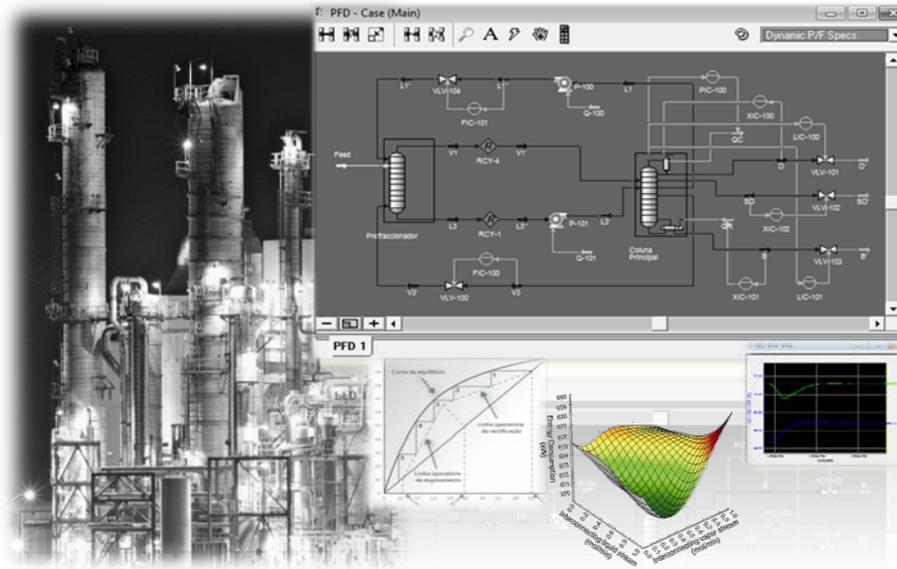




ISEL

INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA
ÁREA DEPARTAMENTAL DE ENGENHARIA QUÍMICA



Simulação de colunas de destilação de elevada eficiência energética

SANDRA MARGARIDA DOS SANTOS SARAMAGO FLORINDO

Licenciada

**Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre
em Engenharia Química e Biológica**

Orientador:

Doutor João Miguel Silva

Júri:

Presidente: Doutor José Augusto Paixão Coelho

Vogais:

Doutor João Miguel Silva (Orientador)

Doutora Carla Isabel Costa Pinheiro (Arguente)

Doutor Rui Manuel Gouveia Filipe

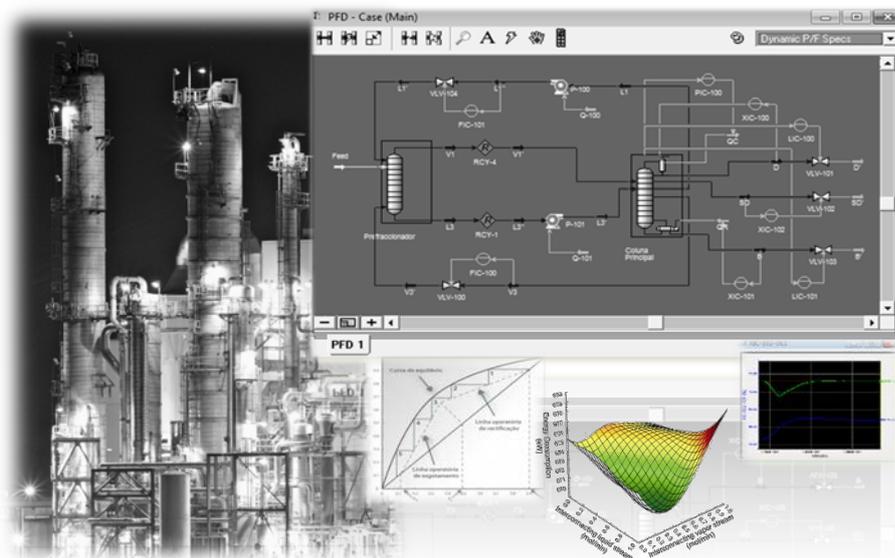
Eng.º António Manuel Ferreira Pereira

Dezembro de 2012



ISEL

INSTITUTO SUPERIOR DE ENGENHARIA DE LISBOA
ÁREA DEPARTAMENTAL DE ENGENHARIA QUÍMICA



Simulação de colunas de destilação de elevada eficiência energética

SANDRA MARGARIDA DOS SANTOS SARAMAGO FLORINDO

Licenciada

**Trabalho Final de Mestrado para obtenção do grau de Mestre
em Engenharia Química e Biológica**

Orientador:

Doutor João Miguel Silva

Júri:

Presidente: Doutor José Augusto Paixão Coelho

Vogais:

Doutor João Miguel Silva (Orientador)

Doutora Carla Isabel Costa Pinheiro (Arguente)

Doutor Rui Manuel Gouveia Filipe

Eng.º António Manuel Ferreira Pereira

Dezembro de 2012

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar gostaria de agradecer à minha família por todo o seu apoio e por me possibilitarem a concretização dos objetivos a que me tenho proposto durante este percurso e ao meu marido uma palavra especial de agradecimento pela sua paciência, carinho, ajuda e incentivo na realização deste trabalho.

Quero agradecer ao meu orientador, Doutor João Silva, e também à Professora Isabel João, pela sua disponibilidade e apoio no desenvolvimento deste projeto.

A todos os que me têm acompanhado os meus sinceros agradecimentos.

RESUMO

A destilação é o principal processo de separação usado nas indústrias químicas para separação de misturas líquidas, e apesar de ser um processo muito intensivo energeticamente continua hoje em dia a ser o processo de separação preferencial. O largo impacto dos processos de destilação nos custos de investimento e operação tem impulsionado o desenvolvimento de sistemas complexos de destilação, cuja principal finalidade consiste na otimização energética do processo de separação.

No âmbito do estudo da utilização de colunas de elevada eficiência energética para separações multicomponente através da simulação de processos, o presente trabalho foca-se na compreensão, análise e avaliação da Coluna de Petlyuk, sistema de colunas com acoplamento térmico integral (FTCDC), inicialmente introduzida na década de 1940, com um reportado potencial para poupanças energéticas até cerca de 30% relativamente ao sistema tradicional. Para a simulação dos sistemas em estudo foi usado o *software* de simulação de processos HYSYS, cuja aplicação é desenvolvida e analisada no decurso deste trabalho, o qual é dividido em três partes principais: implementação dos processos em HYSYS para simulação rigorosa em modo de estado estacionário, otimização e simulação dinâmica e controlo.

A primeira parte diz respeito ao *design* dos sistemas e âmbito de aplicação do HYSYS nesta etapa. Através do estudo da separação de mistura ternária equimolar de isómeros de butanol, é apresentado um procedimento de implementação do sistema FTCDC e avaliados os resultados de simulação rigorosa fazendo a sua comparação com os resultados obtidos para o sistema tradicional.

A segunda parte é dedicada à otimização de ambos os sistemas, FTCDC e tradicional, cujos estudos se baseiam na simulação em estado estacionário. O elevado número de variáveis de *design* do sistema FTCDC pode conduzir a tedioso e moroso trabalho de simulação. Neste trabalho são aplicadas metodologias de desenho de experiências na otimização do sistema FTCDC, as quais permitiram uma significativa redução o número de simulações a executar, sendo o procedimento de otimização, baseado no procedimento de desenhos de experiências, desenvolvido ao longo desta parte. Os resultados de otimização de ambos os sistemas são avaliados e comparados.

A última parte deste trabalho debruça-se sobre o tema da operabilidade dos sistemas, avaliada através da simulação dinâmica dos mesmos e avaliação da estrutura de controlo implementada. A simulação dinâmica de processos, baseada em modelos dinâmicos, permite melhorar o seu *design*, otimização e operação, cujos resultados traduzirão de uma forma mais realística o desempenho do processo desenhado, uma vez que estes nunca se encontram num verdadeiro estado estacionário. Nesta parte é apresentado o procedimento de implementação da simulação dinâmica de ambos os sistemas, no qual se inclui a definição da configuração de controlo para cada um destes. Através dos resultados de simulação dinâmica de ambos os sistemas é avaliado o seu *design* e respetiva estrutura de controlo.

ABSTRACT

Distillation is the main separation process used in chemical industries for separation of liquid mixtures, and despite being a very energy-intensive process continues today to be the preferred separation process. The large impact of distillation processes in investment and operating costs has driven the development of complex distillation systems, whose main goal is the optimization of the energy separation process.

In the scope of the study of energy efficient columns usage for multicomponent separations through process simulation, this work focuses on understanding, analysing and evaluating the Petlyuk Column, fully thermally coupled distillations columns (FTCDC) system, initially introduced in the 1940s, with a reported potential for energy savings to about 30% over the traditional system.

For simulation of the systems under study was used the process simulator software HYSYS, whose application is developed and analysed in the course of this work, which is divided into three main parts: the process implementation for simulation with HYSYS in steady state mode, optimization and dynamic simulation and control.

The first part concerns the design of systems and the HYSYS application in this stage. By studying the separation of an equimolar ternary mixture of isomers of butanol, it is presented a procedure to implement the FTCDC system and evaluated the results of rigorous simulation, making its comparison with the results obtained for the traditional system.

The second part is dedicated to the optimization of both FTCDC and traditional systems whose studies are based in the steady state mode simulation. The higher number of design variables of the FTCDC system can lead to a tedious and time consuming simulation work. In this paper experimental design methodologies are applied for the FTCDC system optimization, which allowed a significant reduction in the number of simulation runs, and the optimization procedure, based on the designs of experiments procedure, was developed along this part. The optimization results of both systems are evaluated and compared.

The last part of this work focuses on the issue of systems operability, evaluated through their dynamic simulation and evaluation of the control structure implemented. The dynamic simulation of a process based on dynamic models enables the improvement of its design, optimization and operation, which results translate in a more realistic way the process performance, since they never are in a true steady state. In this part is presented the procedure for the dynamic simulation implementation of both systems, in which is included the definition of the control configuration for each system. Through the dynamic simulation results of both systems it is evaluated their design and their control structure.

ÍNDICE

1	Introdução.....	16
1.1	Simulação de Processos.....	16
2	Destilação	18
2.1	Fundamentos	18
2.2	<i>Design</i>	22
2.3	Sistemas Complexos de Destilação e Destilação Avançada	24
2.4	Controlo de Colunas Convencionais de Destilação.....	25
2.4.1	Controlo Regulatório.....	29
2.4.2	Controlo da Composição	30
2.4.3	Possíveis configurações: vantagens e desvantagens.....	31
3	Coluna Petlyuk – Revisão Bibliográfica	33
3.1	Eficiência energética	34
3.2	<i>Design</i>	35
3.3	Controlo.....	36
4	Implementação e Simulação em Estado Estacionário.....	39
4.1	Dados para Simulação	40
4.2	Implementação do Sistema Tradicional	42
4.3	Implementação do Sistema FTCDC.....	43
4.3.1	Implementação do sistema FTCDC através do “Column Templates”	43
4.3.2	Implementação do sistema FTCDC em ambiente parental	46
4.4	Comparação entre os sistemas.....	47
5	Otimização	48
5.1	Otimização do Sistema Tradicional.....	49
5.1.1	Avaliação Paramétrica.....	52
5.2	Otimização do Sistema FTCDC	55
5.2.1	Otimização através de técnicas de design Fatorial	58
5.2.2	Otimização paramétrica do número de pratos do Prefracionador	71
5.2.3	Avaliação paramétrica da condição térmica da alimentação e pressão de funcionamento.....	72
5.3	Comparação entre os sistemas.....	73
6	Simulação Dinâmica e Controlo.....	74

6.1	Etapas de Implementação dos Sistemas para Simulação Dinâmica.....	74
6.1.1	Simulação em Estado Estacionário	75
6.1.2	Determinação dos Volumes e Especificação dos Níveis de Líquido	77
6.1.3	Definição da Configuração de Controlo.....	79
6.1.4	Implementação das Válvulas de Controlo.....	82
6.1.5	Implementação das Malhas de controlo	83
6.1.6	Criação de <i>Stripcharts</i>	86
6.1.7	Passagem para Simulação Dinâmica.....	86
6.1.8	Correr a Simulação Dinâmica	89
6.1.9	Sintonização dos Controladores	92
6.2	Resultados de Simulação Dinâmica e Controlo	95
6.2.1	Inicialização e Estabilização.....	95
6.2.2	Sintonização dos controladores	99
6.2.3	Resposta dos Sistemas a Perturbações	104
6.3	Comparação entre os sistemas.....	108
7	Conclusões.....	110
8	Bibliografia	112
9	Anexos	116

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 – Variáveis controladas e manipuladas de uma coluna de destilação convencional: sistema de controlo 4x4.....	31
Tabela 2 – Configurações comuns de controlo de tradicional de colunas convencionais.....	31
Tabela 3 – Identificação e propriedades-chave dos componentes da mistura (Fonte: HYSYS).....	40
Tabela 4 – Dados e resultados de <i>design</i> do sistema FTCDC (Fonte: Computers & Chemical Engineering, 29(7), 1555-1559).....	41
Tabela 5 – Dados de implementação do sistema ST.....	42
Tabela 6 – Especificações do sistema ST para simulação rigorosa.....	43
Tabela 7 – Especificações do sistema FTCDC para simulação rigorosa.....	44
Tabela 8 – Dados de implementação do sistema FTCDC.....	45
Tabela 9 – Parâmetros de caracterização das correntes de interligação L1 e V3.....	45
Tabela 10 – Resumo dos resultados de implementação dos sistemas ST e sistema FTCDC.....	47
Tabela 11 – Parâmetros estruturais e pressão de operação do sistema ST.....	53
Tabela 12 – Parâmetros estruturais e pressão de operação do sistema FTCDC.....	59
Tabela 13 – Variáveis de otimização do sistema FTCDC.....	61
Tabela 14 – Especificação dos geradores.....	62
Tabela 15 – Esquema do 1º ciclo de simulações.....	62
Tabela 16 – Designação e níveis das variáveis de otimização do 1º ciclo de simulações.....	62
Tabela 17 – Resultados do 1º ciclo de simulações.....	63
Tabela 18 – Resultados da análise ANOVA ao 1º ciclo de simulações.....	63
Tabela 19 – Resultados da análise ANOVA ao 1º ciclo de simulações: efeitos e interações principais.....	64
Tabela 20 – Resíduos para o 1º ciclo de simulações.....	66
Tabela 21 – Variáveis do processo não significativas.....	66
Tabela 22 – Designação e níveis das variáveis de otimização do 2º ciclo de simulações.....	66
Tabela 23 – Resultados do 2º ciclo de simulações.....	67
Tabela 24 – Resultados da análise ANOVA ao 2º ciclo de simulações: efeitos e interações principais.....	67
Tabela 25 – Resíduos para o 2º ciclo de simulações.....	69
Tabela 26 – Designação e níveis das variáveis de otimização do 3º ciclo de simulações.....	69
Tabela 27 – Resultados do 3º ciclo de simulações.....	69
Tabela 28 – Resultados da análise ANOVA ao 3º ciclo de simulações: efeitos e interações principais.....	70
Tabela 29 – Resíduos para o 3º ciclo de simulações.....	71
Tabela 30 – Valores ótimos das variáveis de design do sistema FTCDC.....	72
Tabela 31 – Variáveis de design otimizadas do sistema ST.....	73
Tabela 32 – Variáveis de design otimizadas do sistema FTCDC.....	73

Tabela 33 – Comparação do consumo energético e custo total entre os sistemas ST e FTCDC	73
Tabela 34 - Dados de implementação dos sistemas tradicional e resultados de simulação.....	76
Tabela 35 - Dados de implementação dos sistemas FTCDC e resultados de simulação.....	77
Tabela 36 – Dimensionamento das colunas e tanques para o sistema ST.....	78
Tabela 37 – Dimensionamento das colunas e tanques para o sistema FTCDC.....	78
Tabela 38 – Esquema de emparelhamento das variáveis para o sistema ST	81
Tabela 39 – Esquema de emparelhamento das variáveis para o sistema FTCDC.....	82
Tabela 40 – Configuração dos controladores implementados na coluna 1 do sistema ST – controlo regulatório	84
Tabela 41 – Configuração dos controladores implementados na coluna 1 do sistema ST – controlo de composição.....	85
Tabela 42 – Configuração dos controladores implementados na coluna 2 do sistema ST – controlo regulatório	85
Tabela 43 – Configuração dos controladores implementados na coluna 2 do sistema ST – controlo de composição.....	85
Tabela 44 – Configuração dos controladores implementados no FTCDC – controlo regulatório	86
Tabela 43 – Configuração dos controladores implementados no sistema FTCDC – controlo de composição	86
Tabela 46 – Alterações ao sistema de controlo implementado no sistema FTCDC: configurações dos controladores	91
Tabela 47 – Parâmetros do <i>autotuner</i> integrado no “PID Controller” do HYSYS	94
Tabela 48 – Resultados de simulação em modo de estado estacionário (MEE) e em modo dinâmico (MD) após estabilização para o sistema ST	97
Tabela 49 – Resultados de simulação em MEE e MD após estabilização para o sistema FTCDC.....	99
Tabela 50 – Parametização do <i>autotuner</i> para sintonia dos controladores das malhas de controlo de composição do sistema ST	100
Tabela 51 – Parametização dos controladores PI associados às malhas de controlo de composição do sistema ST	100
Tabela 52 – Parametização do <i>autotuner</i> para sintonia dos controladores das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC.....	100
Tabela 53 – Parametização dos controladores PI associados às malhas de controlo de composição do sistema FTCDC.....	100
Tabela 54 – Resultados de simulação em MEE e em MD com controlo em modo automático do sistema ST	102
Tabela 55 – Resultados de simulação em MEE e em MD com controlo em modo automático do sistema FTCDC.....	103
Tabela 56 – Influência da variação de V3 no consumo energético do sistema FTCDC	108
Tabela 57 – Resultados de consumo energético com simulação em modo dinâmico dos sistemas ST e FTCDC.....	109
Tabela 58 – Resultados do “short-cut” design das sequências do sistema ST	121
Tabela 59 – Estudos preliminares de otimização: composições da alimentação F simuladas	125

Tabela 60 – Estudos preliminares de otimização: valores das variáveis otimizadas do sistema ST	126
Tabela 61 – Estudos preliminares de otimização: valores das variáveis otimizadas do sistema FTCDC	126
Tabela 62 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados – caso 1	128
Tabela 63 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados após dimensionamento – caso 1.....	128
Tabela 64 – Estudos preliminares de otimização: custo total dos sistemas ST e FTCDC otimizados – caso 1	128
Tabela 65 – Estudos preliminares de otimização: valores de L1 e V3 otimizadas do sistema FTCDC – casos 2.1, 3.1 e 4.1	129
Tabela 66 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados	129
Tabela 67 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados após dimensionamento.....	130
Tabela 68 – Estudos preliminares de otimização: custo total dos sistemas ST e FTCDC otimizados	130
Tabela 69 – Tabela de efeitos confundidos para um design fatorial fracionado 2^{8-4}	134
Tabela 70 – Avaliação RGA da configuração-LV para a coluna 1 do sistema ST	138
Tabela 71 – Avaliação RGA da configuração-LV para a coluna 2 do sistema ST	138
Tabela 72 – Avaliação RGA da configuração-LV para o sistema FTCDC.....	139
Tabela 73 – Efeito da alteração do caudal e composição da alimentação (1%) nas variáveis manipuladas para o sistema ST em modo de estado estacionário	140
Tabela 74 – Efeito da alteração do caudal e composição da alimentação (1%) nas variáveis manipuladas para o sistema FTCDC em modo de estado estacionário.....	141

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 – Classificação dos processos de separação.....	18
Figura 2 – Representação esquemática de uma coluna de destilação convencional	19
Figura 3 – Diagrama Txy para a mistura binária butanol e 2-butanol a pressão constante.....	20
Figura 4 – Diagrama de equilíbrio xy para a mistura binária butanol e 2-butanol a pressão constante	21
Figura 5 – Esquema de controlo básico de uma coluna de destilação: configuração-LV	28
Figura 6 – Representação esquemática da coluna de Petlyuk	33
Figura 7 – Diagramas de resíduo da mistura de butanol a 1 atm (esq.) e a 3 atm (dir.).....	42
Figura 8 – <i>Flowsheet</i> sistema ST	42
Figura 9 – <i>Flowsheet</i> e <i>subflowsheet</i> do sistema FTCDC através do <i>Column Templates</i>	45
Figura 10 – <i>Flowsheet</i> do sistema FTCDC	47
Figura 11 – Principais passos de otimização de processos.....	48
Figura 12 – Procedimento de otimização do sistema ST	51
Figura 13 – <i>Flowsheet</i> do sistema ST dimensionado	53
Figura 14 – Consumo de energia na coluna 1 em função da posição do prato de alimentação na coluna 1	53
Figura 15 – Consumo de energia na coluna 2 em função da posição do prato de alimentação na coluna 2	53
Figura 16 – Consumo de energia e custo total em função do número de pratos total da coluna 1.....	54
Figura 17 – Consumo de energia e custo total em função do número de pratos total da coluna 2.....	54
Figura 18 – Consumo de energia na coluna 1 e custo total em função da condição térmica da alimentação à coluna 1	54
Figura 19 – Consumo de energia e custo total em função da pressão de topo da coluna 1.....	54
Figura 20 – Consumo de energia e custo total em função da pressão de topo da coluna 2.....	54
Figura 21 – Procedimento de desenho de uma experiência	57
Figura 22 – <i>Flowsheet</i> do sistema FTCDC dimensionado	59
Figura 23 – Impacto de L1 no custo total do sistema, para V3 constante	60
Figura 24 – Impacto de V3 e da relação entre V3 e L1 no custo total do sistema	60
Figura 25 – Relação entre a variação do consumo total de energia e os custos totais do sistema.....	60
Figura 26 – Relação entre a variação das razões de refluxo e ebulição e os custos totais do sistema.....	60
Figura 27 – Representação esquemática das secções do sistema FTCDC e respetivas variáveis de otimização	61
Figura 28 – Representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos do 1º ciclo de simulações.....	64
Figura 29 – Variação do custo médio com os efeitos principais do 1º ciclo de simulações.....	64
Figura 30 – Variação do custo médio com as interações principais do 1º ciclo de simulações	65
Figura 31 – Representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos para o 1º ciclo de simulações	66
Figura 32 – Representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos do 2º ciclo de simulações.....	67

