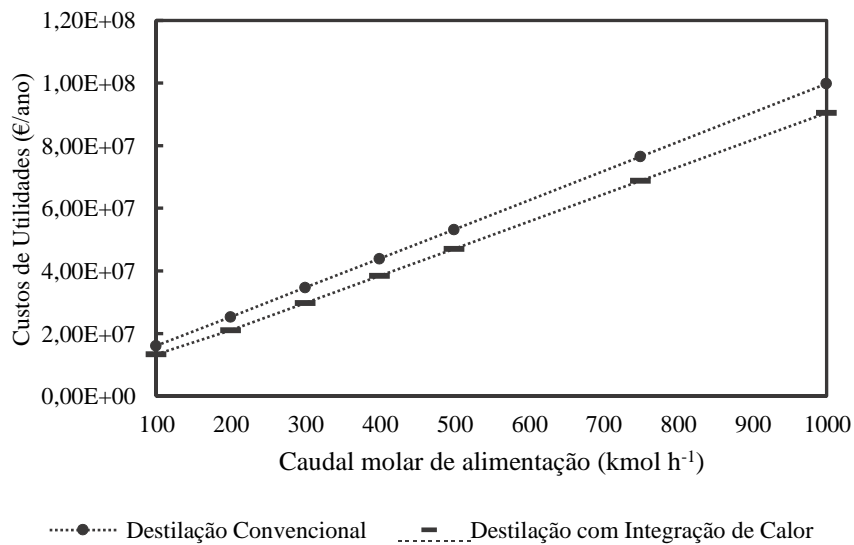


Figura 94 - Custos de Utilidades em função do caudal molar do sistema ^{1,2,3}

¹Os custos de eletricidade tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 15/10/2022, disponível em shorturl.at/cKM28

²Os custos de gás natural (LP Steam) tiveram como base os dados fornecidos pela Direção de Serviços de Planeamento Energético e Estatística, consultado a 16/10/2022, disponível em shorturl.at/fjqCJ

³Para este caso de estudo foi necessário recorrer ao poder calorífico do Gás Natural, retirado do Despacho n.º 17313/2008

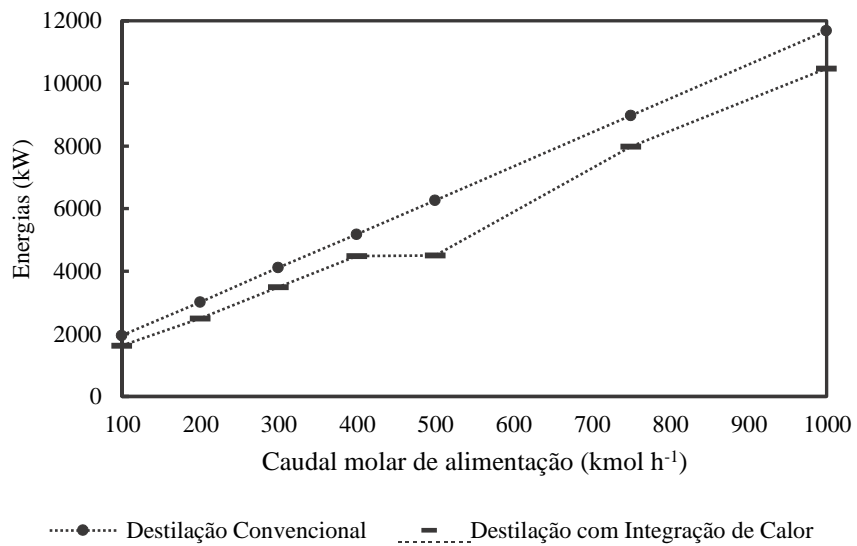


Figura 95 – Energia despendida pelo sistema, em função do caudal molar do sistema