Figura 33 – Variação do custo médio com os efeitos principais do 2º ciclo de simulações.....	67
Figura 34 – Variação do custo médio com a interação GH, interação principal do 2º ciclo de simulações.....	68
Figura 35 – Representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos para o 2º ciclo de simulações	69
Figura 36 – Representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos do 3º ciclo de simulações.....	70
Figura 37 – Variação do custo médio com B, efeito principal do 3º ciclo de simulações.....	70
Figura 38 – Variação do custo médio com a interação GH, interação principal do 3º ciclo de simulações.....	70
Figura 39 – Representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos para o 3º ciclo de simulações	71
Figura 40 – Variação dos custos em função de NT_p (B)	71
Figura 41 – Variação dos custos em função da condição térmica da alimentação ao prefracionador.....	72
Figura 42 – Variação dos custos em função da pressão de topo da coluna principal.....	72
Figura 43 – <i>Flowsheet</i> do sistema ST	75
Figura 44 – <i>Flowsheet</i> do sistema FTCDC	75
Figura 45 – <i>Flowsheet</i> do sistema ST - sistema de controlo com configuração-LV	83
Figura 46 – <i>Flowsheet</i> do sistema FTCDC - sistema de controlo com configuração-LV.....	84
Figura 47 – Página geral do <i>Dynamics Assistant</i> para o sistema tradicional	88
Figura 48 – Página relativa às secções de pratos do <i>Dynamics Assistant</i> para o sistema ST.....	89
Figura 49 – Propriedades gerais, de execução e opções do “Integrator” para o sistema ST	90
Figura 50 – <i>Flowsheet</i> do sistema FTCDC – alteração à configuração da malha de controlo da composição do produto intermediário.....	92
Figura 51 – Sistema do relé de feedback.....	93
Figura 52 – Representação gráfica da saída $u(t)$ versus a entrada de erro no relé $e(t)$ de um relay com uma amplitude (d) e uma histerese (h).....	93
Figura 53 – Página do <i>autotuner</i> das propriedades do “PID Controller” do HYSYS.....	94
Figura 54 – Respostas das malhas de controlo de pressão em modo automático (PV, SP, OP e MP) do sistema ST	95
Figura 55 – Respostas das malhas de controlo de composição em modo manual (PV, SP, OP e MP) do sistema ST	96
Figura 56 – Respostas das malhas de controlo de pressão em modo automático (PV, SP, OP e MP) do sistema FTCDC.....	97
Figura 57 – Respostas das malhas de controlo de composição em modo manual (PV, SP, OP e MP) do sistema FTCDC.....	98
Figura 58 – <i>Stripchart</i> da malha de controlo XIC-102 do sistema ST - sintonia do controlador.....	100
Figura 59 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema ST em modo automático.....	101
Figura 60 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC em modo automático....	102
Figura 61 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema ST para uma variação de 1% no caudal de F	104
Figura 62 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema ST para uma variação de 1% na composição em B de F	105

Figura 63 – Respostas da malha de controlo de nível no condensador da coluna 1 do sistema ST para uma variação de 1% na no caudal (esq.) e na composição em B (dir.) de F.....105

Figura 64 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC para uma variação de 1% no caudal de F106

Figura 65 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC para uma variação de 1% na composição em B de F.....106

Figura 66 – Respostas das malhas de controlo de pressão e composição do sistema FTCDC para aumento de V3 em 2 kmol/h.....108

Figura 67 – Estudos preliminares de otimização: *flowsheet* , sequência indireta, dimensionado127

Figura 68 – Estudos preliminares de otimização: *flowsheet* , sequência direta, dimensionado127

Figura 69 – Estudos preliminares de otimização: *flowsheet* sistema FTCDC dimensionado.....127

Figura 70 – Algoritmo para estabelecer a pressão da coluna de destilação e do tipo de condensador.....135

NOTAÇÃO

HYSYS	<i>Software</i> de simulação de processos propriedade do grupo AspenTech
Aspen Plus	<i>Software</i> de simulação de processos propriedade do grupo AspenTech
MD	Modo dinâmico
MEE	Modo de estado estacionário
FTCDC	Colunas de destilação com acoplamento térmico integral
ST	Sistema de destilação tradicional - composto por colunas de destilação convencionais
RGA	Matriz de ganhos relativos (<i>Relative Gain Array</i>)
Símbolos gerais	
B	Caudal/ corrente de produto de fundo
D	Caudal/ corrente de produto de topo
F	Caudal/ corrente de alimentação ao sistema
L	Caudal/ corrente líquida
L1	Caudal/corrente de interligação líquida coluna principal-prefracionador
L3	Caudal/corrente de interligação líquida prefracionador-coluna principal
N	Posição do prato
N_F	Posição do prato de alimentação ao prefracionador
N_{L1}	Posição do prato da interligação de topo
N_{SD}	Posição do prato de extração do produto intermédio
NT	Número total de pratos
NT_C	Número total de pratos da coluna principal
NT_P	Número total de pratos do prefracionador
N_{V3}	Posição do prato da interligação de fundo
P	Pressão
ΔP	Perda de carga
q	Condição térmica (fração de vapor)
z	Composição
QC	Consumo/corrente de energia no condensador
QR	Consumo/corrente de energia no ebulidor
QT	Consumo total de energia
R	Caudal/ corrente de refluxo
rB	Razão de ebulição
rR	Razão de refluxo
SD	Caudal/ corrente de produto intermédio/ lateral
V	Caudal/ corrente de vapor
V1	Caudal/corrente de interligação de vapor prefracionador-coluna principal
V3	Caudal/corrente de interligação de vapor coluna principal-prefracionador

Associados à Otimização Factorial	
A, B, C, D ...	Enumeração dos fatores de otimização
DQM	Desvio quadrático médio
F₀	Inverso da distribuição de F para um grau de confiança de 95%
g.l.	Graus de liberdade
k	Número de factores de otimização
p	Número de fatores definidos pela combinação dos fatores
SS	Variância
x	Nível dos fatores
y	Custo total obtido por simulação
ŷ	Custo total obtido por modelo de regressão
Z(α)	Pontuação padronizada

Associados à Simulação Dinâmica e Controlo	
CV/PV	Variável controlada
FIC	Indicador e controlador de caudal
h_B	Nível de líquido do ebulidor
h_D	Nível de líquido do condensador
kc	Parâmetro ou ganho proporcional de um controlador PID
LIC	Indicador e controlador de nível
MV	Variável manipulada
OP	Percentagem de abertura da válvula de controlo
PIC	Indicador e controlador de pressão
SP	Valor de <i>set-point</i> da variável controlada
τ_d	Parâmetro ou tempo derivativo de um controlador PID
τ_i	Parâmetro ou tempo integral de um controlador PID
x	Fração molar líquida
XIC	Indicador e controlador de composição

Notação inferior à linha	
A, B, C	Enumeração dos componentes
c	Identifica colunas de destilação
p	Prefracionador
s	Identifica secções de pratos
B, D, SD	Enumeração de correntes

1 INTRODUÇÃO

A crescente procura de energia a nível global, associada a questões políticas e de sustentabilidade económica, social e ambiental têm servido de motor para a investigação e desenvolvimento de processos mais eficientes energeticamente, que conduzam a menores custos de investimento e operação, com menores impactos ambientais e maior segurança.

De entre as operações unitárias e dentro dos processos químicos, a destilação é de longe a técnica de separação mais usada. A arte da destilação remonta pelo menos ao primeiro século DC e no século XI era usada em Itália para produzir bebidas alcoólicas [1]. Durante o século XX, a destilação multiestágios foi de longe o método industrial mais utilizado para a separação de misturas líquidas de componentes químicos. Diferentes razões estão na base da sua vasta difusão, como o baixo custo capital de operação relativamente a outros métodos de separação [2] e o alcance do conhecimento do processo, *scale-up*, sistema de controlo e do comportamento dinâmico. No entanto, esta operação apresenta algumas limitações como o elevado consumo energético, sobretudo na separação de misturas de componentes cuja volatilidade relativa é baixa (menor que 1,5) [1], devido à baixa eficiência termodinâmica [3] e também inadequabilidade para a separação de compostos termicamente sensíveis.

No seguimento do desenvolvimento de sequências de colunas de destilação convencionais ótimas ou quase ótimas surgem sequências de colunas de destilação complexas e acopladas termicamente [2], baseadas no conceito de integração energética, introduzido há mais de 70 anos atrás. A ideia base da integração energética reside na permuta de calor entre as correntes quentes e correntes frias de um processo. Assim, com o fim de melhorar a eficiência energética da operação de destilação e reduzir os custos de capital e de operação, diferentes técnicas de destilação com integração energética têm sido propostas.

1.1 SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

Neste âmbito a simulação de processos constitui uma ferramenta tecnológica essencial, cujo desenvolvimento se baseia em modelação de processos e através da qual é possível o *design* e desenvolvimento de processos, dimensionamento e determinação da operabilidade dos equipamentos que o integram para a generalidade das indústrias químicas.

Até ao advento dos computadores, cálculos manuais e métodos gráficos foram desenvolvidos e vastamente aplicados nos estudos de processos. A partir de cerca de 1950 começaram a ser desenvolvidas simulações computacionais analógicas e digitais para resolver muitos problemas de engenharia [4] e a utilização de correlações empíricas simples foram progressivamente substituídas por modelos numéricos mais rigorosos e complexos [5].

O *design*, operação, controlo e otimização de colunas de destilação têm sido extensivamente estudado desde há mais de um século e envolve cálculos iterativos de equilíbrio das fases líquido-vapor e balanços por

componente prato-a-prato o que é ideal para a computação digital [4]. Inicialmente a maioria dos engenheiros escreviam os seus próprios programas para resolver as equações não-lineares algébricas que descrevem o estado estacionário de uma coluna de destilação e as equações não-lineares diferenciais ordinárias que descrevem o seu comportamento dinâmico e muitas empresas químicas e petroquímicas desenvolveram internamente os seus programas de simulação de processos em estado estacionário [4]. Por volta de 1980 surgiram simuladores comerciais de estado estacionário e atualmente dominam este campo. Os simuladores dinâmicos comerciais foram desenvolvidos um pouco mais tarde, a par do necessário desenvolvimento tecnológico dos computadores para que estes proovessem a capacidade e velocidade computacional necessária a este tipo de simulações [4].

No presente estado de arte ambos simuladores de estado estacionário e dinâmico são vastamente usados na indústria e nas universidades [4], não só na fase de projeto, mas também durante a fase de operação. Os programas mais comuns de simulação de processos comerciais incluem o Aspen Plus, CHEMCAD e o DESIGN II para simulações de processos em estado estacionário e o HYSYS, ASPEN Plus Dynamic, PRO/II, HYSYM e o UniSim Design para simulação dinâmica de processos [6].

O *design* de processos químicos contínuos é normalmente levado a cabo no estado estacionário para um dado intervalo operatório, sendo assumido que um sistema de controlo pode ser desenhado para manter o processo ao nível operatório desejado e dentro das restrições de *design*. No entanto, uma estática de processo desfavorável e características dinâmicas podem limitar a eficácia do sistema de controlo, conduzindo a um processo que é incapaz de cumprir as especificações de *design* [2].

Com a simulação dinâmica é-nos possível uma maior aproximação do comportamento real das variáveis de um processo uma vez que estes nunca se encontram num real estado estacionário. A sua utilização permite prever se o processo desenhado nos permite obter o produto desejado de forma segura e se é de fácil operação contribuindo desta forma para a otimização do seu *design* e operação com maior exatidão. Refletindo a possibilidade de cumprir as especificações do processo e também a sua controlabilidade, a simulação dinâmica constitui uma importante ferramenta no *design* e teste de diferentes estratégias de controlo antes da escolha de uma que seja adequada para implementação, permitindo obter a resposta do processo a perturbações do sistema e otimizar os controladores associados às malhas de controlo a implementar. A análise dinâmica é essencial na identificação de áreas específicas da instalação que têm dificuldade em atingir o estado estacionário [7].

2 DESTILAÇÃO

A destilação é um processo de separação largamente usado na separação de misturas de dois ou mais componentes de diferentes volatilidades.

Genericamente, o objetivo de qualquer processo de separação é a separação de uma mistura de dois ou mais componentes em dois ou mais produtos de composição distinta da mistura original. Os diferentes processos de separação existentes podem ser catalogados segundo o tipo de alimentação a separar, processo subjacente à separação e agentes usados conforme se apresenta na [figura 1](#).

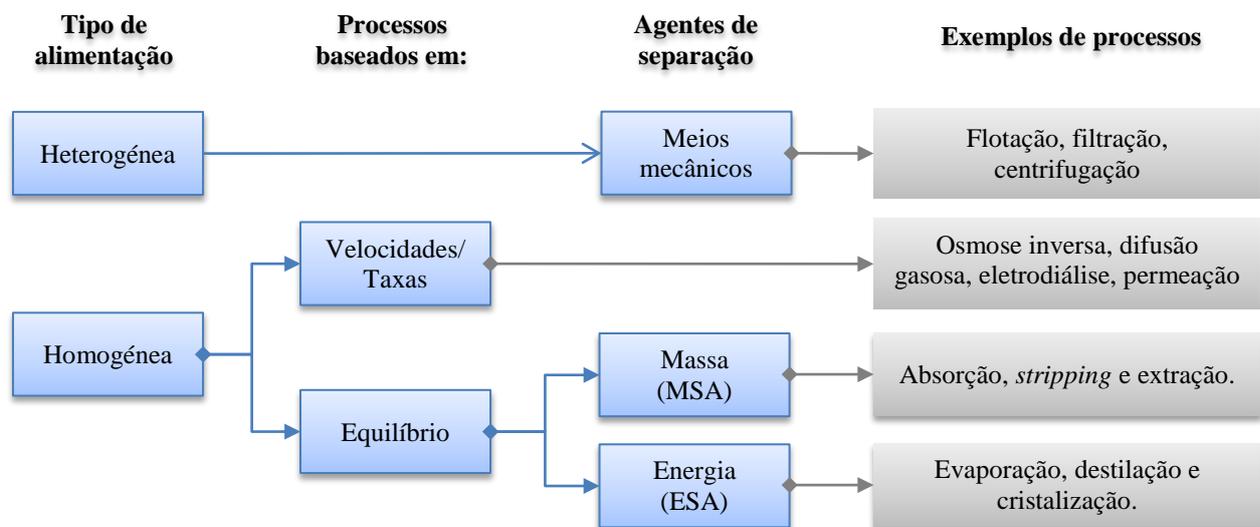


Figura 1 – Classificação dos processos de separação

Usando como agente de separação a energia, as separações por destilação são processos energeticamente intensivos, que envolvem elevados custos operacionais. Economias significativas podem ser feitas mediante a utilização de sistemas complexos e novas técnicas de destilação.

Apesar de a destilação ser energeticamente muito intensiva esta continua a ser o processo preferencial de separação, apresentando vantagens de ordem cinética bem como termodinâmica: a separação ocorre sem adição de material inerte e a transferência de massa por unidade de volume é limitada apenas por resistências à difusão, pelo que a destilação tem o potencial para elevadas velocidades de transferência de massa e proporcionalmente envolve baixo custo capital.

2.1 FUNDAMENTOS

Tradicionalmente numa operação de destilação obtêm-se duas correntes de produto, a de topo ou destilado e a de fundo, ou resíduo, cujas composições diferem da alimentação. A mistura a separar (alimentação) pode-se encontrar no estado líquido, de vapor, ou numa mistura líquido-vapor, o produto de fundo encontra-se normalmente no estado líquido e o produto de topo pode-se obter no estado líquido ou no estado gasoso, ou em ambos. O calor é usado como agente de separação (ESA – *Energy Separating Agent*).

O equipamento básico necessário à destilação, conforme representado na [figura 2](#), consiste numa coluna convencional, com uma alimentação e duas correntes de produtos, um ebulidor e um condensador.

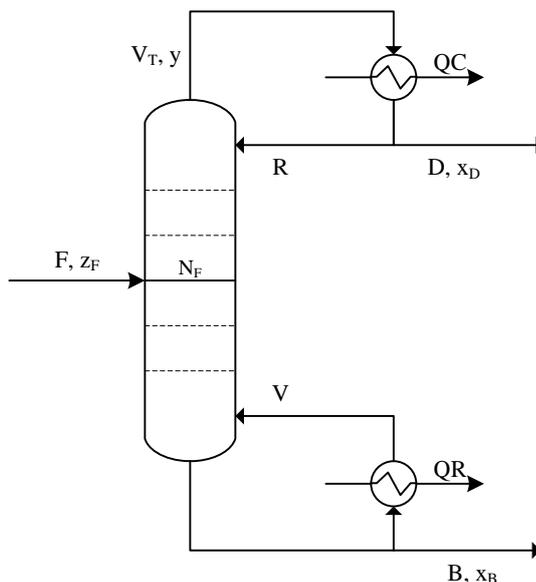


Figura 2 – Representação esquemática de uma coluna de destilação convencional

Genericamente, a separação por destilação de uma mistura em produtos de distinta composição requer:

1. Formação de duas fases, líquido e vapor, que contactem entre si;
2. Componentes da mistura com diferentes pressões de vapor, ou volatilidades, para que se repartam em diferentes extensões pelas duas fases formadas;
3. Possibilidade de separação das duas fases por gravidade ou por outros meios mecânicos [1].

Nas colunas de destilação convencionais a fase de vapor, que sobe a coluna, é formada no ebulidor, onde o calor fornecido evapora uma contracorrente líquida. A contracorrente líquida, que desce a coluna, resulta da condensação da corrente de vapor que chega ao condensador, onde é removida parte do calor fornecido no ebulidor. As correntes de vapor e líquido são colocadas em contacto através de pratos ou enchimento.

O mecanismo subjacente à destilação é o equilíbrio líquido-vapor (VLE, *vapour-liquid equilibrium*), formado através do contato de ambas as fases formadas, líquida e de vapor, cuja composição será diferente. A facilidade de separação dos componentes de uma mistura através da destilação depende essencialmente da diferença na sua pressão de vapor, ou volatilidade, sendo a diferença de composição das fases líquida e de vapor a força motriz da operação de destilação ([figura 3](#)).

O parâmetro K_i , que constitui a medida da tendência do componente i para vaporizar, pode ser definido segundo a .

$$K_i = \frac{\text{fração molar do componente } i \text{ na fase de vapor, } y_i}{\text{fração molar do componente } i \text{ na fase líquida, } x_i}$$

Equação 1

Com $K_i < 1$ o componente i encontra-se concentrado na fase líquida, $K_i = 1$ indica que o componente i se encontra igualmente distribuído por ambas as fases e com $K_i > 1$ o componente i encontra-se concentrado na fase de vapor. O valor de K_i é função da temperatura, pressão e composição.

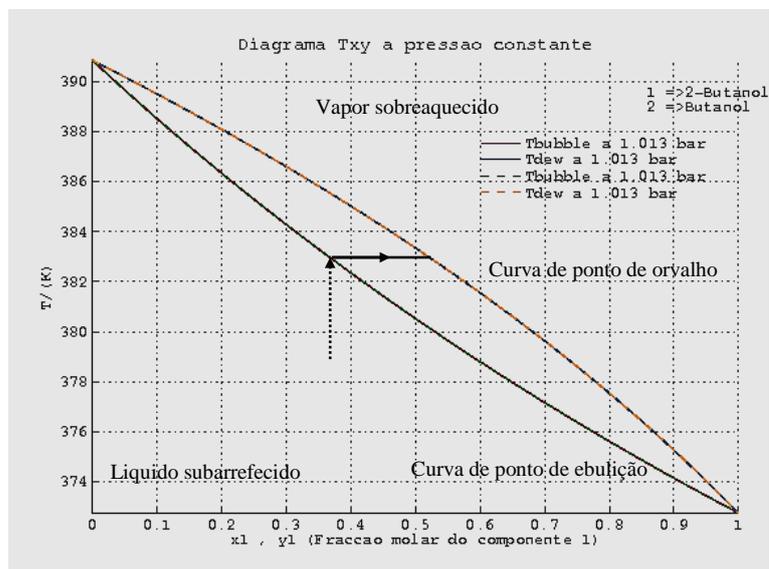


Figura 3 – Diagrama Txy para a mistura binária butanol e 2-butanol a pressão constante

Fonte: Portal de Laboratórios Virtuais de Processos Químicos [8]

Para misturas ideais os valores de VLE podem ser definidos segundo a [equação 2](#):

$$y_i P = x_i \gamma_i(T, x) P_i^0(T)$$

Equação 2

Onde:

- x_i, y_i – frações molares líquidas e de vapor do componente i ;
- P – pressão;
- T – temperatura;
- P_i^0 – pressão de vapor saturado do componente i ;
- γ_i – coeficiente de atividade do componente i na fase líquida.

O coeficiente de atividade é uma medida da não idealidade da mistura e varia com a temperatura bem como com a composição. Em misturas ideais o seu valor é um.

Outra forma de expressar a forma motriz da destilação é referindo-nos à volatilidade relativa, definida na [equação 3](#), sendo este parâmetro o mais comumente usado nos métodos de *design* de destilação, o seu valor é inversamente proporcional ao consumo de energia e diretamente proporcional à facilidade de separação.

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j}$$

Equação 3

O valor da volatilidade relativa quantifica a facilidade de vaporização de um componente em relação a outro, tendo que quanto maior o seu valor maior será a tendência de um vaporizar em relação ao outro e a mistura poderá ser facilmente separada por destilação. Volatilidades relativas próximas da unidade indicam que a separação não é possível através de destilação.

Para sistemas binários, a pressão constante, a representação da composição de líquido e vapor em equilíbrio, na forma de um diagrama *xy* (figura 4) permite-nos a fácil visualização da facilidade da separação por destilação, tendo que quanto mais afastada estiver a curva de equilíbrio da diagonal mais fácil será a separação da mistura.

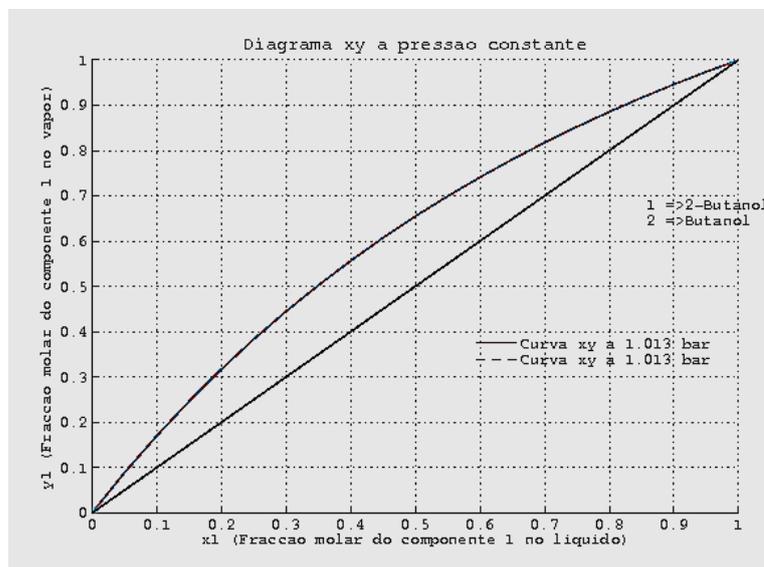


Figura 4 – Diagrama de equilíbrio *xy* para a mistura binária butanol e 2-butanol a pressão constante

Fonte: Portal de Laboratórios Virtuais de Processos Químicos [8]

Na separação multicomponente o conceito de índice de separação, ou índice de facilidade de separação, *ESI* (*easiness separation index*), é usado para determinar qual a facilidade de separação entre os componentes de uma mistura, onde considerando uma mistura ternária de A, B e C (sendo A o componente mais volátil e C o menos volátil), pode ser definido pela equação 4, relativa ao índice de facilidade de separação de A/B em relação B/C.

$$ESI = \frac{\alpha_{AB}}{\alpha_{BC}} \quad \text{Equação 4}$$

Um valor de $ESI < 1$ indica que a separação de A/B é mais difícil que B/C, $ESI \sim 1$ indica que ambas as separações têm o mesmo grau de dificuldade e $ESI > 1$ indica que A/B é de mais fácil separação que B/C.

Para sistemas ternários, a sua composição pode ser representada num diagrama triangular, quer equilátero quer reto, onde os três extremos do triângulo representam os componentes puros.

De entre as possíveis representações destacam-se os mapas das curvas de resíduo. As curvas que os constituem representam a composição do resíduo líquido com o tempo como resultado de uma destilação em um andar de equilíbrio por *batch*. De acordo com Doherty e Malone [9], a estrutura dos mapas de resíduos constitui o princípio termodinâmico subjacente que define a forma dos perfis de composição e consequentemente os produtos que podem ser obtidos a partir de uma operação de destilação de uma dada alimentação.

Este tipo de representação é útil para uma análise preliminar para compreensão e caracterização da separação, particularmente quando temos misturas que formam azeótropos, e inclui as fronteiras e regiões de

destilação e possíveis produtos, cujo desenvolvimento e aplicação se encontram devidamente descritos na literatura disponível relativa a processos de separação, como em J. D. Seader e E. J. Henley, *Separation Process Principles*, 2^a ed. Wiley, 2006 [1] e de M. F. Doherty e M. F. Malone, *Conceptual Design of Distillation Systems*, 1^a ed. McGraw-Hill, 2001 [9].

Os mapas de curvas de destilação constituem uma alternativa às curvas de resíduo e representam a composição da fase líquida para o processo contínuo de destilação, sendo as curvas determinadas em condições de refluxo total. Estes tipos de curvas têm sido extensivamente utilizados por Stichlmair e associados [10], [11] para o desenvolvimento de sequências realizáveis.

2.2 DESIGN

O *design* de uma coluna de destilação pode ser dividido nos seguintes passos [6]:

1. Especificação do grau de separação pretendido (i.e. especificações de produto);
2. Seleção das condições de operação: processo *batch* ou contínuo e pressão de operação;
3. Seleção do tipo de dispositivo de contato: pratos ou enchimento;
4. Determinação dos requisitos de pratos (andares de equilíbrio) e refluxo;
5. Dimensionamento da coluna: diâmetro e número real de pratos;
6. *Design* interno da coluna: tipo de pratos, distribuidores, suportes de enchimento;
7. *Design* mecânico: da coluna em si e dos acessórios internos

Os métodos de *design* de colunas de destilação tradicionais são bem conhecidos, podendo-se encontrar na literatura diferentes metodologias de *design* para diferentes âmbitos de aplicação. A determinação dos requisitos de pratos e refluxo é um passo fulcral no *design* de colunas de destilação e dentro das metodologias disponíveis diferentes níveis de descrição do processo podem ser usados nos cálculos de *design*, tendo que tradicionalmente se dividem entre métodos *design* rigorosos e métodos *short-cut*.

A base dos métodos rigorosos assenta na solução do conjunto de equações MESH (*Material balance, Equilibrium, Summation, and Heat (energy) balance equations* – equações de balanço material, de equilíbrio, adição e de balanço de energia) nos cálculos prato-a-prato [6].

Para os sistemas binários, fixando a composição de um dos componentes fixa-se a composição do outro e normalmente não são necessários procedimentos iterativos para determinar os requisitos de pratos e refluxo, podendo ser usados métodos gráficos simples como o método de McCabe e Thiele [6].

Sorel (1899) desenvolveu e aplicou pela primeira vez as equações básicas de andar de equilíbrio (balanço material e de energia) para a análise de sistemas binários. Com base nestas equações, introduzindo simplificações, como assumir um transbordo equimolar, elimina-se a necessidade de resolver as equações de balanço de energia - Método de Lewis-Sorel, cujas equações podem ser resolvidas pelo método gráfico McCabe e Thiele, sobre o diagrama de equilíbrio *xy* [6].

As Equações de Smoker, baseadas numa equação analítica que permite a determinação do número de pratos quando se assume a volatilidade relativa constante, constituem outro método de *design*, o qual é particularmente útil quando o valor de volatilidade relativa é baixo e o método de McCabe e Thiele se torna impraticável dado o elevado número de pratos necessários [6].

Ainda que os sistemas binários sejam normalmente considerados separadamente, os métodos de *design* desenvolvidos para sistemas multicomponente podem ser aplicados em sistemas binários.

O problema de determinação dos requisitos de refluxo e pratos para a destilação multicomponente é bastante mais complexo que para misturas binárias. A separação entre os produtos de topo e de base é especificada através de limites sobre dois componentes-chave, entre os quais se pretende fazer a separação. O procedimento normal é a resolução das equações MESH prato-a-prato, desde o topo e fundo da coluna para o ponto de alimentação. Tal procedimento para ser exato implica que as composições calculadas no ponto de alimentação se engrenem e coincidam com a composição da alimentação, o que normalmente implica o ajuste de composições e repetição de cálculos até uma satisfatória engrenagem no ponto de alimentação e cálculos de tentativa e erro para a determinação das temperaturas de prato [6].

Dada a necessidade de cálculos fastidiosos e complexos para a aplicação deste tipo de procedimento, antes do advento dos computadores foram desenvolvidos diferentes métodos *short-cut* para simplificação do *design* de colunas multicomponente. Estes podem ser divididos em duas classes [6]:

1. Simplificações dos procedimentos rigorosos prato-a-prato que permitem cálculos feitos à mão ou graficamente, sendo exemplos típicos desta abordagem os métodos dados por Smith e Brinkley (1960) e Hengstebeck (1976);
2. Métodos empíricos, os quais são baseados na performance de operação de colunas ou em resultados de *designs* rigorosos, sendo típicos exemplos desta abordagem a correlação de Gilliland, na qual se baseia o método *short-cut* FUG (Fenske – Underwood – Gilliland) e a correlação de Erbar-Maddox.

Hoje em dia quase todas as torres de separação vapor-líquido, multiestágios, multicomponente, quer de pratos quer de enchimento, são habitualmente projetadas através de simuladores. Os cálculos subjacentes são normalmente baseados em andares de equilíbrio, mas modelos de transferência de massa mais realísticos estão também disponíveis. Os cálculos de andar de equilíbrio aplicam balanços molares de componentes, balanços entálpicos e equilíbrio da fase líquido-vapor em cada prato, e utiliza um número razoável de correlações termodinâmicas baseadas em equações de estado ou em coeficientes de atividade de fase-líquida para estimar os valores de K (K -value) e as entalpias. O conjunto de equações resultante é não linear e é resolvido de forma iterativa através de um método *inside-out* ou de *Newton* para determinação de perfis de caudais de vapor e líquido e respetiva composição e de perfis de temperatura, a partir de um conjunto de pressuposições iniciais [6].

2.3 SISTEMAS COMPLEXOS DE DESTILAÇÃO E DESTILAÇÃO AVANÇADA

O elevado dispêndio energético dos processos de destilação é em parte devido à elevada ineficiência termodinâmica da tecnologia convencional de destilação, cujas principais razões incluem:

- A energia degradada entre o intervalo de temperaturas na coluna (mais alta no fundo e mais baixa no topo): parte do calor fornecido no ebulidor, à temperatura mais alta na coluna, é removida à temperatura mais baixa da coluna por um fluido de arrefecimento no condensador, não podendo este ser reutilizado na mesma coluna para aquecimento de outras correntes [6];
- A irreversibilidade termodinâmica, em destilação multicomponente, que ocorre na mistura de correntes na alimentação, topo e base da coluna, inerente a qualquer separação que envolva componentes intermediários [12].

O desenvolvimento de **sistemas complexos de destilação**, sobretudo associados à destilação multicomponente e que decorre da sequenciação otimizada de colunas convencionais, tem sido impulsionado pelos crescentes custos associados ao consumo de energia, e atende à ineficiência energética dos processos de destilação [9].

Várias soluções para a redução do dispêndio energético na destilação têm sido propostas usando diferentes tipos de integração energética entre colunas, entre as quais se encontram:

Colunas acopladas termicamente

- Colunas com parede divisória ou coluna Kaibel (*DWC - divided wall column*);
- Colunas de destilação integralmente acopladas termicamente (*FTCDC – fully thermally coupled distillation column*) ou coluna Petlyuk;
- Colunas de destilação parcialmente acopladas:
 - Coluna de retificação de corrente lateral;
 - Coluna de esgotamento de corrente lateral.

Colunas termicamente integradas

- Acoplamento interno através de permutadores de calor;
- Colunas multi-efeito, com integração energética a jusante ou a montante.

Colunas assistidas por bombas de calor [13], como:

- Mecânicas: por recompressão de vapor e/ou *flash* do produto de fundo;
- De absorção: sistema de fluido de trabalho em circuito fechado;

Colunas adiabáticas, entre outras.

Adicionalmente, métodos de destilação avançada têm sido desenvolvidos e aplicados para ultrapassar restrições à utilização da destilação convencional relativamente às características da alimentação (como a

baixa diferença de volatilidade entre os componentes ou a formação de azeótropos; vaporização de toda a alimentação para a recuperação de uma pequena quantidade de um composto de elevado ponto de ebulição; a instabilidade térmica do composto a separar, mesmo sobre condições de vácuo; ou elevada corrosividade ou incrustação da mistura) sendo a sua separação mais difícil ou mesmo impossível através da destilação convencional.

Os processos de **destilação avançada** [1] incluem:

Destilação extrativa, a qual usa um solvente não reativo e que não forma azeótropos com os componentes da mistura, para alteração da volatilidade relativa dos componentes-chave.

Destilação salina, uma variante da destilação extrativa, usa um sal iónico para alteração da volatilidade relativa dos componentes-chave, que se dissolve na corrente de refluxo. Não sendo volátil este permanece na fase líquida à medida que esta desce a coluna.

Destilação com variação de pressão, usada na separação de misturas azeotrópicas cujo ponto azeotrópico é sensível à pressão.

Destilação azeotrópica homogénea, usada na separação de misturas azeotrópicas com recurso a um arrastador, o qual forma um azeótropo com um ou mais componentes com ponto de ebulição mínimo, devendo ser adicionado no topo da coluna, ou com ponto de ebulição máximo, devendo ser adicionado na base da coluna.

Destilação azeotrópica heterogénea, usada igualmente para separação de misturas azeotrópicas com recurso a um arrastador que forma um azeótropo com ponto de ebulição mínimo, o qual no condensador se divide em duas fases líquidas imiscíveis, onde uma retorna à coluna (refluxo) e outra é produto da separação.

Destilação reativa, usada na separação de misturas mediante a reação seletiva e reversível de um ou mais dos seus componentes com um agente de separação mássico. Após separação dos componentes não reagidos, procede-se à recuperação do agente de separação e dos outros componentes reagentes por reversão da reação. 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).

2.4 CONTROLO DE COLUNAS CONVENCIONAIS DE DESTILAÇÃO

Genericamente, para qualquer problema de controlo, precedendo ao *design* dos controladores, a seleção da estrutura de controlo envolve a seleção dos objetivos de controlo, normalmente associados à rentabilidade dos processos e a seleção da configuração de controlo, ou seja, seleção da estrutura de controlo em si [2].

Os passos para a determinação de uma estrutura de controlo adequada são os seguintes [14]:

1. Definir os objetivos do sistema de controlo e a natureza das perturbações;
2. Perceber os princípios do processo em termos de comportamento dinâmico;
3. Propor uma estrutura de controlo consistente com os objetivos e características do processo;
4. Atribuir controladores e avaliar a estrutura de controlo proposta com as perturbações previstas através do uso de simulação dinâmica.

A seleção dos objetivos de controlo é normalmente baseada em objetivos económicos/ de gestão, conhecimento do processo e requisitos operacionais. Embora os objetivos específicos possam variar com o processo/ instalação existe um número de requisitos gerais aos quais se deve atender, nomeadamente relacionados com [15]:

- Segurança;
- Regulamentações ambientais;
- Operação económica da instalação;
- Operação estável da instalação.

Após a seleção dos objetivos de controlo é possível proceder ao *design* do sistema de controlo e avaliação da controlabilidade do processo, cujo procedimento envolve três passos principais [15]:

1. Seleção das variáveis controladas, manipuladas e medidas;
2. Escolha da estratégia e estrutura de controlo;
3. Configuração e parametrização dos controladores.

Considerando que o ponto de partida de qualquer projeto de *design* de processo é a definição de objetivos para esses mesmos processos, na destilação existem muitas possíveis abordagens. Uma das abordagens geralmente usadas na destilação assenta em três aspetos principais:

1. **Controlo do balanço material:** o controlo do balanço material visa manter a soma dos caudais médios dos produtos exatamente igual ao caudal médio da alimentação, mantendo desta forma a coluna balanceada [16];
 - a) Os ajustes resultantes nas correntes do processo devem ser suaves e graduais para evitar a perturbação da operação da coluna ou dos equipamentos do processo a jusante;
 - b) Os níveis de retenção da coluna e no ebulidor e condensador devem ser mantidos entre os limites máximos e mínimos.
2. **Controlo de qualidade do produto:** na maioria dos casos, em destilação binária, visa manter a concentração de um componente em uma das correntes, de topo ou de base, num valor especificado e manter a composição da outra tão próximo quanto possível do valor desejado de composição [16];

Ambos os controlos de balanço material e de composição devem funcionar satisfatoriamente face a possíveis perturbações como o caudal, condição térmica e composição da alimentação, perturbações relacionadas com

o tipo utilidades usadas e a variação das suas condições térmicas e de pressão, fatores ambientais, entre outros.

3. **Satisfação de restrições:** para uma satisfatória operação da coluna têm de se observar algumas restrições, como por exemplo [16]:
- a) A coluna não deve inundar;
 - b) A queda de pressão deve ser alta o suficiente de forma a manter uma operação eficaz, isto é, de forma a evitar exsudação ou esvaziamento;
 - c) A diferença de temperatura no ebulidor não deve exceder a diferença de temperatura crítica;
 - d) O caudal de alimentação não deve conduzir à sobrecarga da capacidade de transferência de calor no ebulidor e condensador,
 - e) A pressão de operação da coluna não deve ser próxima da pressão máxima de operação.

Adicionalmente existem outros aspetos do controlo de uma coluna, como o seu arranque e paragem, transições (como mudança de especificações de produtos), recuperação de calor, testes, entre outros [16]. Para além dos aspetos acima mencionados, uma nova vertente de controlo associada à otimização de processos tem vindo a ser desenvolvida.

Os aspetos a considerar são muitos e podem variar consoante a abordagem e a natureza dos objetivos. Para atender a estes aspetos inúmeras estratégias e técnicas de controlo são estabelecidas conforme a dificuldade de um processo de destilação específico. O controlo por *feedback* e *feedforward*, controlo de balanço material, de desacoplamento ou de cascata são algumas das abordagens tradicionais de controlo da destilação [17].

Atendendo aos pontos abaixo mencionados, o controlo de colunas de destilação pode constituir um problema desafiante [15]:

1. Pode existir forte interação entre as variáveis do processo;
2. O comportamento da coluna pode ser muito não-linear, especialmente em separações de alta pureza;
3. As colunas de destilação frequentemente têm uma dinâmica muito lenta;
4. As restrições do processo são importantes;
5. As composições dos produtos são frequentemente não medidas;
6. Existe um largo número de possíveis estruturas de controlo.

Outra importante complicação no controlo em destilação, mesmo em colunas convencionais, é o facto de existirem muitas configurações de colunas, nomeadamente para os ebulidores e condensadores e também os vários processos e objetivos de controlo alternativos.

A maioria das colunas de destilação convencionais é tratada como um sistema 5x5 (5 graus de liberdade em operação dinâmica) [4], [18], [19].

No controlo convencional as variáveis que se desejam controlar são os níveis do ebulidor e condensador, pressão de funcionamento da coluna e pureza dos produtos (normalmente a sua composição). As cinco

variáveis manipuladas geralmente consideradas são os seguintes caudais: refluxo, vapor de ebulição, produto de topo, produto de fundo e vapor no topo, tendo que na prática o vapor de ebulição é indiretamente manipulado pelo aquecimento no ebulidor e o vapor de topo pelo arrefecimento no ebulidor. As perturbações típicas consideradas no estudo de sistemas de controlo de colunas de destilação são o caudal, composição e condição térmica da alimentação [19], [20].

Num sistema de controlo 5x5 existem 120 possíveis combinações SISO (single-input, single-output) possíveis. No entanto, quando consideradas todas as restrições do processo e possíveis atrasos nos tempos de respostas para determinados emparelhamentos, normalmente sobram poucas.

Na prática os sistemas de controlo são implementados de maneira hierárquica, com um controlo regulatório (básico) ao mais baixo nível [19]. Os dois principais objetivos do controlo regulatório são:

- 1) Atender às tarefas de controlo onde é necessária uma resposta rápida;
- 2) Tornar simples o problema de controlo visto dos níveis acima.

Os níveis mais altos de controlo podem incluir sistemas de controlo de supervisão e otimização [19] e estão geralmente associados a questões de qualidade, económicas, entre outras.

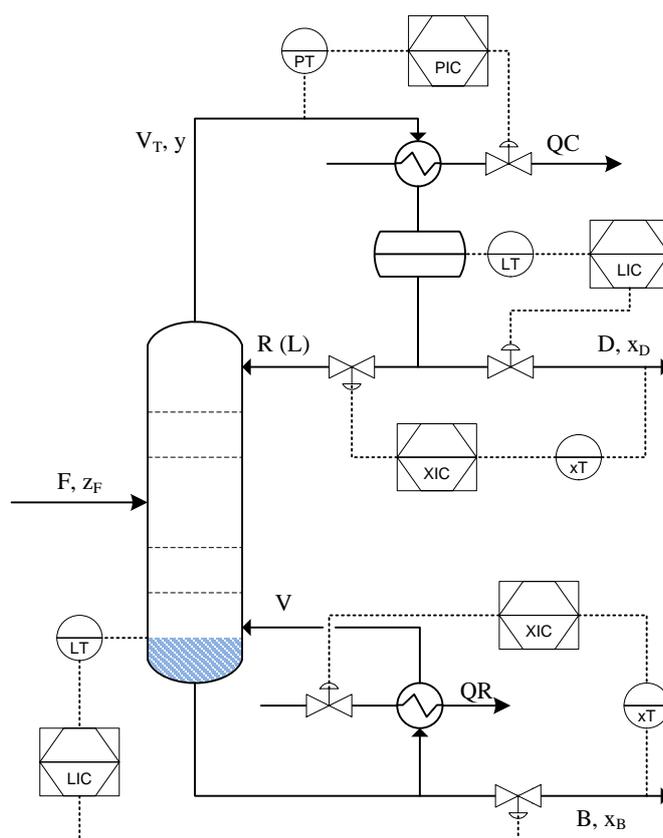


Figura 5 – Esquema de controlo básico de uma coluna de destilação: configuração-LV

Na destilação, em termos de estabilização, é necessário estabilizar dois modos integradores associados aos níveis no ebulidor e condensador. Adicionalmente, para uma operação estável, é geralmente necessário um

apertado controlo da pressão, pelo menos numa curta escala de tempo. Assim três malhas de controlo são implementadas ao nível regulatório, e como o sistema de controlo deve ser simples geralmente implementam-se controladores SISO descentralizados [19], [20].