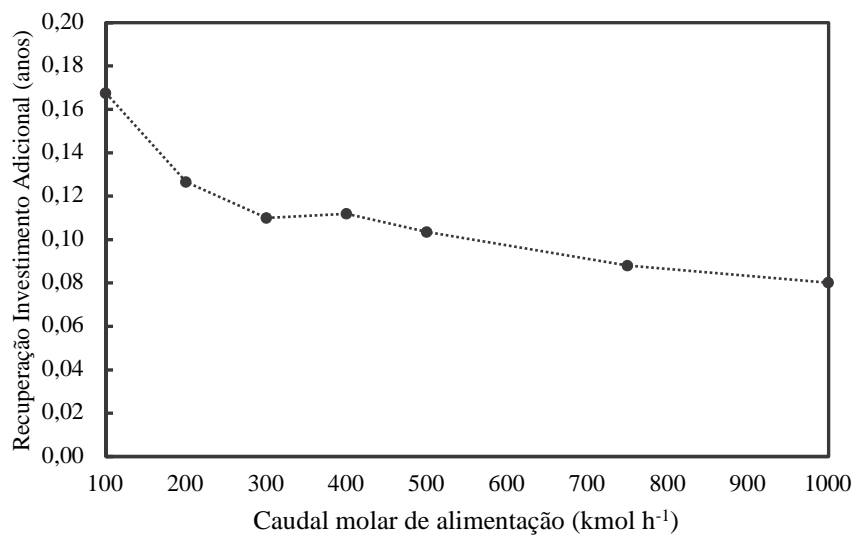


Figura 96 – Anos de recuperação do investimento em função do caudal molar do sistema

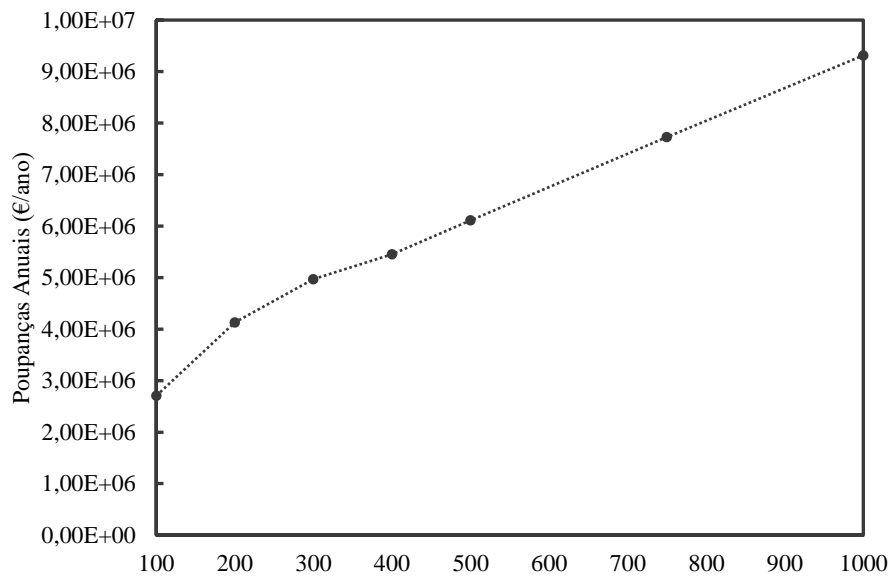


Figura 97 - Poupanças anuais em função do caudal molar de alimentação

Após a implementação de ambos os sistemas, onde se realizaram vários ensaios, variando o caudal molar da alimentação, foi possível observar as diferenças entre os dois sistemas, em termos económicos e em termos energéticos.

Primeiramente, em termos de custos de equipamento, verifica-se que ambos os sistemas de destilação apresentam uma relação de proporcionalidade direta com o caudal molar de alimentação. No entanto, é notória a necessidade de custos superiores para o sistema de destilação com integração de calor.

Em conformidade com os custos de equipamento, também os custos de instalação apresentam uma relação de proporcionalidade direta, sendo o gasto económico maior para o sistema com integração energética.

Em contrapartida com o enunciado anteriormente, os custos de utilidades apresentam-se inferiores no sistema de destilação com integração interna de calor. No entanto, verifica-se mais uma vez a relação de proporcionalidade direta com o caudal molar de alimentação.

Por fim, em termos energéticos de ambos os sistemas de destilação, são notórias as diferenças entre ambos os sistemas. O sistema de destilação convencional, carece de muito mais energia do que o sistema de destilação com integração de calor, provando mais uma vez a necessidade de implementação deste tipo de sistemas a escala industrial.

Em suma, ao variar o caudal molar da alimentação, foi possível verificar a redução do período de retorno de investimento e o aumento das poupanças anuais, como seria de esperar, o que nos indica que a implementação deste tipo de sistemas é fundamental para o aproveitamento energético de uma indústria. Uma vez que numa fábrica, os caudais molares tratados são sempre muito elevados, este caso de estudo veio ajudar a perceber que o sistema de destilação com integração de calor é amplamente necessário para um desenvolvimento sustentável.