Diferentes autores como Sigurd Skogestad, Lundström e Jacobsen [21], Lundström e Skogestad [22] e Sloley [23] têm discutido quais das cinco variáveis manipuladas acima mencionadas devem ser usadas nas três malhas de controlo regulatório (malhas de controlo dos níveis e pressão).

Por convenção, a configuração resultante é nomeada pelas duas variáveis independentes que são deixadas para controlo da composição, cujo esquema tipo se apresenta na [figura 5](#).

2.4.1 CONTROLO REGULATÓRIO

2.4.1.1 CONTROLO DA PRESSÃO

Maioria dos sistemas de controlo da destilação quer convencionais, quer avançados, bem como os estudos reportados sobre controlo de colunas de destilação, assume que a coluna opera a pressão constante, no entanto as flutuações de pressão tornam o controlo mais difícil e reduzem a performance da unidade uma vez que esta altera as cargas de vapor e os perfis de temperatura, tendo que frequentemente a temperatura é usada como variável controlada como substituto para controlo de composição, conforme será discutido mais à frente e a compensação da pressão é essencial para manter a composição desejada. As variações da pressão podem alterar as volatilidades relativas e outros problemas menos comuns podem surgir das flutuações de pressão. As quedas de pressão podem alterar a fase da alimentação, para um estado diferente do qual a coluna foi projetada e tal pode provocar a sua inundação [23].

A pressão da coluna é gerada pela ebulição e é aliviada pela condensação e ventilação (purga). Para encontrar uma variável efetiva para controlo de pressão é necessário determinar o que afeta mais a pressão. A sua escolha depende do processo e das condições da utilidade de arrefecimento, configuração do equipamento e dos objetivos de operação [14].

Tipicamente numa coluna de condensador total, quer o aquecimento do ebulidor ou o arrefecimento no condensador são bons candidatos para controlo da pressão, enquanto uma coluna com condensador parcial é necessário determinar se retirar a corrente de vapor afeta mais a pressão do que a condensação do refluxo [14].

2.4.1.2 CONTROLO DOS NÍVEIS DO EBULIDOR E CONDENSADOR

Do ponto de vista do senso comum, para assignar variáveis manipuladas ao controlo de nível escolhe-se simplesmente a corrente com maior impacto direto. Para tal podemos comparar a magnitude do caudal de refluxo versus produto de topo e da ebulição versus caudal do produto de fundo. A “Regra de 10” pode ser aplicada. Esta regra declara que se existir uma diferença de 10-para-1 ou maior então a corrente com maior caudal deve ser usado para o controlo de nível [14].

2.4.2 CONTROLO DA COMPOSIÇÃO

As malhas de controlo da composição numa coluna são os mais importantes controlos de estado estacionário. O propósito do controlo da composição é a satisfação de restrições definidas pelas especificações de qualidade dos produtos. Para alcançar um bom controlo de composição dois aspetos devem ser examinados: a dinâmica do processo e as características das perturbações. Controlo estreito é possível se o equivalente tempo de atraso na malha é pequeno comparado com a menor constante de tempo de uma perturbação com amplitude significativa [14].

Na destilação, uma rápida medição para controlo de composição frequentemente traduz-se na temperatura de prato, sendo o caudal de vapor uma boa variável manipulada, que sobe rapidamente a coluna e usualmente tem um ganho significativo na temperatura de prato e indiretamente na composição. Se a alimentação possui múltiplos componentes, fixar a temperatura e pressão de prato pode não fixar a composição, pelo que um modelo de estado estacionário pode ser usado para comparar as vantagens de usar um analisador de composição *on-line* em vez de um controlador de temperatura. Nas situações em que o aparente tempo de atraso na malha de controlo da composição não pode ser mantido baixo comparativamente com perturbações significativas, as próprias perturbações devem ser alvo de atenção, e sendo estas passíveis de medição ou antecipação o controlo por *feedforward* é um bom candidato [14].

2.4.2.1 CONTROLO DA TEMPERATURA

O controlo da composição dos produtos de uma coluna, conforme já mencionado é usualmente realizado via controlo da temperatura, uma vez que os sensores de temperatura são menos dispendiosos, altamente confiáveis, reprodutíveis, contínuos e mais rápidos quando comparados com sensores de composição [14].

Na perspetiva de efetividade em controlo Skogestad enuncia como vantagens o fecho de uma malha de controlo de temperatura razoavelmente rápida a estabilização do perfil de composição da coluna (mantendo as perturbações dentro da coluna), permite o controlo de nível indireto reduzindo a necessidade de controlo de nível, dá o controlo indireto da composição reduzindo a sensibilidade às perturbações, torna o restante problema de composição menos interativo tornando possível um bom controlo de dois-pontos de composição e torna o comportamento da coluna mais linear [20].

A sensibilidade da medição da temperatura para medir a variação de um componente-chave ou de um importante componente para cada prato pode ser determinada se as variações de composição prato-a-prato forem grandes e a dos outros componentes forem pequenas. É necessário determinar que prato exhibe a resposta da temperatura relacionada à composição em todas as situações de perturbação. Uma resposta mensurável de temperatura tem de estar presente para todas as variações do processo a que a coluna pode ser sujeita [14].

2.4.3 POSSÍVEIS CONFIGURAÇÕES: VANTAGENS E DESVANTAGENS

Na literatura, bem como na prática, diferentes configurações são usadas para o controlo de colunas de destilação convencionais. É prática comum a associação a manipulação do vapor de topo (através do arrefecimento no condensador) para controlo da pressão. Determinada a variável manipulada para controlo da pressão ficamos com um sistema de controlo 4x4, de acordo com o apresentado na [tabela 1](#).

Tabela 1 – Variáveis controladas e manipuladas de uma coluna de destilação convencional: sistema de controlo 4x4

Variáveis controladas	Variáveis manipuladas
Nível do condensador (h_D)	Caudal do produto de topo (D)
Nível do ebulidor (h_B)	Caudal do produto de fundo (B)
Composição do produto de topo (x_D ou T_D)	Caudal de refluxo (L)
Composição do produto de fundo (x_B ou T_B)	Caudal do vapor de ebulição (V)

Para um sistema 4x4 temos 24 possíveis combinações SISO, cujo número acresce com a possibilidade de usar controlo por razões (L/D e V/B). O número de combinações viáveis reduz-se significativamente quando atendemos à dinâmica do sistema (tempos de atraso no processo) bem como ao objetivo de controlo dual de composições, tendo que as apresentadas na [tabela 2](#) são as mais comumente consideradas.

Tabela 2 – Configurações comuns de controlo de tradicional de colunas convencionais

Variáveis controladas	Variáveis Manipuladas				
h_D	D	L	D	L	D ou L
h_B	B	B	V	V	B ou V
x_D (ou T_D)	L	D	L	D	(L/D)
x_B (ou T_B)	V	V	B	B	(V/B)
Configuração	LV	DV	LB	DB	(L/D)(V/B)

De acordo Skogestad et al. [21], [24], por comparação das diferentes configurações, o mesmo conclui que:

Configuração-LV: é uma boa escolha para controlo de 1 ponto (uma composição), mas não é recomendada para controlo de 2 pontos, onde $\lambda_{11}^{LV}(0) > 10$ [24] devido à sensibilidade às perturbações e a uma pobre performance de controlo devido à interação entre as malhas de controlo.

A sua performance é particularmente pobre com largos tempos de atraso. No entanto, se é possível alcançar rápido controlo, por exemplo, através do controlo de duas temperaturas dentro da coluna, então a configuração-LV pode ainda ser viável. Uma das vantagens da configuração-LV é o facto de serem mínimas ou inexistentes as interações com o controlo dos níveis.

Configuração-DV: Para controlo de 1 ponto D tem ser usado sempre em controlo automático e nunca em modo manual. Esta configuração pode ser melhor relativamente à LV para colunas com largo refluxo por o controlo do nível do condensador é mais simples. Para controlo de 2 pontos a sua performance é

relativamente pobre quando o produto de fundo não é mais puro que o de topo, mas é melhor quando o produto de fundo é mais puro. As desvantagens desta configuração são que a sua performance pode variar dependendo das condições de operação e fraca performance se falhas conduzirem a D constante.

Configuração-DB: É inadequada para controlo de 1 ponto. Em controlo de 2 pontos apresenta um bom controlo de qualidade, em particular em colunas de elevada pureza e/ou largo refluxo. É simples de implementar e o controlo de nível é favorecido pelo largo refluxo. A principal desvantagem é que lhe falta integridade uma vez que em caso de falha dá D ou B constante (não é possível com esta configuração colocar uma malha de controlo em manual).

Configuração-(L/D)(V/B): Esta é uma boa escolha de forma global para todos os modos de operação. A principal desvantagem é a necessidade de medição de todos os caudais (L, V, D e B) o que a torna mais sensível a falhas e mais difícil de implementar, e necessita de controlo de nível apertado.

3 COLUNA PETLYUK – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

As colunas Petlyuk consistem em colunas com acoplamento térmico integral de correntes. Foram inicialmente patenteadas em diferentes modificações por diversos autores: sequência com prefracionador por Brugma em 1942 [25], coluna com parede divisória por Wright em 1949 [26] e coluna com parede divisória para separação de misturas quaternárias por Cahn et al. em 1962 [27], e mais tarde independentemente redescobertas por Petlyuk, Platonov e Slavinskii em 1965 [28] e por Platonov, Petlyuk e Zhvanetskiy em 1970 [29], com base da análise teórica da destilação termodinamicamente reversível. Estes 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, tendo que quando removido um permutador de calor é o refluxo líquido, ou a carga de vapor, provida por uma nova corrente que é retirada de outra coluna [30].

A classe das FTCDC para uma mistura de n componentes pode ser descrita pelas seguintes características [31]:

1. O número total de secções da coluna é igual a $n(n-1)$ em vez de $2(n-1)$ usado nos esquemas convencionais;
2. É suficiente ter apenas 1 condensador e 1 ebulidor;
3. Os componentes-chave em cada coluna são os dois componentes com volatilidades extremas;
4. n produtos de determinada pureza são obtidos na coluna de produto.

Uma FTCDC é atingida quando toda a carga de vapor é provida por apenas um ebulidor e todo o refluxo por apenas um condensador [30]. Na [figura 6](#) apresenta-se o esquema da coluna Petlyuk, o qual consiste em duas colunas, comumente um prefracionador conectado a uma coluna de destilação convencional, equipada apenas com um ebulidor e um condensador.

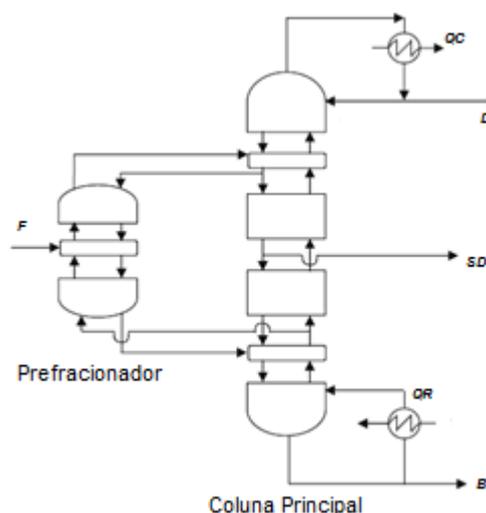


Figura 6 – Representação esquemática da coluna de Petlyuk

(Adaptado de: Jana, 2010[32])

3.1 EFICIÊNCIA ENERGÉTICA

De acordo com Petlyuk, a FTCDC diminui os consumos de energia na separação de misturas ternárias devido às suas vantagens termodinâmicas [31]:

- 1) Na coluna preliminar (prefracionador), a composição das correntes na seção de alimentação é próxima da alimentação (i.e., perdas termodinâmicas pela mistura de correntes é praticamente inexistente);
- 2) As perdas termodinâmicas por mistura de correntes nos extremos das colunas são praticamente inexistentes;
- 3) A ausência de um ebulidor ou condensador na saída da corrente de produto lateral diminui o consumo de energia devido ao facto de as correntes de vapor e líquido serem duas vezes usadas nas secções localizadas acima e abaixo da saída da corrente de produto lateral e;
- 4) As perdas termodinâmicas devidas a remistura das correntes na segunda coluna de um sistema tradicional são inexistentes.

Atendendo ao potencial de redução do consumo de energia e dos custos de investimento das configurações termicamente acopladas relativamente ao sistema tradicional muito trabalho de investigação tem sido dedicado a este tipo de sistemas.

Diferentes investigadores mostraram que a configuração FTCDC é capaz de alcançar poupanças energéticas, as quais, relativamente ao caudal de vapor total, permitem uma redução de 10% a 50% [33–37] quando comparados com os sistemas tradicionais, usando sequências diretas e indiretas. Esta redução do caudal de vapor para além de permitir a redução do consumo energético, poderá conduzir a menores custos de capital uma vez que um baixo caudal de vapor requer menores diâmetros para as colunas de destilação e menores áreas de permuta de calor para a evaporação e condensação.

Apesar dos estudos efetuados demonstrarem um potencial de poupança energética e económica da FTCDC relativamente às configurações tradicionais, estudos comparativos com outros sistemas complexos desenvolvidos a partir da estrutura da FTCDC reportam uma situação é distinta. De acordo com estudos desenvolvidos por Agrawal e Fidkowski (1998) [38] à eficiência termodinâmica de cinco configurações de destilação ternária: sequência convencional direta e indireta e três distintas configurações termicamente acopladas (FTCDC, coluna termicamente acoplada com retificação lateral e coluna termicamente acoplada com esgotamento lateral), estes concluíram que para a FTCDC o intervalo de valores da composição da alimentação e volatilidades relativas para os quais esta configuração é termodinamicamente mais eficiente é bastante limitado. De entre as três configurações de colunas termicamente acopladas estudadas, as configurações com uma coluna de retificação lateral e esgotamento lateral proporcionam mais frequentemente a configuração mais eficiente relativamente à configuração integralmente acoplada e são de mais fácil *design* e operação [38].

Comparando com estruturas energeticamente integradas, diferentes autores, como Annakou & Mizsey [39] e Rév et al. [40] demonstraram a configuração FTCDC nem sempre é superior, mesmo em termos de poupança

energética. A configuração FTCDC permite poupanças energéticas relativamente às configurações tradicionais, no entanto esta apenas é competitiva com as configurações energeticamente integradas para determinados intervalos de valores de ESI e de distribuição (fração) dos componentes na alimentação.

Um dos potenciais da estrutura FTCDC está na possibilidade da sua implementação por reconversão do sistema tradicional, tal como reportado por Hwang [41], cujo prefracionador e secção intermédia do sistema FTCDC correspondem à 1ª e 2ª coluna, respetivamente, do sistema tradicional.

3.2 DESIGN

Devido às correntes de interligação entre as duas colunas o *design* deste tipo de configuração complexa torna-se uma tarefa difícil comparativamente às configurações tradicionais e os procedimentos de *design* para separações multicomponentes não são aplicáveis ao seu *design* quando não se tem informação sobre as correntes de interligação [42].

Annakou e Mizsey [39] classificaram os métodos de *design* segundo duas abordagens principais de síntese de processos: hierárquica e algorítmica.

1) Abordagem hierárquica

Na abordagem hierárquica, é desenvolvido primeiramente um *design* preliminar tipicamente baseado nas equações *short-cut* de Fenske-Underwood-Gilliland-Kirkbride (FUGK). De forma a aplicar este método é necessária a decomposição da coluna de Petlyuk numa sequência de três colunas de destilação convencional conforme efetuado por Triantafyllou e Smith [34], os quais dividem a coluna principal em duas colunas, criando um sistema de três colunas de destilação contínua, obtendo assim um sistema de três colunas, no qual podem ser aplicadas as equações *short-cut* de *design* para o *design* de destilação multicomponente. Embora este procedimento facilmente dê os números de pratos das três colunas separadas, fazer coincidir as composições das correntes de interligação requer ajuste e demorados cálculos iterativos [42], não sendo este sistema inteiramente equivalente ao sistema termicamente acoplado à exceção de para os cálculos de refluxo mínimo [43]. Depois de obtido o *design* preliminar, simulações rigorosas devem ser levadas a cabo para validar o *design* e alguns critérios de otimização, tal como minimização do consumo de energia, podem ser usados no ajuste do design final. Os trabalhos reportados por Triantafyllou e Smith (1992) [34], Annakou e Mizsey (1996) [39], Hernandez e Jimenez (1996) [44] e por A. Jiménez et al. (2003) [45] foram realizados segundo esta abordagem.

2) Abordagem algorítmica

A outra abordagem é baseada em algoritmos baseados em programação inteira mista não linear os quais resolvem superestruturas que incluem todas as alternativas para o sistema [30], [46–48] e como resultado, a melhor sequência, de acordo com a função objetivo especificada, é identificada, mas tipicamente a custo de um elevado esforço computacional [43]. Modelos de simulação rigorosa associados com a otimização

matemática têm sido usados para encontrar o *design* e as condições de operação ótimas para sistemas de destilação multicomponente, no entanto, estes procedimentos resultam em soluções de mínimo local devido à limitação matemática da técnica de otimização [42].

Pode ainda ser usada uma combinação de ambas as aproximações como levado a cabo por Vaca et al. (2007), os quais introduziram o método de colocação como uma ferramenta alternativa ao *design* de colunas Petlyuk, usando técnicas de colocação ortogonal para o *design* preliminar de colunas de Petlyuk, que recaem sobre a abordagem hierárquica e aplicam métodos padrão de otimização não linear, que recaem sobre a abordagem algorítmica, para modificar a localização das correntes de interligação, da corrente de produto intermediário e os valores dos caudais internos, sendo o problema formulado para que se cumpram as especificações de composição das três correntes de produto [43].

Para além das referidas abordagens, modelos baseados em cálculos prato-a-prato encontram-se também reportados. Amminudin et al. [49] desenvolveram um método semi-rigoroso baseado em balanços material e cálculos de equilíbrio, que usa também a decomposição da sequência acoplada em três colunas de destilação convencionais. Kim distingue o *design* estrutural da coluna Petlyuk, o qual é feito primeiramente a partir cálculos em refluxo total, do *design* operacional, no qual os valores requeridos para a razão de refluxo e caudais correntes de interligação têm de ser usados [42], [50–52]. Em ambos os estudos são usados cálculos de equilíbrio rigorosos. Não obstante, a estrutura resultante tipicamente necessita de ajustes.

Com recurso a simuladores comerciais, Navarro et al. [53] apresentam uma estratégia para simulação de sequências termicamente acopladas, partindo da simulação de um sistema acíclico baseado em colunas convencionais, termodinamicamente equivalente ao sistema cíclico, cujo *design* estrutural e operacional pode ser obtido a partir de métodos *short-cut*, estabelecida a separação desejada. Os resultados obtidos da simulação acíclica servem como ponto de partida para a implementação do sistema cíclico, assumindo que os valores iniciais dos caudais das correntes de interligação são iguais ao valores de reciclo e vapor a entrar na coluna equivalente ao prefractionador e as suas composições iguais às da fase nos pratos onde são retiradas, obtendo-se desta forma o sistema cíclico.

3.3 CONTROLO

Apesar das características aparentemente atrativas da FTCDC, esta configuração não encontrou ainda um largo uso industrial e mesmo para destilações a baixas temperaturas, onde o consumo de energia é de vital importância, a FTCDC está ainda por usar [3].

Apesar de ser possível encontrar variados estudos sobre eficiência termodinâmica e *design* do sistema FTCDC, os estudos sobre a operabilidade deste tipo de colunas continuam aquém do desejável e a informação disponível sobre estratégias de controlo dos sistemas FTCDC é ainda reduzida.

Conforme denotado por Hwang et al. [54], dois grupos de estudos distintos têm sido desenvolvidos no sentido de melhorar a operabilidade da FTCDC. Um destes aborda o desenvolvimento de novas estruturas de

forma a melhorar o seu controlo. O outro grupo de estudos lida com uma melhor estrutura de controlo da FTCDC.

Em comparação com uma coluna de destilação convencional, a FTCDC tem mais graus de liberdade tanto na operação e como no *design* o que dificulta tanto o projeto da coluna bem como do sistema de controlo e estas dificuldades têm evitado o seu uso alargado.

Um dos desafios de controlo resulta da transferência da corrente de vapor para trás e para a frente entre as colunas do sistema. Isto significa que nenhuma das colunas tem uma pressão uniforme mais alta ou mais baixa, o que requer controlo cuidadoso dos perfis de pressão em todas as colunas [12].

O controlo de especificação de produtos é mais complexo na FTCDC uma vez que se obtém três correntes de produtos numa coluna. Nas colunas de destilação convencional a especificação do produto de topo é normalmente ajustada através da manipulação do caudal de refluxo e a do produto de fundo pelo vapor de ebulição. A corrente lateral da FTCDC é um produto adicional comparativamente às colunas binárias e o controlo de especificação é difícil porque o componente intermediário, o maioritário da corrente lateral, está localizado no meio do diagrama de composição do sistema de destilação. Enquanto o controlo das especificações de produto de topo e de fundo é similar ao das colunas convencionais, o controlo do produto lateral não é simples [54].

A especificação na corrente lateral pode ser elevada com o aumento da razão do fluxo líquido para vapor, mas a sensibilidade da mudança de especificação à razão é baixa. Esta corrente tem duas impurezas, do componente mais volátil e do componente menos volátil, o que significa que a refinação com o aumento do refluxo ou da ebulição nem sempre melhora a especificação do produto lateral. Geralmente, o aumento do refluxo e da ebulição eleva a especificação, no entanto o efeito do incremento é limitado [54].