4. Conclusões e Perspetivas Futuras

Ao longo dos tempos, devido ao subsequente desenvolvimento da sociedade, tem ocorrido um aumento exponencial do consumo energético no mundo. Neste sentido, é clara a importância que as indústrias químicas representam no sentido de alcançar mecanismos que possam contribuir para uma rentabilidade energética superior.

Atualmente, a energia pode ser dividida em três grandes categorias – energia para combustíveis, energia utilizada para arrefecimento/aquecimento e energia elétrica. No entanto, uma vez que enfrentamos uma crise no que toca aos recursos energéticos, têm sido amplamente estudadas estratégias para um desenvolvimento sustentável. A integração de processos tem sido um dos alicerces para este desenvolvimento.

O trabalho de dissertação passou pela simulação de colunas de destilação com integração interna de calor, e posterior comparação com o sistema tradicional de destilação. A falta de informação e pouca aplicabilidade a nível industrial, demonstrou a necessidade de implementação deste tipo de sistemas, na tentativa de aumento da rentabilidade energética das indústrias.

A simulação deste tipo de colunas de destilação iniciou-se pela escolha do software mais apropriado, o Aspen HYSYS®, desenvolvido pela empresa americana AspenTech. A simulação está dividida em dois grandes casos de estudo, um onde se simula uma destilação convencional e outro, onde existe a simulação de uma coluna com integração interna de calor. Ambas as simulações tiveram como principal objetivo a separação de uma mistura equimolar de benzeno e tolueno. Ao longo dos vários ensaios foram alteradas as variáveis de otimização de design (número de pratos e posição da alimentação) e as variáveis de otimização de operação (temperatura de alimentação e pressão de funcionamento da coluna).

Após a realização dos diversos casos de estudo, verificou-se que o objetivo principal da implementação de sistemas com integração interna de calor foi cumprido. Apesar de inicialmente ser necessário um investimento adicional, face à existência de mais equipamento no sistema, este comprovou-se rentável economicamente e energeticamente. Com base nos resultados obtidos pelo *software*, e de forma a exemplificar a aplicabilidade do sistema de destilação com integração, escolheu-se o caso de estudo XIV.

Para uma coluna com um total de 31 pratos, e a operar a nível industrial, foi necessário um investimento de 1,773 M € para o sistema de destilação convencional e um investimento de 3,888 M € para o sistema de destilação com integração de calor. Deste modo, verificou-se a necessidade de um investimento superior para a coluna que possibilita troca de calor entre a zona de retificação e a zona de esgotamento.

Quanto ao custo de utilidades, verificou-se um custo anual de 104 M € para o sistema de destilação tradicional e um custo anual de 92 M € para o sistema de destilação com integração de calor. Neste sentido, para a separação da mesma mistura e em condições praticamente idênticas, a nível industrial, verificaram-se as poupanças imediatas que o sistema de destilação com integração interna de calor oferece face ao sistema de destilação convencional, onde o investimento adicional pode ser pago em menos de 2 meses.

Quanto ao estudo realizado sobre a influência do caudal molar de alimentação nos custos anuais, foi possível concluir que o aumento do caudal molar de alimentação beneficia o sistema de destilação com integração interna de calor, aumentando assim as poupanças anuais associadas ao sistema. Assim, confirma-se a utilização deste tipo de sistemas a grande escala, onde se trabalha com caudais elevados.

Em suma, conclui-se que a implementação deste tipo de sistemas é imprescindível para as indústrias químicas, uma vez que permite aumentar a rentabilidade energética e o desenvolvimento sustentável a nível industrial.

Uma das perspetivas futuras passa certamente pela implementação, a nível nacional e a nível internacional deste tipo de sistemas, contemplando um estudo relativo aos materiais utilizados para a construção deste tipo de colunas de destilação.

Referências Bibliográficas

- Alarcón-Padilla, D. C., & García-Rodríguez, L. (2007). Application of absorption heat pumps to multi-effect distillation: a case study of solar desalination. *Desalination*, 212(1–3), 294–302. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2006.10.014>
- Aso, K., Nakanishi, T., Nakaiwa, M., & Takamatsu, T. (2003). *Heat integrated distillation column*. European Patent Office.
- AspenTech. (2004). *HYSYS® 2004.2 Operations Guide*. <http://www.aspentech.com>
- Barros, H. (2014). *Análise de Projectos de Investimento* (5th ed.). Edições Sílabo.
- Beauregard, D. (1993). *LOCATING AND ESTIMATING AIR EMISSIONS FROM SOURCES OF TOLUENE Final Report Prepared for*.
- Beck, R., & Hockley, R. (2009). Engineering Models in Operations Advantages and Objectives. *Chemical Engineering World*, 44.
- BP. (2021). *Full report – Statistical Review of World Energy 2021*.
- Brugma, A. J. (1939). by?-le&asaes? AT for NEY.c5. In A. J. BRUGMA (Vol. 2).
- Caballero, J. A., & Grossmann, I. E. (2006). Structural considerations and modeling in the synthesis of heat integrated-thermally coupled distillation sequences. *Industrial & Engineering Chemistry Research*.
- Carlson, E. (1996). Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. *Chemical Engineering Progress*.
- Chen, C.-C., & Mathias, P. M. (2002). Thermodynamic Modeling Deliver Value in Industrial Practice Applied Thermodynamics for Process Modeling. *AI Che*, 48.
- de Koeijer, G., & Kjelstrup, S. (2000). Minimizing Entropy Production Rate in Binary Tray Distillation[#76588]-65565. *International Journal of Thermodynamics*, 3, 105–110.
- Doherty, M., & Malone, M. (2001). *Conceptual Design of Distillation Systems* (1st ed.). McGraw-Hill .
- Dorsey, A., McClure, P., McDonald, R., & Singh, M. (2017). *Toxicological Profile for Toluene*.
- Edgar, T. F., Himmelblau, D. M. (David M., & Lasdon, L. S. (2001). *Optimization of chemical processes*. McGraw-Hill.
- Fan, J., Zhao, J., & Zhang, R. (2005). Theoretical study of OH addition to α -pinene and β -pinene. *Chemical Physics Letters*, 411(1–3), 1–7. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.05.122>
- Fang, J., Cheng, X., Li, Z., Li, H., & Li, C. (2019). A review of internally heat integrated distillation column. In *Chinese Journal of Chemical Engineering* (Vol. 27, Issue 6, pp. 1272–1281). Chemical Industry Press. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2018.08.021>
- Fonyo, Z. (1974). Thermodynamic analysis of rectification I. Reversible model of rectification. *International Chemical Engineering*, 14, 18–27.

- Gadalla, M., Olujic, Z., de Rijke, A., & Jansens, P. J. (2004). A Thermo-hydraulic approach to conceptual design of an internally heat-integrated distillation column (i-HIDiC). *Computer Aided Chemical Engineering*, 18(C), 181–186. [https://doi.org/10.1016/S1570-7946\(04\)80096-8](https://doi.org/10.1016/S1570-7946(04)80096-8)
- Gavind, R. (1986). *Distillation Column and Process*. United States Patent.
- Graauw, J. de, Steenbakker, M. J., Rijke, A. de, Oljuic, Z., & Jansens, J. (2010). *Heat Integrated Distillation Column*. United States Patent.
- Haselden, G. G. (1977). *Distillation processes and apparatus*. United States Patent.
- Henke, G. E., & Wang, J. C. (1966). Tri-diagonal Matrix for Distillation. *Hydrocarbon Processing*.
- Hugill, J. A. (2003). *System for Stripping and Rectifying a Fluid Mixture*.
- Humphrey, J. L., & Siebert, A. F. (1992). Separation technologies: An opportunity for energy savings. *Chemical Engineering Progress*.
- IEA. (2014). *Energy Efficiency Indicators: Fundamentals on Statistics*.
- Kiss, A. A. (2014). Distillation technology - still young and full of breakthrough opportunities. In *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* (Vol. 89, Issue 4, pp. 479–498). John Wiley and Sons Ltd. <https://doi.org/10.1002/jctb.4262>
- le Goff, P., Cachot, T., & Rivero, R. (1996). Exergy Analysis of Distillation Processes. In *Technol* (Vol. 19).
- Leusch, F., & Bartkow, M. (2010). *A Short Primer on Benzene, Toluene, Ethylbenzene and Xylenes (BTEX) in the Environment and in Hydraulic Fracturing Fluids Persistent organic pollutants in the environment View project Global Water Research Coalition-Effect-Based Monitoring of endocrine activity in drinking water, surface water and treated wastewater View project*. <https://www.researchgate.net/publication/303283816>
- Luyben, W. (2006). *Distillation design and control using Aspen simulation*. Wiley-Interscience.
- Luyben, W. L., & Cheng, H. C. (1985). Heat-integrated distillation columns for ternary separations. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 24, 707–713.
- Mah, R. S. H., Nicholas, J. J., & Wodnik, R. B. (2010). Distillation with Secondary Reflux and Vaporization: A Comparative Evaluation. *AIChE J.*, 23, 651–658.
- Mah, R., Tung, H., & David, J. F. (1986). Fractionating condensation and evaporation in plate-fin devices. *AIChE Journal*.
- McCabe, W., Smith, J., & Harriot, P. (1993). *unit-operations-of-chemical-engineering-5th-ed-mccabe-and-smith* (5^a). McGraw-Hill.
- Mota, A. G., Barroso, C. D., Nunes, J. P., Oliveira, L., Ferreira, M. A., & Inácio, P. L. (2015). *Finanças da Empresa : Teoria e Prática* (5th ed.). Edições Sílabo. www.silabo.pt
- Naito, K., Nakaiwa, M., Huang, K., Endo, A., Aso, K., Nakanishi, T., Nakamura, T., Noda, H., & Takamatsu, T. (2000). Operation of a bench-scale column (HIDiC): an experimental study. In *Computers and Chemical Engineering* (Vol. 24). www.elsevier.com/locate/comchemeng