Trabalhos como os desenvolvidos por Wolf e Skogestad (1995) [18] e Young Han Kim (2000) [50] no âmbito do *design* e operabilidade da FTCDC reportam a adaptação da estratégia de controlo tradicionalmente aplicada a colunas convencionais, com controlo por *feedback* das especificações de composição dos produtos da FTCDC como uma estratégia de controlo viável, fazendo o controlo da composição dos produtos de topo, lateral e de fundo por manipulação dos caudais de refluxo, da corrente lateral e do vapor de ebulição, respetivamente.

Wolf e Skogestad concluem que através desta estratégia de controlo (considerando apenas o total de impurezas no produto lateral), será aceitável, no entanto tal implica o controlo das razões de separação de vapor e de líquido (associadas aos caudais de interligação) [18]. Devido às elevadas interações entre estas malhas, baseando-se na análise RGA em estado estacionário, sugerem também um emparelhamento cruzado como alternativa, fazendo-se o controlo da composição do produto lateral por manipulação do caudal de vapor de ebulição e da composição do produto de fundo por manipulação do caudal da corrente do produto lateral.

Os trabalhos desenvolvidos por Halvorsen e Skogestad [55], [56] e por Rodríguez et al. [57], baseados na mesma estratégia para controlo das especificações de produto denotam a possibilidade de otimização da operação da FTCDC do ponto da performance do sistema de controlo bem como do ponto de vista energético através da manipulação dos caudais de interligação.

Halvorsen e Skogestad, por análise em estado estacionário concluem que para o sistema FTCDC realizar todo seu potencial de redução do consumo energético requer algum tipo de controlo de otimização, indicando que a forma mais simples de o fazer será alcançar controlo de auto-otimização por controlo por *feedback* da variável que caracteriza a operação ótima, tendo que no trabalho desenvolvido pelos mesmos a determinação dessa mesma variável pode ser baseada na análise dos perfis de composição e estados [55].

Rodríguez et al., através da avaliação dinâmica do sistema por aplicação do método RGA e baseando nos valores de IAE obtidos para as diferentes malhas de controlo da composição indicam que a operação do sistema FTCDC em condições diferentes da do ponto de consumo mínimo de energia pode levar a *designs* com melhor performance do controlo por *feedback* [57].

Hwang et al. apresenta como viável uma estratégia de controlo distinta com a manipulação do caudal de vapor no prefracionador (caudal da interligação de vapor coluna principal – prefracionador) para controlo da composição do produto lateral [54], sendo adicionalmente necessário o controlo do caudal da corrente de produto lateral.

4 IMPLEMENTAÇÃO E SIMULAÇÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO

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 qual se verifica a necessidade de efetuar ciclos de cálculos iterativos até que uma estrutura aceitável seja encontrada.

Através do HYSYS, para o *design* e simulação de sistemas constituídos unicamente por colunas convencionais é suficiente o conhecimento das condições e composição da alimentação, e as especificações de produto, geralmente pureza e/ou fração de recuperação de determinado componente, e de pressão de funcionamento. Na destilação multicomponente atende-se adicionalmente à configuração do sistema (tipo de sequência de separação), a qual pode ser determinada atendo às heurísticas para destilação multicomponente ou mediante simulação das diferentes sequências.

A tarefa de *design* de colunas convencionais em HYSYS é simples, e a informação estrutural, necessária para a simulação rigorosa da operação, pode ser obtida através da operação “Short-Cut Column” (baseada em métodos de cálculos *short-cut*), através da qual se obtém informações como número de pratos mínimos e posição ótima do prato de alimentação, bem como os dados relativos às condições operacionais, nomeadamente razão de refluxo mínima, valores relativos ao consumo energético para um valor específico de razão de refluxo externo (real, determinado com base na razão de refluxo mínima calculada pelo simulador e nas heurísticas de destilação) e dados relativos às correntes do processo, entre outros.

Relativamente à facilidade de implementação, verifica-se uma situação distinta na implementação de sistemas com acoplamento térmico de correntes. Para a implementação do sistema FTCDC para além da informação estrutural é necessário adicionalmente informação relativa às correntes de interligação e os procedimentos usuais de *design* multicomponente não são aplicáveis nestes sistemas quando não é conhecida a informação de correntes de interligação.

No presente trabalho os valores de *design* iniciais para implementação do sistema FTCDC em HYSYS são baseados nos resultados publicados por Kim [51] o qual apresenta um procedimento baseado em balanços material e cálculos de equilíbrio por computação prato-a-prato, tendo como ponto de partida as especificações de design (composição e condições da alimentação e especificação dos produtos) e os caudais de líquido no prefracionador e coluna principal, os quais são derivados do cálculo do caudal de líquido mínimo [36], assumindo 1,5 vezes o valor de caudal mínimo. A determinação da estrutura do prefracionador atende ao parâmetro β (separação ótima do componente intermediário através da interligação superior – especificação da composição da corrente de topo do prefracionador em termos de fração molar do componente intermediário), introduzido por Fidkowski & Krolikowski [36].

Destacam-se ainda duas abordagens alternativas, as quais permitem a obtenção dos valores iniciais de *design* através do HYSYS.

Apresentada por Jiménez et al. [43], cujo *design* base do sistema FTCDC é obtido por aproximação a uma sequência baseada em colunas de destilação convencionais, sendo desenvolvido por analogia às tarefas de separação em cada seção: o *design* preliminar para uma sequência de colunas convencionais é obtido, sendo esta constituída por um prefracionador, donde se obtém um produto de topo, composto pelo componente mais volátil e pelo intermediário, e um produto de fundo, composto pelo componente intermediário e pelo componente mais pesado, os quais constituem a alimentação a duas colunas de destilação convencionais binárias que separam o componente intermediário do mais leve e do mais pesado, respetivamente; as seções equivalentes relativamente à FTCDC são identificadas, servindo de base para o *design* da FTCDC. O *design* final é obtido através de simulação rigorosa para validação do *design* estrutural obtido e otimização operacional com base nos caudais de interligação.

Uma abordagem similar é usada por Navarro et al. [53], o qual obtém o *design* estrutural base da estrutura acíclica equivalente por aproximação a uma sequência de colunas convencionais binárias, usando a operação “Short-Cut Column” do HYSYS. Da simulação rigorosa da estrutura acíclica obtém os valores de inicialização para a estrutura cíclica, das variáveis de *design* operacional, especificamente relativos às composições, condições e caudais das correntes de interligação, e para o *design* estrutural baseia-se igualmente no obtido através do “Short-Cut Column”.

4.1 DADOS PARA SIMULAÇÃO

Artigo base – Kim, Y. H. (2005). *Structural design of fully thermally coupled distillation columns using a semi-rigorous model*. Computers & Chemical Engineering, 29(7), 1555-1559.

Neste artigo é apresentado o procedimento de *design* de um sistema FTCDC para a separação de diferentes misturas ternárias, na qual se inclui a numa mistura ternária de isómeros de butanol (*s*-butanol, A – componente leve / *i*-butanol, B – componente intermediário / *n*-butanol, C – componente pesado), equimolar, cujos resultados são usados como ponto de partida no presente trabalho. Na [tabela 3](#) é apresentada a identificação e propriedades-chave dos componentes da mistura.

Tabela 3 – Identificação e propriedades-chave dos componentes da mistura (Fonte: HYSYS)

	<i>s</i> -butanol (2-butanol)	<i>i</i> -butanol	<i>n</i> -butanol (1-butanol)
Classe/Família	Álcoois	Álcoois	Álcoois
N.º CAS	78-92-2	78-83-1	71-36-3
Ponto de ebulição normal (a 1 atm), °C	99,55	107,85	117,75
Temperatura crítica, °C	262,95	274,65	289,95
Pressão crítica, atm	41,16	41,45	43,62

As especificações de *design* usadas estabelecem uma fração de 0.975 em A no produto de topo, uma fração de 0.95 em B no produto lateral e uma fração de 0.975 em C no produto de fundo. As computações de equilíbrio vapor-líquido são efetuadas usando o modelo de atividade UNIQUAC, cujos parâmetros são

obtidos a partir da base de dados do HYSYS e os caudais são assumidos como 1,5 vezes os caudais mínimos. Os resultados de *design* para a separação da mistura acima indicada reportados apresentam-se na [tabela 4](#).

Tabela 4 – Dados e resultados de *design* do sistema FTCDC (Fonte: Computers & Chemical Engineering, 29(7), 1555-1559)

Estrutura		Operação	
Número total de pratos da coluna principal	74	Caudal de refluxo (kmol/h)	4.63
Número total de pratos do prefracionador	19	Caudal de vapor de ebulição (kmol/h)	4.71
Posição da corrente de interligação superior	15	Caudal da corrente de interligação superior (kmol/h)	1.57
Posição da corrente de produto lateral	42	Caudal da corrente de interligação inferior (kmol/h)	2.04
Posição da corrente de interligação inferior	66	Pressão de funcionamento do sistema (atm)	1
Posição da alimentação ao prefracionador	8	Caudal de alimentação ao prefracionador (kmol/h)	1
Dimensões das secções da coluna principal		Secção superior da coluna principal	15
		Secção intermédia da coluna principal	51
		Secção inferior da coluna principal	8

Para avaliação preliminar da separação dos componentes são obtidos o valor de *ESI* da mistura e o diagrama de resíduos para a mistura a 1atm.

Os dados para determinação do *ESI* da mistura foram obtidos a partir do HYSYS, cuja forma de cálculo se encontra descrito no guia de referência *Aspen HYSYS Thermodynamics COM Interface* [58], sendo este dependente do pacote de propriedades escolhido. No presente trabalho o pacote de propriedades usado, UNIQUAC, foi escolhido de acordo com o modelo termodinâmico usado no artigo base. 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 previsão das propriedades físicas de espécies químicas, tendo que 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. A inexistência e/ou inadequação de propriedades físicas podem diminuir a precisão do modelo ou mesmo impedir a execução da simulação.

Para determinar o valor de *ESI* da mistura foram aplicadas a [equação 3](#) e [equação 4](#) e os valores de *K* foram obtidos a partir dos dados de simulação em HYSYS da corrente de alimentação denominada por “F”, obtendo para a mistura um *ESI* de 0.9.

Os diagramas de curvas de resíduo, apresentados na [figura 7](#), obtidos através da função “Property Analysis” do *software* Aspen Plus, permitem uma análise preliminar da viabilidade da separação.

De forma complementar foi realizada análise à possibilidade de formação de azeótropos durante a destilação, cujos resultados se apresentam no [anexo 1](#). A 1 atm não se verifica a existência azeótropos para qualquer composição da mistura, no entanto a 3 atm ocorrem 2 azeótropos, um binário e um ternário, os quais determinam à partida a exclusão de alternativas de destilação consoante a composição da alimentação e os produtos pretendidos. Não obstante e atendendo à separação pretendida, verifica-se a possibilidade da sua realização quer através do sistema convencional quer do sistema FTCDC.

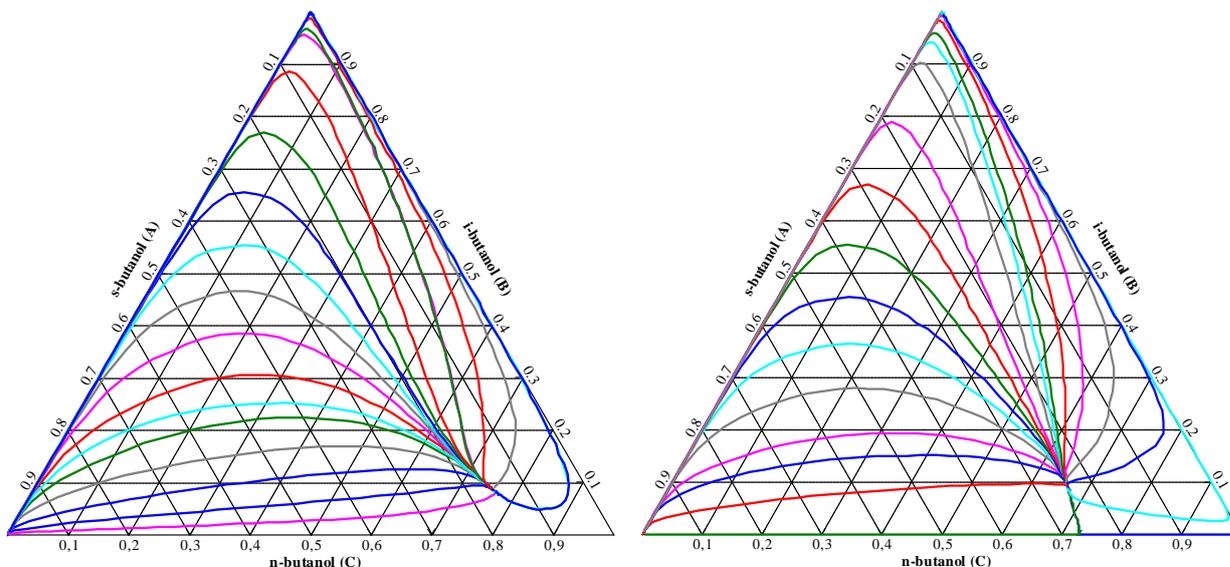


Figura 7 – Diagramas de resíduo da mistura de butanol a 1 atm (esq.) e a 3 atm (dir.)

(Fonte: Aspen Plus)

4.2 IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA TRADICIONAL

A implementação do sistema tradicional, que se encontra devidamente descrita na literatura disponível, segue o procedimento apresentado no [anexo 2](#).

Na [figura 8](#) apresenta-se o *flowsheet* de implementação do sistema tradicional. Os dados estruturais foram obtidos a partir dos resultados de *short-cut design* (usando a operação “Short-Cut Column”) apresentados no [anexo 2](#), considerando a razão de refluxo real igual 1,2 vezes a razão de refluxo mínima calculada em ambas as colunas, procedendo-se à simulação rigorosa do sistema segundo os dados apresentados na [tabela 5](#) e [tabela 6](#).

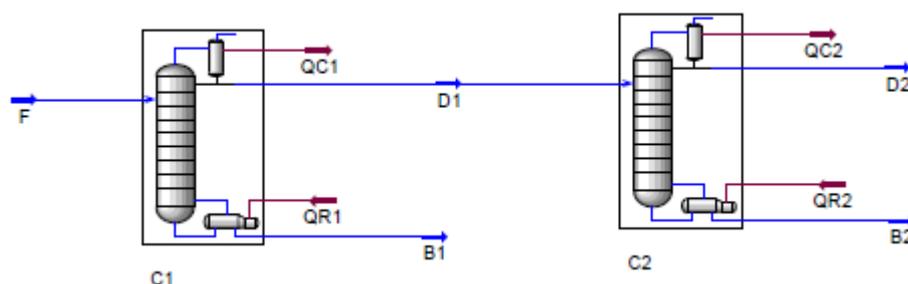


Figura 8 – Flowsheet sistema ST

Tabela 5 – Dados de implementação do sistema ST

Primeira coluna		Segunda coluna	
Número total de pratos, NT_{c1}	43	Número total de pratos, NT_{c2}	50
Posição do prato de alimentação, N_F	23	Posição do prato de alimentação, N_{D1}	26
Pressão de funcionamento, P_{c1} (atm)	1	Pressão de funcionamento, P_{c2} (atm)	1
Perda de carga (atm)	0	Perda de carga (atm)	0
Tipo de condensador	Total	Tipo de condensador	Total

Tabela 6 – Especificações do sistema ST para simulação rigorosa

Primeira coluna		Segunda coluna	
Especificação de recuperação de C em B1	0,980	Especificação de composição de D2 em A, x_{D2}	0,975
Especificação de composição de B1 em C, x_{B1}	0,975	Especificação de composição de B2 em B, x_{B2}	0,950

4.3 IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA FTCDC

A implementação do sistema FTCDC em HYSYS no presente trabalho é feita partir dos dados de *design* estrutural obtidos a partir do artigo previamente mencionado.

Não se encontrando disponível a informação relativa à composição e condições das correntes de interligação recorre-se ao modelo “Column Templates” para implementação inicial do sistema num *subflowsheet* único, o qual, mediante indicação do caudal das mesmas e demais especificações do sistema, calcula automaticamente a informação relativa às correntes de interligação. De notar que os estudos de otimização, simulação dinâmica e controlo não devem ser efetuados através da implementação pelo “Column Templates” uma vez que não possível a introdução de compressores e equipamentos similares, os quais podem ser necessários à operação do sistema.

A informação estrutural de base inclui número total de pratos por coluna, prato de alimentação, pratos de interligação e de extração da corrente de produto lateral. Determinada/conhecida a informação estrutural, atendendo especificações de *design* previamente estabelecidas, (composição, caudal e condições da alimentação; pressão de funcionamento do sistema e especificação de produtos) o procedimento de implementação do sistema FTCDC em HYSYS para simulação rigorosa no presente trabalho segue os seguintes passos:

4.3.1 IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA FTCDC ATRAVÉS DO “COLUMN TEMPLATES”

No *subflowsheet* (ambiente da coluna):

1. Implementação da secção relativa ao prefracionador (usando a operação “Tray Seccion”) atendo aos dados de *design* estrutural, definindo nas propriedades *Design* da operação:
 - 1.1. O número de pratos total em *Parameters*;
 - 1.2. Em *Connections* as correntes de entrada e de saída de topo e fundo e da corrente de alimentação como *Optional Feed* associada ao respetivo prato de alimentação;
 - 1.3. Definição da pressão de funcionamento em *Pressures*;
2. Implementação da secção (“Tray Seccion”) relativa à coluna principal, definindo nas propriedades *Design* da operação, de forma similar à anterior:
 - 2.1. Número de pratos total;
 - 2.2. As correntes de entrada e de saída de topo e fundo;
 - 2.3. As correntes de interligação que constituem a alimentação da coluna principal em *Optional Feed* e definição dos pratos de alimentação;

- 2.4. As correntes de interligação que saem da coluna em *Side Draws*, de acordo com a sua fase (líquida ou de vapor) e definição dos pratos de extração;
- 2.5. A corrente de saída do produto lateral em *Side Draws* e definição do prato de extração;
- 2.6. A pressão de funcionamento;
3. Implementação do ebulidor através da operação “*Reboiler*”, definindo nas suas propriedades de *Design* em *Connections*
 - 3.1. A corrente de energia e a corrente de saída do produto de fundo;
 - 3.2. As correntes de ligação á coluna principal, líquida e de vapor;
4. Implementação do condensador através da operação “*Total Condenser*” definindo nas suas propriedades de *Design* em *Connections*
 - 4.1. A corrente de energia e a corrente de saída do produto de topo
 - 4.2. As correntes de ligação á coluna principal, líquida e de vapor.

No *flowsheet* (ambiente parental):

5. Implementação da corrente de alimentação ao sistema, definição da mesma de acordo com as especificações de *design* (condição térmica, pressão, caudal e composição da alimentação) e associação à corrente de alimentação criada no *subflowsheet* nas propriedades de *Design* da coluna em *Connections*;
6. Definição das ligações externas correspondente às correntes de entrada e saída do sistema previamente definidas no *subflowsheet*, igualmente nas propriedades de *Design* da coluna em *Connection*;
7. Definição das especificações de operação nas propriedades de *Design* em *Specs*: especificação de produtos (fração de componente) e caudais das correntes de saída de interligação;
8. Correr a simulação e verificar convergência (cumprimento das especificações);
9. Obter dados relativos às correntes de interligação.

No estabelecimento das correntes de interligação é necessário ter em atenção a correta escolha da fase em que se encontram, tendo que a corrente que alimenta o topo do prefracionador é extraída da corrente líquida que desce a coluna principal e a corrente que entra na base do prefracionador é extraída da corrente de vapor que sobe a coluna principal. A escolha da fase do produto lateral será à partida facultativa, tendo que no presente trabalho esta é extraída da corrente líquida. As especificações e dados de implementação para simulação rigorosa apresentam-se na [tabela 7](#) e [tabela 8](#), respetivamente¹.

Tabela 7 – Especificações do sistema FTCDC para simulação rigorosa

Coluna Principal	
Especificação de composição de D em A, x_D	0,975
Especificação de composição de SD em B, x_{SD}	0,95
Especificação de composição de B em C, x_B	0,975
Especificação do caudal de L1 (kmol/h)	157
Especificação do caudal de V3 (kmol/h)	204

¹ Para efeitos de dimensionamento foi efetuada a alteração do caudal molar da alimentação em ambos os sistemas para 100kmol/h (10 vezes superior) e de forma equivalente os caudais de interligação no sistema FTCDC para um valor 10 vezes superior aos resultados de *design* reportados no artigo base.

Tabela 8 – Dados de implementação do sistema FTCDC

Prefracionador		Coluna Principal	
Número total de pratos, NT_p	19	Número total de pratos, NT_c	74
Posição do prato de alimentação, N_F	8	Posição do prato de extração L1/ alimentação V1, N_{L1} (interligação superior/ de topo)	15
Pressão de funcionamento, P_p (atm)	1	Posição do prato de extração de SD, N_{SD}	42
Perda de carga (atm)	0	Posição do prato de extração V3/ alimentação L3, N_{V3} (interligação inferior/ de fundo)	66
		Pressão de funcionamento, P_c (atm)	1
		Perda de carga (atm)	0
		Tipo de condensador	Total

Na [tabela 9](#); **Error! No se encuentra el origen de la referencia.** apresentam-se os resultados relativos aos parâmetros de caracterização das correntes de interligação L1 e V3, mediante simulação do sistema através do modelo “Column Templates”, cujo *flowsheet* se apresenta na [figura 9](#).