- Perry, R. H., Green, D. W., & Maloney, J. O. (1997). *Perry's chemical engineers' handbook*. McGraw-Hill.
- Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos. (2007a). *Destilação*. Faculdade Engenharia Da Universidade Do Porto. http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?option=com_content&task=view&id=33&Itemid=142
- Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos. (2007b). *Método de McCabe-Thiele*. Faculdade Engenharia Universidade Do Porto. http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?option=com_content&task=view&id=67&Itemid=143
- Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos. (2007c). *Separações e Operações Unitárias*. Faculdade de Engenharia Universidade Do Porto. http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?option=com_content&task=view&id=17&Itemid=135
- POSEUR. (2015). *Nota de Orientações para a Análise Financeira*.
- Queirós, M., & Silva, E. S. (2013). *Análise de Investimentos em Ativos Reais* (Grupo Editorial Vida Económica, Ed.; Vol. 1). Grupo Editorial Vida Económica.
- REN 21. (2017). *Renewables 2017 : Global Status Report*.
- Seader, J. D. (1980). *Continuous distillation apparatus and method*.
- Seader, J. D., Henley, E., & Roper, K. (2011). *Separation-Process-Principles-Third-Edition* (3rd ed.). John Willey & Sons.
- Silva, P. P. da. (1999). *Boletim de Ciências Económicas: Técnicas de Análise de Investimento* (Vol. 42). Universisade de Coimbra, Faculdade de Direito.
- Soares, I., Moreira, J., Pinho, C., & Couto, J. (2015). *Decisões de Investimento: Análise Financeira de Projetos* (4th ed.). Edições Sílabo.
- Stichlmair, J., & Fair, J. (1998). *Distillation: Principles and Practice* (1st ed.). Wiley.
- Towler, G., Sinnott, R., Boston, A. •, Heidelberg, •, London, •, San, P. •, San, D., Singapore, F. •, & Tokyo, S. •. (2008). *CHEMICAL ENGINEERING DESIGN Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*. <http://elsevier.com>
- Trembley, D., McCarthy, D., & Beck, R. (2011). *Getting Started with Relative Economics in Aspen Plus*. Aspen Tech.
- Twidell, J., & Weir, T. (2015). *Renewable energy resources* (3rd ed.). Routledge.
- U.S. Energy Information Administration. (2017). *International Energy Outlook 2017*.
- WHO. (2000). *Toluene- General description*.
- Wilbur, S. B., Keith, S., Faroon, O., & Wohlers, D. (2007). *TOXICOLOGICAL PROFILE FOR BENZENE*.
- Wright, R. O. (1949). *UNITED STATES PATENT OFFICE FRACTIONATION APPARATUS*.