Tabela 9 – Parâmetros de caraterização das correntes de interligação L1 e V3

	L1	V3
Condição térmica (fração de vapor), q	0	1
Pressão (atm)	1	1
Caudal (kmol/h)	157	204
Composição em A	0,364	5,0e-002
Composição em B	0,635	0,373
Composição em C	7,3e-004	0,578

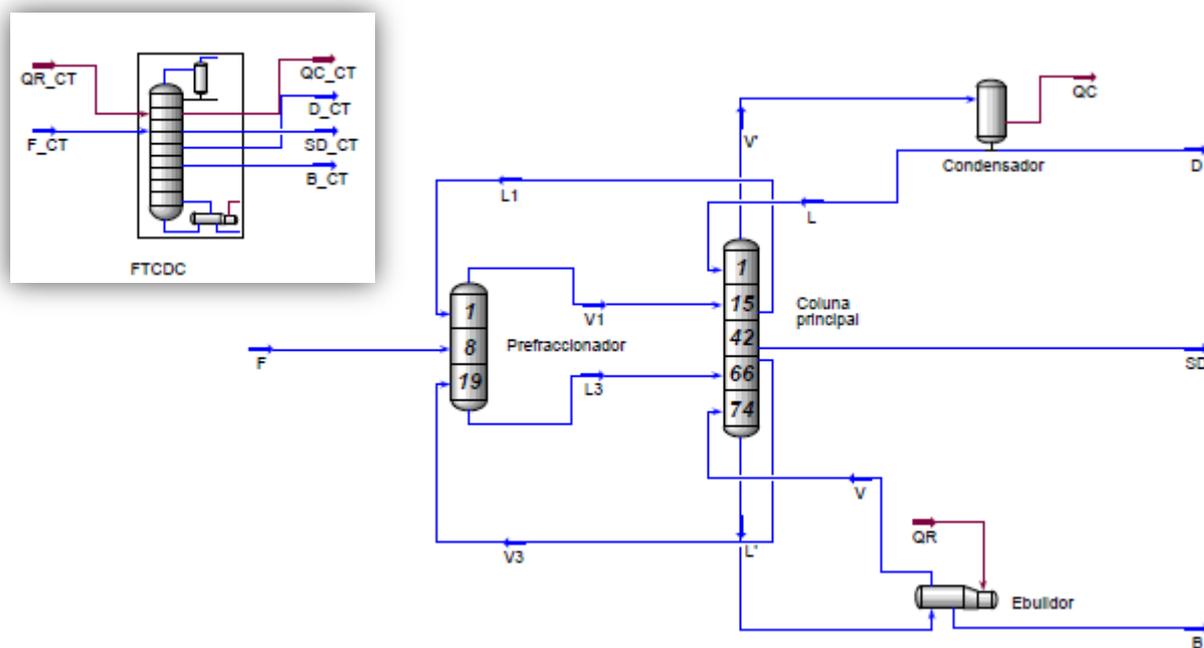


Figura 9 – Flowsheet e subflowsheet do sistema FTCDC através do Column Templates

4.3.2 IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA FTDCDC EM AMBIENTE PARENTAL

1. Implementação da corrente da alimentação e definição da mesma de acordo com as especificações de *design* (condição térmica, pressão, caudal e composição da alimentação);
2. Implementação do prefracionador como uma coluna de absorção através da operação “Absorver” e seguir os passos indicados pela operação de implementação, definindo como propriedades de *Design* da operação relativos a *Connections*:
 - 2.1. O número total de pratos;
 - 2.2. Associação da corrente de alimentação às entradas (*Inlet Streams*) definindo o respetivo prato de alimentação;
 - 2.3. As correntes de entrada de topo e de fundo e das correntes de saída de topo (vapor) e de fundo (liquida);
 - 2.4. A pressão de funcionamento;
3. Definição das propriedades das correntes de entrada no topo e base do prefracionador de acordo com a informação obtida através simulação do sistema implementado através do “Column Templates”;
4. Correr simulação no prefracionador;
5. Implementação da coluna principal através da operação “Distillation Column” seguindo os passos indicados pela operação de implementação, definindo como propriedades de *Design* da operação relativos a *Connections*:
 - 5.1. O tipo de condensador;
 - 5.2. O número de pratos total;
 - 5.3. As correntes de entrada e de saída incluindo as correntes de energia e definir a posição (número de prato) das correntes de alimentação e extração lateral, definindo igualmente a fase das correntes de extração lateral;
 - 5.4. O valor da pressão de funcionamento do condensador e ebulidor;
 - 5.5. Em *Specs*, nas propriedades de *Design* da operação, define-se das especificações de operação: especificação de produtos (fração de componente) e caudais das correntes de saída de interligação;
6. A ciclização do sistema é fechada através da operação “Recycle” de forma a inicializar os ciclos do sistema;
7. Correr simulação e verificar convergência.

Os dados necessários à implementação do *flowsheet* apresentado na [figura 10](#) são os indicados nas tabelas [tabela 7](#), [tabela 8](#) e [;Error! No se encuentra el origen de la referencia.](#)

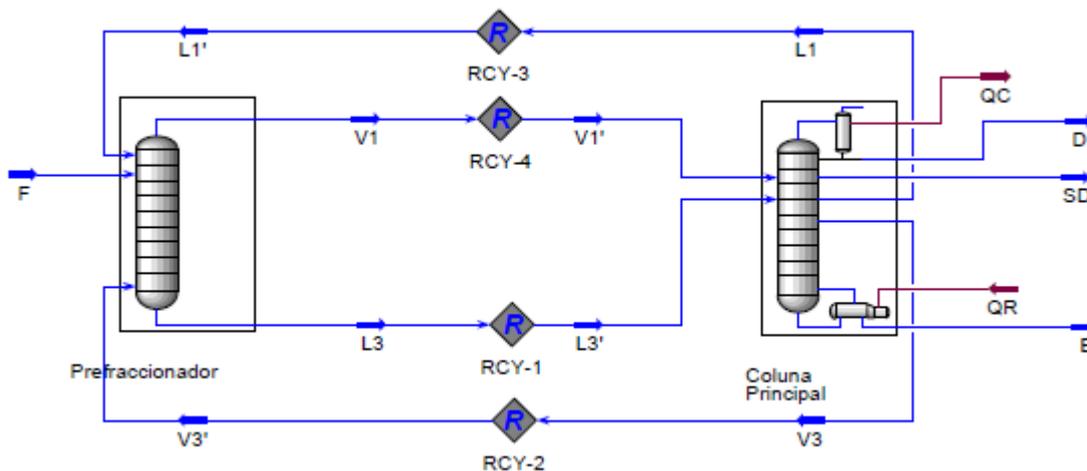


Figura 10 – Flowsheet do sistema FTCDC

4.4 COMPARAÇÃO ENTRE OS SISTEMAS

Em termos de resultados relativos aos consumos energéticos para a separação em estudo, numa análise preliminar, possuindo ambos os sistemas o mesmo número total de pratos, verifica-se que o sistema tradicional é o sistema mais favorável (tabela 10), apresentando cerca de metade do consumo relativamente ao sistema FTCDC.

Tabela 10 – Resumo dos resultados de implementação dos sistemas ST e sistema FTCDC

Sistema ST		Sistema FTCDC	
NT_{c1}	43	NT_c	74
NT_{c2}	50	NT_p	19
rR_{c1}	2,976	rR_c	33,92
rB_{c1}	7,610	rB_c	32,77
rR_{c2}	6,471		
rB_{c2}	7,215		
QC_{c1} (kJ/h)	1,10E+07	QC_c (kJ/h)	4,64E+07
QR_{c1} (kJ/h)	1,10E+07	QR_c (kJ/h)	4,82E+07
QC_{c2} (kJ/h)	1,01E+07		
QR_{c2} (kJ/h)	1,01E+07		
NT_{ST}	93	NT_{FTCDC}	93
QT_{ST} (kJ/h)	4,22E+07	QT_{FTCDC} (kJ/h)	9,46E+07

Relativamente à simulação do sistema FTCDC, a complexidade do seu *design*, comparativamente com o sistema tradicional, a qual está associada às correntes de interligação entre as duas colunas que o compõem, reflete-se igualmente no seu procedimento de implementação e também na convergência das operações implementadas, quer na sua inicialização ou cada vez que se alteram as condições de operação, parametrização e/ou especificações.

No capítulo seguinte apresenta-se os procedimentos de otimização de ambos os sistemas e respetivos resultados, procedendo-se a análise sobre o que implica a otimização de cada um dos sistemas e procedendo a uma avaliação mais precisa dos mesmos.

5 OTIMIZAÇÃO

A otimização de um processo industrial usualmente significa o incremento da rentabilidade mantendo a segurança do processo e qualidade do produto. Os critérios de otimização variam com o processo e a tendência global é para o aumento da sua rentabilidade. Podemos distinguir globalmente duas vertentes principais de otimização:

- Otimização de *design*: associada à otimização estrutural e determinação das condições ótimas de operação associadas ao *design* estrutural;
- Otimização de operação: associada ao *design* do controlo de otimização e consequente ajuste das condições de operação em tempo real que permitam cumprir, para além dos objetivos de controlo regulatório e de qualidade, objetivos relacionados com consumos energéticos e custos associados.

Os problemas de *design* estão sempre subespecificados sendo recomendadas decisões de engenharia fundamentadas por estudos de otimização ou heurísticas. Os modelos de estado estacionário podem ser usados na execução de balanços de massa e energia em estado estacionário, sendo a simulação em estado estacionário útil na otimização energética e de custos dos processos [7].

Genericamente num problema de otimização atende-se a:

- Variáveis especificadas;
- Graus de liberdade do sistema: possíveis variáveis de otimização;
- Impacto de cada variável sobre o objetivo de otimização: definição dos parâmetros de custo diretamente associados a estas variáveis;
- Interação entre as variáveis consideradas e efeitos sobre os objetivos de otimização.

Na [figura 11](#) apresentam-se os principais passos considerados na otimização do *design* de um processo.



Figura 11 – Principais passos de otimização de processos

Na otimização de um sistema de destilação é necessário estabelecer um *trade-off* entre a minimização do consumo de energia e dos custos de operação/utilidades com o custo capital. Os custos de operação podem ser primariamente determinados pelos custos energéticos. Tal é aproximadamente verdadeiro para os custos de capital uma vez que a quantidade de vapor determina o diâmetro das colunas [59].

Mediante o tipo de otimização a considerar, numa fase preliminar de *design*, diferentes variáveis se encontram em avaliação, as quais genericamente incluem:

1. Em otimização energética
 - a. Consumos no ebulidor e condensador;
 - b. Consumos associados a equipamentos auxiliares (por exemplo: bombas e compressores).
2. Em otimização dos custos, a qual para além dos custos de operação e de utilidades, normalmente associados aos consumos energéticos, inclui os custos de capital, cujas principais variáveis dizem respeito a:
 - a. Altura das colunas (número de pratos);
 - b. Diâmetro das colunas;
 - c. Dimensões do ebulidor e condensador (normalmente permutadores de calor);
 - d. Número e dimensões dos equipamentos auxiliares.

5.1 OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA TRADICIONAL

Na otimização de colunas convencionais normalmente o problema recai sobre a determinação da razão de refluxo ótima. Muitas combinações entre o número de pratos e o refluxo podem ser encontradas para alcançar uma dada separação.

O melhor valor de refluxo e o correspondente número de pratos resulta do compromisso correspondente ao balanço entre custos de investimento elevados associados a um largo número de pratos (à medida que a razão de refluxo se aproxima do seu valor mínimo) e os elevados custos operatórios (consumo de energia) e de investimento (diâmetro da coluna e dos equipamentos de permuta de calor) para um elevado valor da razão de refluxo (à medida que o número de pratos se aproxima do seu mínimo) [9].

Quando as especificações de pureza dos produtos ou restrições não fixam a composição do produto existe nova oportunidade de otimização, normalmente relacionada com a fração de recuperação ótima [9].

Para as colunas convencionais, considerando como especificações do processo o caudal e a composição da alimentação, e as composições dos produtos, as principais variáveis a considerar na otimização do *design* estrutural são a posição da alimentação e o número de pratos total da coluna, e de operação a condição térmica/ temperatura da alimentação e a pressão de funcionamento da coluna, sendo também

frequente a avaliação da perda de carga na coluna (manipulável mediante a escolha de determinado tipo de enchimento), a qual, no entanto, não é no presente trabalho considerada para efeitos otimização.

Relativamente às variáveis estruturais das colunas:

- A posição do prato de alimentação (N_F) de uma dada coluna com determinado número de pratos (NT) define a dimensão das secções de esgotamento e retificação. A sua localização é essencialmente regida pela posição que conduza à menor ineficiência termodinâmica resultante da mistura da corrente de alimentação com as correntes internas das colunas. A otimização desta variável segundo a avaliação de consumo energético conduz igualmente à otimização dos custos.
- A otimização da altura da coluna (número de pratos total), realizada após a otimização da localização da alimentação, considera-se independente desta desde que se mantenha a posição relativa do prato de alimentação, o que se traduz na igual variação do número total de pratos associado a cada secção. A otimização da altura das colunas atende ao compromisso entre minimização dos consumos energéticos (custo das utilidades/operação) e minimização dos custos de capital (dimensão das colunas: altura *versus* diâmetro, dimensão dos equipamentos auxiliares):
 - Menores razões de refluxo, que conduzem a menores consumos energéticos e menores caudais de vapor (menor área de permuta e menor diâmetro das colunas), implicam maior número de pratos, tendo que de acordo com as heurísticas de destilação, determinada a razão de refluxo mínima, deve-se considerar como razão de refluxo real 1,2 vezes o valor da razão de refluxo mínima, podendo este valor acrescer até 1,5 na situação de separações difíceis [2].

No que diz respeito à otimização das condições de operação, considerando que pode ser realizada de forma independente das variáveis estruturais:

- Relativamente à condição térmica/ temperatura da alimentação, esta determina a diferença dos caudais de vapor e líquido nas secções de retificação e esgotamento da coluna [9] o que se reflete nos caudais internos da coluna. O aumento da fração de vapor da alimentação resulta no aumento da razão de refluxo e na diminuição da razão de ebulição, alterando-se os consumos energéticos associados ao ebulidor e condensador, os custos operatórios e de utilidades associados bem como o diâmetro da coluna e as dimensões do ebulidor e condensador, associados aos custos de capital. 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.
- A pressão de funcionamento é normalmente ajustada para que utilidades menos dispendiosas possam ser utilizadas no aquecimento ou arrefecimento [9], tendo que o aumento da pressão, com consequente aumento do ponto de ebulição/condensação das correntes, implica aumento do consumo de energia no ebulidor mas reduz o consumo no condensador. Está ainda relacionada ainda com a eficiência da coluna, sendo espectável que o aumento da pressão, que conduz ao aumento da temperatura de ebulição e por sua vez à diminuição da viscosidade da mistura, conduza ao aumento da eficiência da coluna [9]. Em destilação multicomponente o devido ajuste da pressão permite adicionalmente a eliminação/redução da

necessidade de equipamentos de ajuste de pressão das correntes de produto que alimentam colunas a jusante.

Considerando a ausência de interações entre as variáveis consideradas, recorreu-se ao seguinte procedimento de otimização para o sistema tradicional, baseado na avaliação paramétrica, apresentado na [figura 8](#).

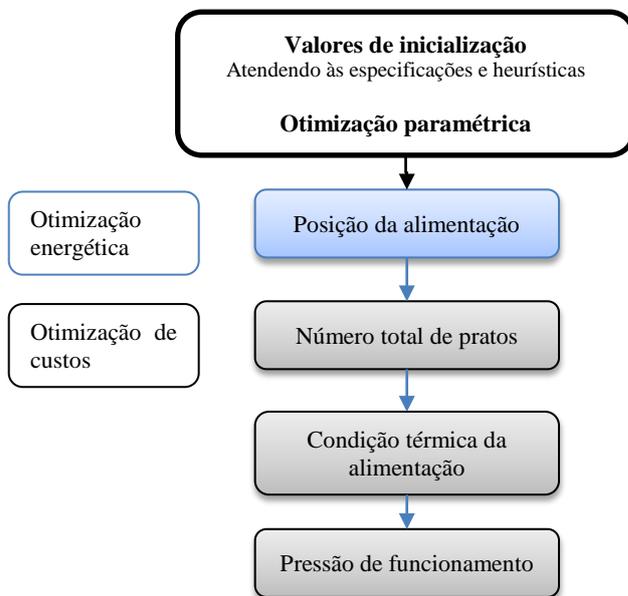


Figura 12 – Procedimento de otimização do sistema ST

Em destilação multicomponente, no uso de sistemas complexos e/ou de métodos avançados de destilação o problema de otimização torna-se mais complexo.

Procedendo à destilação de misturas multicomponentes através de colunas de convencionais, o resultado geral é de que $n-1$ colunas convencionais são suficientes para a separação de uma mistura de n componentes, não azeotrópicas, nas suas correntes quase puras e podendo ser usadas mais colunas, o que por vezes pode-se revelar mais económico[9]. Com o uso de múltiplas colunas, ao problema de otimização acresce as possíveis sequências de destilação, sendo de notar que com o aumento do número de componentes o número de sequências de colunas convencionais aumenta drasticamente.

Uma das abordagens para a determinação da sequência mais favorável é o *design* e otimização de todas as sequências possíveis, o que se pode revelar como uma alternativa trabalhosa e demorada.

Um método aproximado e mais rápido para misturas não azeotrópicas envolve o uso parcial de heurísticas em combinação com algumas estimativas de design para encontrar a(s) sequência(s) com um baixo valor de caudal de vapor total, no entanto o uso do mesmo apenas se revelará viável para situações específicas [9], sendo este o critério aplicado no presente estudo, tendo sido a escolha da melhor sequência efetuada na fase de implementação, após avaliação dos resultados obtidos através do *short-cut* design para as duas possíveis sequências de colunas convencionais.

5.1.1 AVALIAÇÃO PARAMÉTRICA

O objetivo de otimização no presente trabalho consiste na minimização do custo total associado.

Atendendo ao procedimento de otimização adotado, a variável de resposta nos passos que devem ser baseados na otimização de custos é o custo total, resultado da soma dos custos capital, de operação e utilidades. Estes custos são obtidos por avaliação económica do sistema através do *software* de avaliação económica “Economic Evaluation” da Aspen, o qual se encontra integrado no HYSYS.

Atendendo a que os objetivos dos estudos de otimização realizados assentam sobre a avaliação dos métodos de otimização adotados e comparação entre os resultados obtidos para o sistema tradicional, é mantida parametrização de origem do *software* para o cálculo dos custos.

Dimensionamento

Antes de proceder á avaliação económica do sistema é necessário o dimensionamento das colunas do sistema em estudo, sendo este efetuado através da utilidade “Tray Sizing”.

Mantendo a parametrização de origem, e escolhendo como tipo enchimento pratos perfurados (*sieve*), é introduzida a perda de carga associada a cada secção considerada no sistema, alterando os perfis de pressão de ambas as colunas o que implica nesta fase o ajuste da pressão de funcionamento das colunas e/ou introdução de equipamentos auxiliares de ajuste da pressão.

Assim, atendendo aos possíveis acréscimos de custo capital introduzidos pela introdução de equipamentos auxiliares, foram implementadas as seguintes alterações:

1. Mudança da pressão de topo da primeira coluna para 2 atm, de forma a não ser necessária a introdução de uma bomba para aumento da pressão da corrente de alimentação à segunda coluna;
2. Ajuste automático² da pressão de alimentação à pressão registada na base da coluna através de operação lógica “SET”, conforme se apresenta na [figura 13](#) respeitante *flowsheet* implementado, assegurando desta forma que a pressão de alimentação a cada coluna não é inferior à pressão no prato de alimentação, a qual é variável nos estudos a efetuar.

² A forma como é feito o ajuste automático constitui uma simplificação ao processo de simulação considerando que a diferença de pressão entre a corrente e o prato de alimentação não afeta de forma significativa os resultados obtidos, atendendo a que não possível estabelecer este ajuste de forma automática à posição de alimentação da coluna, nomeadamente porque a mesma constitui um parâmetro de otimização sendo feita a sua variação.

Ainda que no presente sistema em estudo o ajuste manual das pressões não constituísse um aumento significativo da complexidade do processo de simulação atendendo simplicidade do procedimento de otimização o mesmo não se verifica para o sistema FTCDC, cujo procedimento de otimização e processo de simulação é mais complexo relativamente ao sistema tradicional.

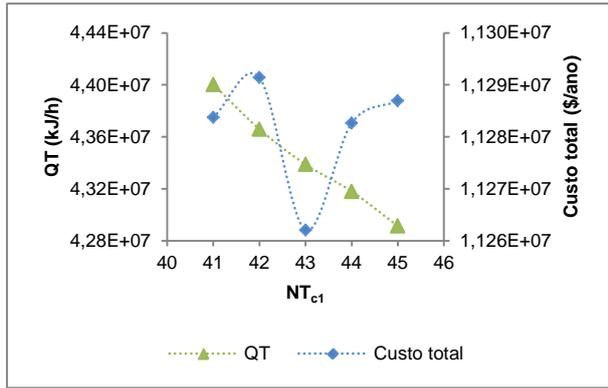


Figura 16 – Consumo de energia e custo total em função do número de pratos total da coluna 1

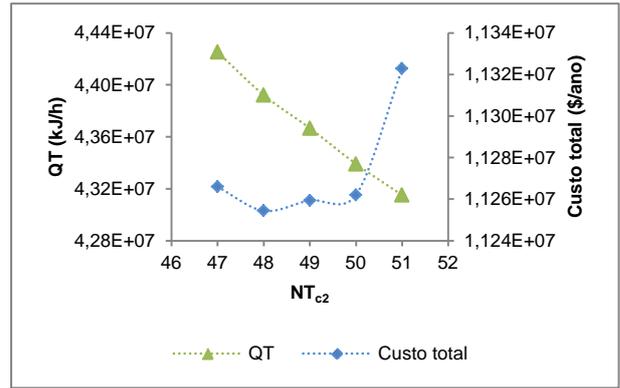


Figura 17 – Consumo de energia e custo total em função do número de pratos total da coluna 2

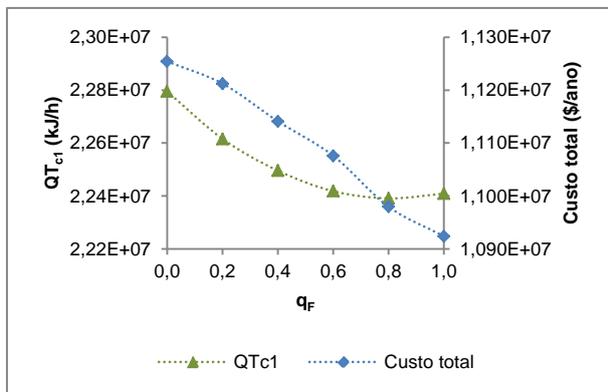


Figura 18 – Consumo de energia na coluna 1 e custo total em função da condição térmica da alimentação à coluna 1

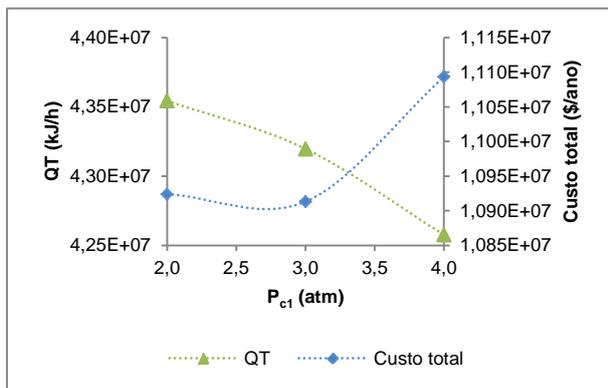


Figura 19 – Consumo de energia e custo total em função da pressão de topo da coluna 1

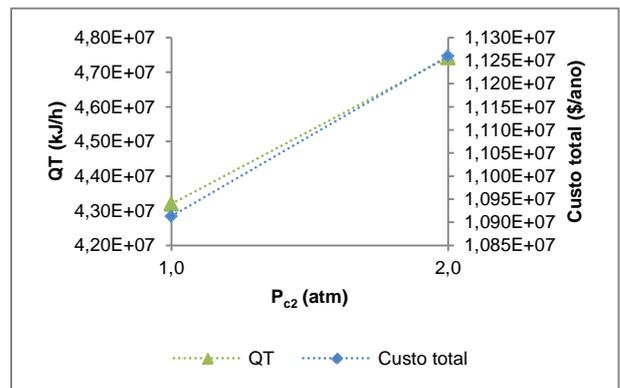


Figura 20 – Consumo de energia e custo total em função da pressão de topo da coluna 2

Os estudos acima apresentados, relativos ao número total de pratos nas colunas (figura 16 e figura 17), à condição térmica da alimentação (figura 18) e à pressão de operação de ambas as colunas (figura 19 e figura 20), refletem a avaliação dos parâmetros relativamente ao consumo de energia bem como relativamente aos custos associados verificando-se o mencionado *trade-off* entre o consumo energético e custos associados na maioria dos parâmetros avaliados.

Observação ao funcionamento da ferramenta de avaliação económica “Economic Evaluation”: verifica-se na utilização desta ferramenta sobre o mesmo ficheiro como mesmo *flowsheet* e os mesmos dados em alturas distintas a ocorrência de resultados distintos, sobretudo relativamente à avaliação do custo capital, um dos resultados incluídos no custo total, cujo valor varia significativamente relativamente aos restantes, tendo que nas avaliações efetuadas durante este estudo se verificaram variações na casa dos 0,1M\$ o que pode conduzir a avaliações erróneas quando a amplitude de variação considerada para decisão é da mesma ordem³.

5.2 OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA FTCDC

Nos sistemas de convencionais, definida a alimentação e especificada a qualidade dos produtos, têm-se um número comparativamente reduzido de variáveis a considerar na sua otimização, as quais podem ser otimizadas segundo uma simples e independente variação paramétrica. No sistema FTCDC o número de variáveis a otimizar acresce e adicionalmente, é necessário atender às interações entre as diferentes variáveis.

Historicamente, um dos parâmetros cedo considerados na separação de misturas ternárias através do sistema FTCDC, no âmbito de otimização, foi fator de recuperação do componente intermediário no topo do prefracionador (β), podendo ser definido por segundo a [equação 5](#).

$$\beta = \frac{V1y_{B,V1} - L1x_{B,L1}}{Fx_{B,F}} \quad \text{Equação 5}$$

Com:

- $V1$ -caudal molar da corrente de interligação que sai no topo do prefracionador;
- $L1$ -caudal molar da corrente de interligação que entra no topo do prefracionador;
- F – caudal molar da alimentação;
- $x_{B,i}, y_{B,i}$ – fração molar do componente intermediário B na corrente i , com $i = L1, V1$ e F .

Fidkowski e Krolikowski introduzem conceito separação preferencial [36], baseado em β , verificada a existência de uma região de recuperação de componente intermediário no topo do prefracionador para o qual o uso mínimo de energia é constante. Christiansen e Skogestad demonstraram mais tarde que para separações *sharp* de misturas ideais a separação preferencial conduz ao caudal mínimo de vapor (V_{\min}) global, bem como que em operações práticas poderá existir uma larga região de separações no prefracionador para a qual o V_{\min} se mantém constante [60].

Considerando, de forma simplificada, que a separação no prefracionador é dependente das condições e composição das correntes de interligação que alimentam o prefracionador e que existe uma região de separação ótima do componente intermediário no prefracionador, podemos deduzir que existirá uma relação

³ A referida variação não se verifica quando as simulações das diferentes condições são feitas sem reinicialização da avaliação. Verifica-se ainda que apesar da alteração dos valores absolutos, o tipo de variação e resultados finais relativos às condições ótimas para o mesmo estudo realizado em alturas distintas é coincidente, conforme se pode verificar através dos resultados apresentados no [anexo 3](#).

ótima entre os caudais de interligação, sendo estes variáveis de otimização. Esta relação entre os caudais de interligação é evidenciada pelos estudos apresentados por Gutiérrez-Antonio et al. [61]. Relacionando o consumo de energia com o valor absoluto dos caudais molares das correntes de interligação que alimentam o prefracionador, é demonstrado que existe uma relação ótima entre os caudais destas correntes. Demonstram ainda que esta relação depende da ordem de grandeza dos caudais e que sem a devida análise dos possíveis valores de caudais para as correntes de interligação é possível que se encontre um ótimo local ao invés do ótimo global.

Outros estudos têm sido desenvolvidos que atendem à partição de vapor e líquido nos pratos de interligação entre as colunas, e não aos caudais efetivos nos sistemas [41], [60], [62], [63]. Hernández e Jiménez demonstraram a possível existência de uma relação entre a razão de partição ótima do vapor e o ESI das misturas que se pretendem separar [62]. Não obstante, o uso deste tipo de especificações requer a implementação da coluna principal de forma seccionada, em três secções distintas, cujo procedimento de implementação não foi adotado no presente trabalho.

A otimização do sistema FTCDC é normalmente conduzida sobre os valores de refluxo ou dos caudais das correntes de interligação. O *design* estrutural, nomeadamente o número de pratos das colunas e posições dos pratos de alimentação e extração, pode também ser passível de ajustes. A necessidade destes ajustes pode ser atribuída, entre outros, ao uso de pressupostos como transbordo molar constante e volatilidades relativas constantes, condições implicitamente usadas no método *short-cut de FUGK*, no design preliminar do sistema. Para além disso, a divisão dos sistemas termicamente acoplados em três colunas convencionais⁴ afeta o *design* preliminar. As correções aos valores de refluxo e caudais de interligação são facilmente implementados, como demonstrado no trabalho desenvolvido por Hernández e Jiménez [62]. Em contraste, a correção do número de pratos não é tão directa uma vez que esta tarefa normalmente envolve variáveis discretas. Sobre estas condições, a correção do número de pratos é normalmente levada a cabo através de repetidas simulações quando usados simuladores comerciais [43].

De acordo com estudo reportado por Kim [42] sobre a eficiência termodinâmica do sistema FTCDC, verifica-se que para misturas que não sejam muito ricas no componente intermediário a altura do prefracionador, bem como a posição da alimentação, têm uma importância significativa na redução da razão de refluxo devido à maior influência da mistura no prato de alimentação na eficiência termodinâmica do sistema do que a remistura do componente intermediário. Para misturas ricas em componente intermediário o mesmo não ocorre, tendo que o aumento do número de pratos no prefracionador praticamente não se reflete na diminuição da razão de refluxo, uma vez que não se observa diferença entre a composição da alimentação e a composição no prato de alimentação. Em sistemas cuja composição da alimentação em componente intermedio é menor relativamente ao produto lateral o número de pratos do prefracionador é menor do que o da secção intermédia da coluna principal (definida pelas posições de extração/alimentação das correntes de interligação) [42].

⁴ Uma das colunas convencionais corresponde ao prefracionador e as outras duas colunas equivalem à secção acima e abaixo do prato de extração da corrente de produto lateral da coluna principal.

Assim, para uma dada separação de uma mistura ternária, definindo como especificações do processo o caudal e a composição da alimentação e as composições dos produtos, para efeitos de otimização são consideradas oito variáveis, duas de operação, respeitantes aos caudais das correntes de interligação das colunas ou a razão de separação das correntes de vapor e de líquido e seis estruturais, relacionadas com o número de pratos do prefracionador e coluna principal e com a posição do prato de alimentação ao prefracionador, de extração/alimentação das correntes de interligação da coluna principal e de extração da corrente de produto lateral. Adicionalmente, e à semelhança do sistema tradicional, consideram-se igualmente como variáveis de otimização a pressão de operação do sistema e a condição térmica da alimentação ao prefracionador.

Atendendo aos estudos previamente analisados, na otimização do *design* deste tipo de sistemas é necessária a determinação da combinação mais favorável entre as variáveis dada a interação entre as mesmas, pelo que a realização de uma otimização paramétrica de forma independente não é adequada para o objetivo pretendido.

Para processos que envolvem um largo número de variáveis, como é o presente caso é frequente a aplicação de técnicas de *design* fatorial ou variantes do mesmo, de forma a determinar as possíveis interações entre as variáveis, quais as mais significativas e qual a melhor combinação entre as mesmas.

Estendendo o conceito de experimentação à simulação de processos, na otimização do sistema FTCDC são aplicadas técnicas de *design* fatorial, recorrendo a métodos estatísticos para análise dos resultados obtidos, sendo seguido o procedimento apresentado na [figura 21](#).

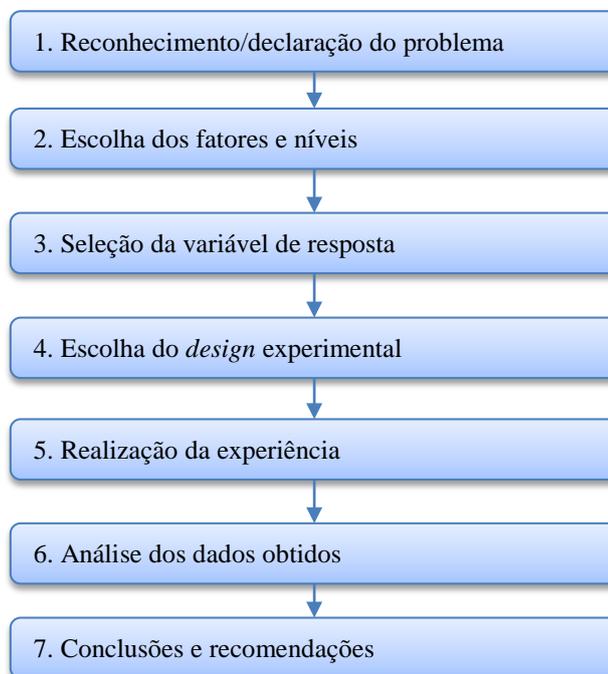


Figura 21 – Procedimento de desenho de uma experiência

A experimentação fatorial envolve a experimentação de todas as combinações possíveis dos níveis dos fatores em análise. Alguns tipos de *designs* fatoriais são muito úteis no desenvolvimento e otimização de

processos como é o caso do Design Fatorial 2^k , ou seja, *design* com k fatores a experimentar em dois níveis distintos [64]. Neste tipo de *design*, à medida que o número de fatores aumenta, o número de simulações necessárias aumenta rapidamente, pelo que quando estamos perante processos com um número elevado de fatores é útil a aplicação do Design Fatorial Fracionado 2^{k-p} , a qual resulta na redução do número de combinações a simular para a fração $\frac{1}{2^p}$ do número total de combinações possíveis, sendo necessário desta forma um menor número de simulações.

5.2.1 OTIMIZAÇÃO ATRAVÉS DE TÉCNICAS DE DESIGN FATORIAL

Os objetivos do presente estudo são os mesmos que os enunciados anteriormente no ponto [5.1.1](#).

A parametrização de origem do *software* para o cálculo dos custos é igualmente mantida.

Dimensionamento

Similarmente ao efetuado no sistema tradicional, o dimensionamento das colunas do sistema FTCDC, foi efetuada através do *Tray Sizing*, mantendo a parametrização de origem. Com a introdução da perda de carga associada a cada secção considerada no sistema os perfis de pressão de ambas as colunas alteram-se sendo necessário nesta fase o ajuste da pressão de funcionamento das colunas e/ou introdução de equipamentos auxiliares de ajuste da pressão.

No sistema FTCDC é necessário ter em especial atenção os fluxos de vapor que interligam as colunas, uma vez que para aumentar a pressão deste tipo de correntes o tipo de equipamento a usar, como é o caso dos compressores, constituem significativos acréscimos no custo capital bem como nos custos de operação e utilidades. Assim, de forma possibilitar o fluxo de vapor entre as colunas do sistema sem necessitar a introdução de equipamentos de compressão, e atendendo a que existem perdas de cargas adicionais a considerar, como a de introdução de válvulas para manipulação de caudais, entre outras, foram efetuadas as seguintes alterações:

1. Uso de diferentes enchimentos para as colunas do sistema, para que a perda de carga associada à secção intermédia da coluna principal suplante a perda de carga no prefracionador.
 - a) Para o prefracionador selecionou-se como tipo de enchimento pratos de válvulas (“*valve*”), os quais normalmente tem associada uma baixa perda de carga;
 - b) Para a coluna principal selecionou-se como tipo de enchimento pratos de campânulas (“*bubble cap*”), cuja perda de carga associada é relativamente elevada.
 - c) Introdução de uma diferença de pressão entre o topo do prefracionador e o topo da coluna principal de 0,250 atm, estabelecendo como pressão de topo da coluna principal 2 atm e do prefracionador 2,250 atm, de forma que a pressão da corrente de interligação de vapor que alimenta a coluna principal seja superior á pressão verificada no respetivo prato de alimentação;

2. Foi estabelecido através da operação lógica “SET” o ajuste automático² das pressões das correntes de interligação líquidas que alimentam o topo do prefracionador e a coluna principal à pressão do respetivo prato de alimentação bem como da alimentação ao prefracionador (corrente F) à pressão registada na base do mesmo, conforme se apresenta na [figura 22](#), respeitante *flowsheet* implementado.

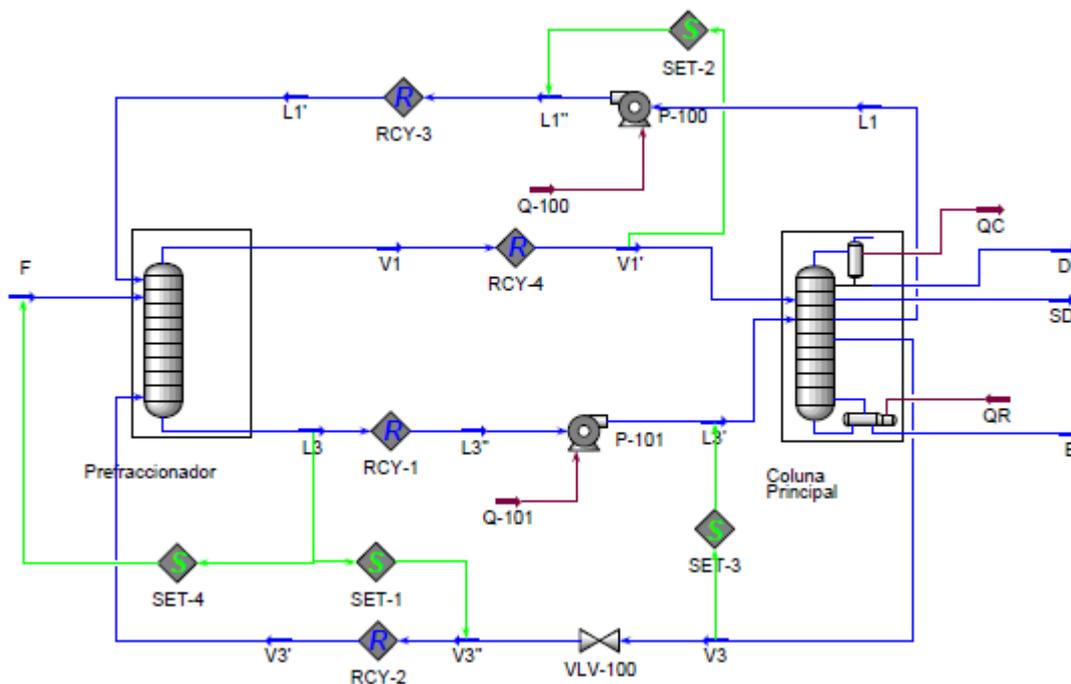


Figura 22 – Flowsheet do sistema FTCDC dimensionado

Tabela 12 – Parâmetros estruturais e pressão de operação do sistema FTCDC

Prefracionador		Coluna principal	
NT _P	19	NT _C	74
NF	8	N _{L1}	15
P _P (atm)	2,25	N _{SD}	42
Tipo de Enchimento	Valve (prato de válvulas)	N _{V3}	66
Seccionamento uniforme		P _C (atm)	2
		Tipo de Enchimento	Buble cap (prato de campânulas)
		Seccionamento não uniforme	

5.2.1.1 AVALIAÇÃO DA VARIAÇÃO DOS CAUDAIS DE INTERLIGAÇÃO

Atendendo a resultados previamente reportados, os quais indicam a existência de múltiplos ótimos locais para os caudais das correntes de interligação, e aos estudos preliminares realizados com base no consumo energético (ver [anexo 4](#)), antes de proceder à otimização do sistema com base em técnicas de *design* fatorial, foi efetuada a avaliação de custos paramétrica relativa aos caudais para a estrutura base do sistema em estudo.

Mantendo o valor de V3 fixo no valor do caso base 204 kmol/h, fez-se inicialmente a variação de L1, verificando-se a existência de um valor ótimo global para L1 que minimiza o custo (figura 23). O gráfico de superfície apresentado na figura 24, obtido a partir da variação de V3 entre 210 e 300 kmol/h para L1 igual ao resultado da diferença V3-L1 para os valores de 30, 40 e 50 kmol/h (atendendo aos resultados apresentado na figura 23). Para os diferentes valores de V3 simulados, o valor de L1 que conduz aos menores custos corresponde ao valor cuja diferença V3-L1 é de 40 kmol/h, verificando-se a existência de uma relação entre os caudais de interligação L1 e V3 que sistematicamente conduz a menores custos totais.

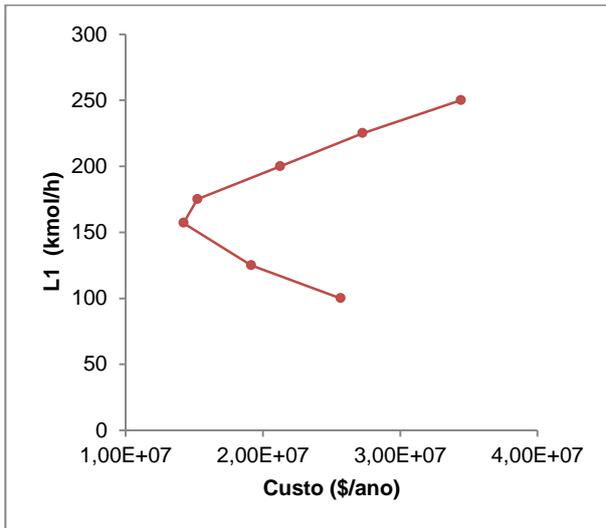


Figura 23 – Impacto de L1 no custo total do sistema, para V3 constante

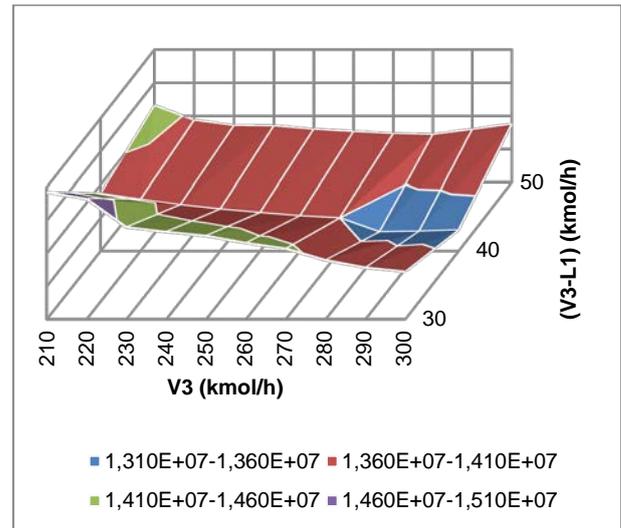


Figura 24 – Impacto de V3 e da relação entre V3 e L1 no custo total do sistema

A diminuição dos custos totais está intrinsecamente relacionada com a diminuição do consumo energético resultante da diminuição das razões de ebulição e refluxo (com reflexo direto nos caudais internos na coluna principal), apesar do aumento dos caudais internos no prefracionador (figura 25 e figura 26).

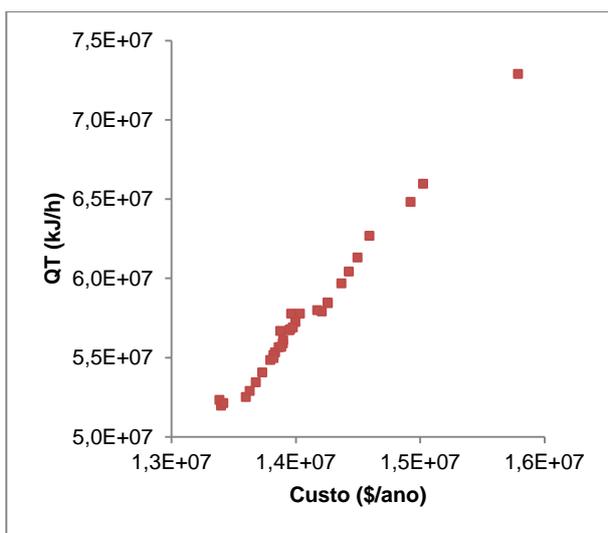


Figura 25 – Relação entre a variação do consumo total de energia e os custos totais do sistema

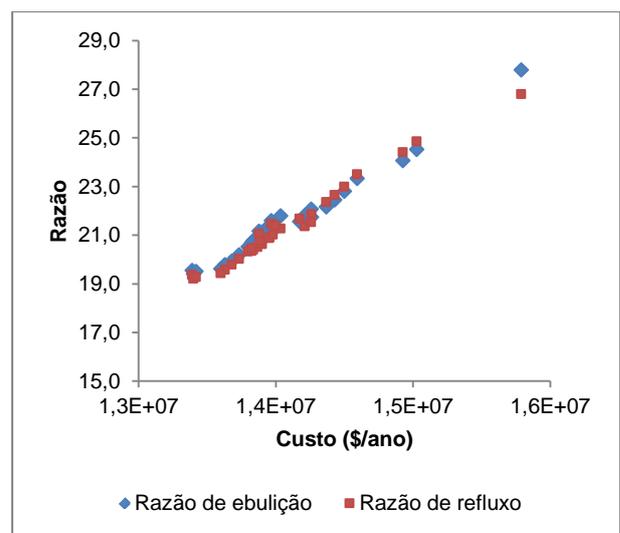


Figura 26 – Relação entre a variação das razões de refluxo e ebulição e os custos totais do sistema

Em termos de design, considerando a coluna principal com secções não uniformes, é razoável admitir que para uma determinada estrutura a otimização energética dos caudais de interligação poderá conduzir à otimização dos custos associados ao sistema.

5.2.1.2 DESIGN FATORIAL FRACIONADO – 1º CICLO DE SIMULAÇÕES

Na [tabela 13](#), abaixo apresentada, complementada pela [figura 27](#), são identificadas as variáveis de otimização consideradas, no entanto, a análise da influência da pressão de funcionamento do sistema bem como a condição térmica da alimentação ao prefracionador será realizada de forma paramétrica após otimização estrutural e dos caudais de interligação.

Na otimização da coluna principal, em vez de se considerar a posição dos pratos de extração/alimentação das correntes de interligação são consideradas as secções que os mesmos delimitam, para que a variação imposta para cada uma destas seja equiparável.

Tabela 13 – Variáveis de otimização do sistema FTCDC

Variáveis estruturais	Número de pratos da secção superior da coluna principal	NT_{s1}
	Posição do prato de extração do produto intermédio	N_{SD}
	Número de pratos da secção intermédia da coluna principal	NT_{s2}
	Número de pratos da inferior da coluna principal	NT_{s3}
	Posição do prato de alimentação ao prefracionador	N_F
Variáveis de operação	Número de pratos da secção superior da coluna principal	NT_{s1}
	Caudal da corrente de interligação de topo	$L1$
	Caudal da corrente de interligação de fundo	$V3$
	Pressão de topo da coluna principal	P_c
	Condição térmica da alimentação	q_F

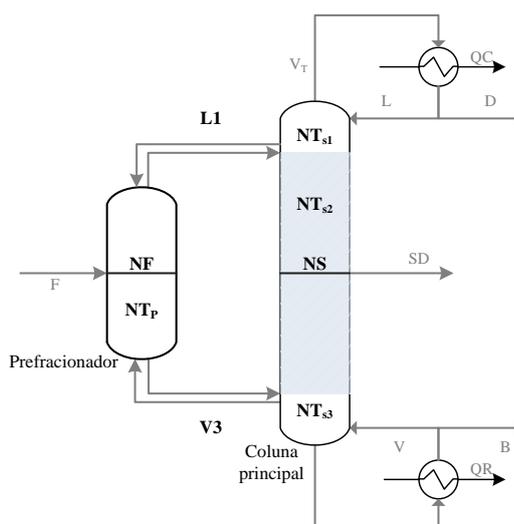


Figura 27 – Representação esquemática das secções do sistema FTCDC e respetivas variáveis de otimização

A escolha do *design* experimental atende a que na otimização fatorial do *design* do sistema FTCDC são consideradas as oito variáveis acima identificadas e a simulação fatorial completa a dois níveis resultaria num ciclo de 256 simulações. Assim, de forma a reduzir o tempo despendido em simulação, numa primeira

etapa o sistema é avaliado através do *design* fatorial a dois níveis fracionado do tipo IV, efetuando-se apenas 1/16 das simulações, reduzindo o seu número por ciclo para 16.

São usados 4 geradores para as variáveis E, F, G e H:

Tabela 14 – Especificação dos geradores

E	BCD
F	ACD
G	ABC
H	ABD

O ciclo de simulações é completo segundo o seguinte esquema:

Tabela 15 – Esquema do 1º ciclo de simulações

Simulação		A	B	C	D	E = BCD	F = ACD	G = ABC	H = ABD
1	(1)	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
2	a	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
3	b	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1
4	ab	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
5	c	-1	-1	1	-1	1	1	1	-1
6	ac	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
7	bc	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1
8	abc	1	1	1	-1	-1	-1	1	-1
9	d	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1
10	ad	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1
11	bd	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1
12	abd	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1
13	cd	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1
14	acd	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1
15	bcd	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1
16	abcd	1	1	1	1	1	1	1	1

Tabela 16 – Designação e níveis das variáveis de otimização do 1º ciclo de simulações

Designação	Variáveis do processo	Designação	Caso base	Nível baixo (-1)	Nível alto (1)
A	N _F	A	8	7	9
B	NT _p	B	19	18	20
C	NT _{s1}	C	15	14	16
D	NT _{s2}	D	51	50	52
E	N _{SD}	E	42	41	43
F	NT _{s3}	F	8	7	9
G	V3 (kmol/h)	G	280	275	285
H	L1 (kmol/h)	H	240	235	245

Os níveis de partida estabelecidos relativamente aos caudais das correntes de interligação

[tabela 16](#)) atendem aos resultados do estudo paramétrico sobre os valores dos caudais das correntes de interligação. A variável de resposta é valor do custo total resultado do soma dos custos capital, de operação e

utilidades, os quais serão obtidos através ferramenta de avaliação económica “Economic Evaluation” integrada no HYSYS.

Tabela 17 – Resultados do 1º ciclo de simulações

Simulação		A	B	C	D	E = BCD	F = ACD	G = ABC	H = ABD	Custo total (\$/ano)
1	(1)	7	18	14	50	41	7	275	235	1,39E+07
2	a	9	18	14	50	41	9	285	245	1,38E+07
3	b	7	20	14	50	43	7	285	245	1,35E+07
4	ab	9	20	14	50	43	9	275	235	1,31E+07
5	c	7	18	16	50	43	9	285	235	1,40E+07
6	ac	9	18	16	50	43	7	275	245	1,45E+07
7	bc	7	20	16	50	41	9	275	245	1,39E+07
8	abc	9	20	16	50	41	7	285	235	1,36E+07
9	d	7	18	14	52	43	9	275	245	1,47E+07
0	ad	9	18	14	52	43	7	285	235	1,41E+07
11	bd	7	20	14	52	41	9	285	235	1,39E+07
12	abd	9	20	14	52	41	7	275	245	1,38E+07
13	cd	7	18	16	52	41	7	285	245	1,39E+07
14	acd	9	18	16	52	41	9	275	235	1,40E+07
15	bcd	7	20	16	52	43	7	275	235	1,33E+07
16	abcd	9	20	16	52	43	9	285	245	1,33E+07

A análise dos resultados segue os seguintes passos:

- Cálculo do efeito sobre o custo total para cada variável e para todas as interações entre as variáveis;
- Análise dos potenciais efeitos confundidos;
- Aplicação da análise de variância (ANOVA) para confirmar as variáveis que afetam significativamente o custo total.

Tabela 18 – Resultados da análise ANOVA ao 1º ciclo de simulações

Fonte de variação	Contraste	Efeito	Efeito	SS	Graus de liberdade (g.l.)	DQM	F ₀
A	-9,41E+05	-1,18E+05	1,18E+05	3,46E+09	1	3,46E+09	8,20
B	-4,42E+06	-5,52E+05	5,52E+05	7,61E+10	1	7,61E+10	180,64
AB	-7,86E+05	-9,83E+04	9,83E+04	2,42E+09	1	2,42E+09	5,73
C	-3,56E+05	-4,46E+04	4,46E+04	4,96E+08	1	4,96E+08	1,18
AC	1,46E+06	1,83E+05	1,83E+05	8,33E+09	1	8,33E+09	19,76
BC	2,64E+04	3,30E+03	3,30E+03	2,72E+06	1	2,72E+06	0,01
ABC	-1,11E+06	-1,38E+05	1,38E+05	4,79E+09	1	4,79E+09	11,37
D	5,99E+05	7,49E+04	7,49E+04	1,40E+09	1	1,40E+09	3,33
AD	-2,35E+05	-2,94E+04	2,94E+04	2,16E+08	1	2,16E+08	0,51
BD	-3,62E+05	-4,52E+04	4,52E+04	5,11E+08	1	5,11E+08	1,21
ABD	1,22E+06	1,52E+05	1,52E+05	5,78E+09	1	5,78E+09	13,72
CD	-3,63E+06	-4,53E+05	4,53E+05	5,14E+10	1	5,14E+10	121,96
ACD	2,35E+05	2,93E+04	2,93E+04	2,15E+08	1	2,15E+08	0,51
BCD	-3,67E+05	-4,59E+04	4,59E+04	5,27E+08	1	5,27E+08	1,25
ABCD	-9,60E+03	-1,20E+03	1,20E+03	3,60E+05	1	3,60E+05	0,00

Fonte de variação	Contraste	Efeito	Efeito	SS	Graus de liberdade (g.l.)	DQM	F ₀
Erro				3,37E+09	8	4,22E+08	
Total				1,56E+11	15		
Teste de F:						INV.F	5,32

As expressões usadas para o cálculo dos parâmetros em análise apresentam-se no [anexo 5](#).

Através da análise da representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos (valor absoluto normalizado) com pontuação padronizada $Z(\alpha)$ apresentada na página seguinte, [figura 28](#), complementado pelo teste de F sobre o desvio quadrático médio (DQM), apresentado na [tabela 18](#), é avaliada a importância dos efeitos e das interações sobre a variável de resposta, determinando quais os principais efeitos e interações, atendendo igualmente à análise dos efeitos confundidos, conforme descrito no [anexo 5](#).

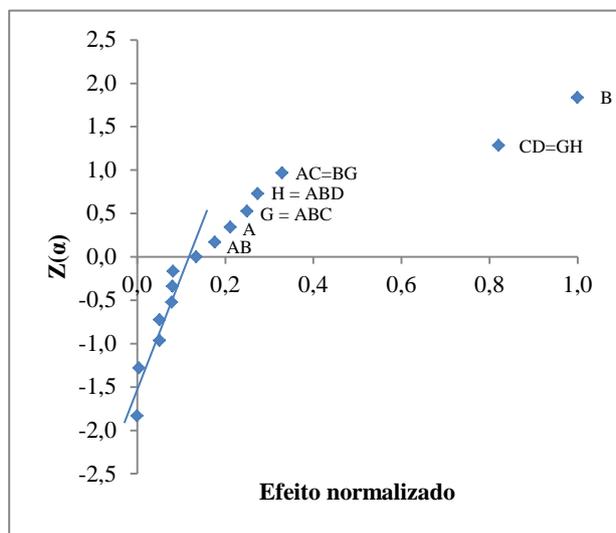


Tabela 19 – Resultados da análise ANOVA ao 1º ciclo de simulações: efeitos e interações principais

Fonte de variação	SS	g.l.	DQM	F ₀
A	3,46E+09	1	3,46E+09	8,20
B	7,61E+10	1	7,61E+10	180,64
AB	2,42E+09	1	2,42E+09	5,73
AC=BG	8,33E+09	1	8,33E+09	19,76
G=ABC	4,79E+09	1	4,79E+09	11,37
H=ABD	5,78E+09	1	5,78E+09	13,72
CD=GH	5,14E+10	1	5,14E+10	121,96
Erro	3,37E+09	8	4,22E+08	
Total	1,59E+11	15		

Figura 28 – Representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos do 1º ciclo de simulações

Como resultado da avaliação efetuada, obtêm-se como principais efeitos (relativos aos fatores):

- A – Posição da alimentação no prefracionador
- B – Número de pratos do prefracionador
- G – Caudal da interligação do fundo
- H – Caudal da interligação do topo

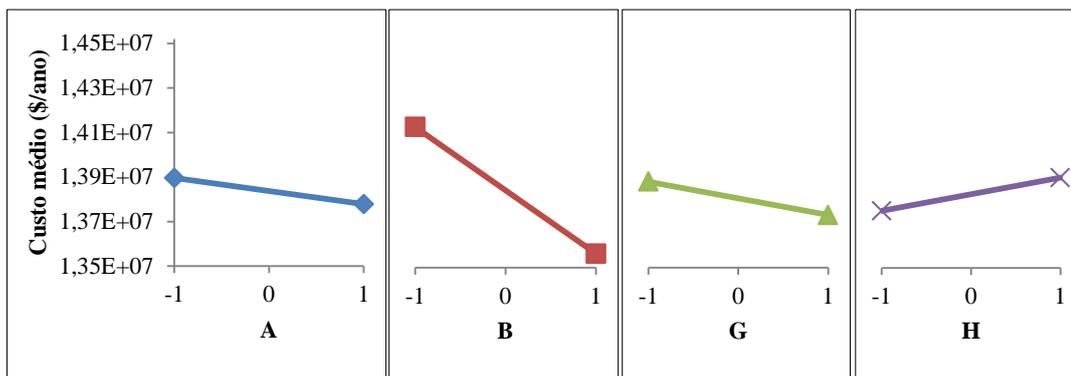


Figura 29 – Variação do custo médio com os efeitos principais do 1º ciclo de simulações

Através da análise dos efeitos verifica-se que à exceção de H, que deve ser colocado no nível mais baixo, todos os outros fatores devem ser colocados no nível mais alto.

Como principais interações obtiveram-se:

- AB
- AC confundido com BG
- CD confundido com GH

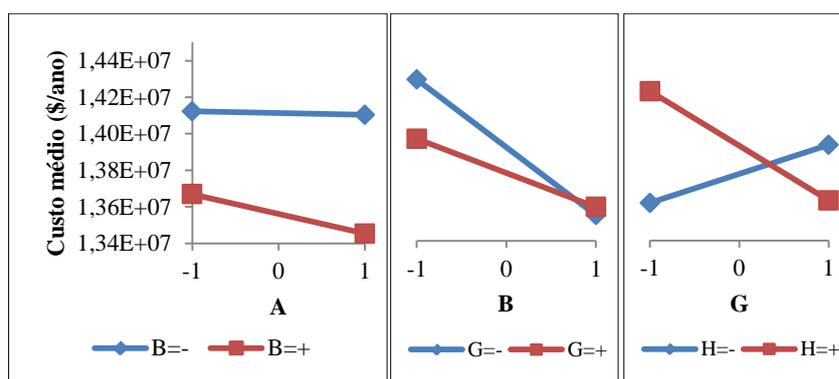


Figura 30 – Variação do custo médio com as interações principais do 1º ciclo de simulações

Da interação AB verifica-se que se deve manter A e B no nível mais alto, o que se coaduna com a análise dos efeitos, no entanto das interações BG e GH verifica-se que G deve ser alterado para o seu nível mais baixo.

O modelo de regressão, apresentado na [equação 6](#), obtido por ajuste dos resultados obtidos a uma equação de primeira ordem, é usado no presente trabalho para determinar e/ou confirmar melhor combinação entre os efeitos significativos, considerando as suas interações, através da determinação da combinação que resulta no menor valor de \hat{y} (custo total obtido pelo modelo), donde resulta que A e B devem ser colocados no seu nível alto ao passo que G e H devem ser colocados no seu nível baixo.

$$\hat{y} = 1,38 \times 10^7 - 5,88 \times 10^4 x_A - 2,76 \times 10^5 x_B - 6,92 \times 10^4 x_G + 7,60 \times 10^4 x_H - 2,27 \times 10^5 x_G x_H + 9,13 \times 10^4 x_B x_G$$

Equação 6

Os resultados relativos aos resíduos para o presente ciclo de simulações apresentam-se na [tabela 20](#) e na [figura 31](#), representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos (valor normalizado) com pontuação padronizada ($Z(\alpha)$), tendo que os valores obtidos são de ordem significativamente inferior relativamente à ordem da resposta, podendo-se estabelecer uma linha reta sobre os mesmos sem ocorrência de pontos discrepantes o que indica a inexistência de anomalias aos dados obtidos.

Tabela 20 – Resíduos para o 1º ciclo de simulações

Combinação	\hat{y}	y	Resíduo
(1)	1,40E+07	1,39E+07	-9,23E+04
a	1,39E+07	1,40E+07	1,09E+05
b	1,33E+07	1,33E+07	2,10E+04
ab	1,32E+07	1,31E+07	-3,76E+04
g	1,42E+07	1,40E+07	-1,56E+05
ag	1,40E+07	1,41E+07	8,02E+04
bg	1,38E+07	1,39E+07	1,36E+05
abg	1,37E+07	1,36E+07	-6,11E+04
h	1,46E+07	1,47E+07	4,19E+04
ah	1,45E+07	1,45E+07	-5,84E+04
bh	1,39E+07	1,39E+07	3,60E+04
abh	1,38E+07	1,38E+07	-1,95E+04
gh	1,39E+07	1,39E+07	9,38E+03
agh	1,37E+07	1,38E+07	6,59E+04
bgh	1,35E+07	1,35E+07	3,21E+03
abgh	1,34E+07	1,33E+07	-7,85E+04

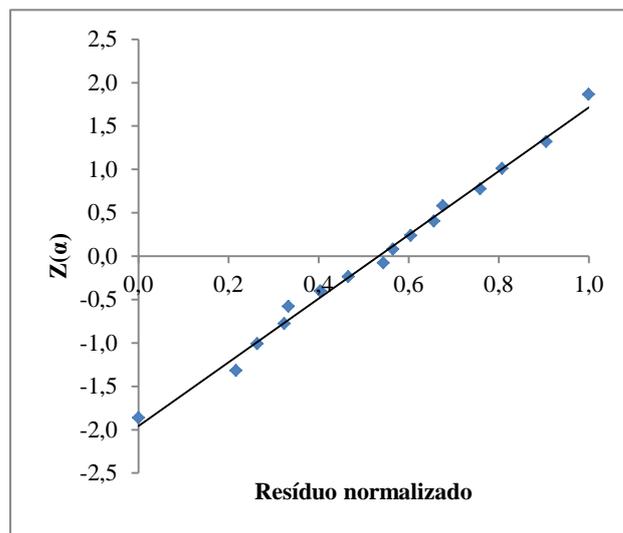


Figura 31 – Representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos para o 1º ciclo de simulações

5.2.1.3 DESIGN FATORIAL COMPLETO – 2º E 3º CICLO DE SIMULAÇÕES

O processo de otimização prossegue mediante um novo ciclo de simulações recorrendo ao design fatorial completo apenas considerando fatores com os efeitos principais, ou seja, cuja influência sobre a resposta é significativa, através de nova variação dos mesmos de igual amplitude no sentido do melhor nível.

2º ciclo de simulações

No presente ciclo de simulações os fatores não significativos são mantidos nos valores do caso base:

Tabela 21 – Variáveis do processo não significativas

Variável do processo	Valor
NT _{s1}	15
NT _{s2}	51
N _{SD}	42
NT _{s3}	8

Tabela 22 – Designação e níveis das variáveis de otimização do 2º ciclo de simulações

Fatores	Variáveis do processo	Melhor nível no 1º ciclo de simulações	Nível baixo (-1)	Nível alto (1)
A	N _F	9	9	11

B	NT _p	20	20	22
G	V3 (kmol/h)	275	265	275
H	L1 (kmol/h)	235	225	235

Os resultados deste ciclo de simulações ([tabela 23](#)) e respetiva avaliação encontram-se abaixo apresentados.

Tabela 23 – Resultados do 2º ciclo de simulações

Simulação		A	B	G	H	Custo total
1	(1)	9	20	265	225	1,32E+07
2	a	11	20	265	225	1,34E+07
3	b	9	22	265	225	1,28E+07
4	ab	11	22	265	225	1,30E+07
5	g	9	20	275	225	1,37E+07
6	ag	11	20	275	225	1,38E+07
7	bg	9	22	275	225	1,33E+07
8	abg	11	22	275	225	1,33E+07
9	h	9	20	265	235	1,39E+07
10	ah	11	20	265	235	1,40E+07
11	bh	9	22	265	235	1,34E+07
12	abh	11	22	265	235	1,35E+07
13	gh	9	20	275	235	1,32E+07
14	agh	11	20	275	235	1,33E+07
15	bgh	9	22	275	235	1,28E+07
16	abgh	11	22	275	235	1,30E+07

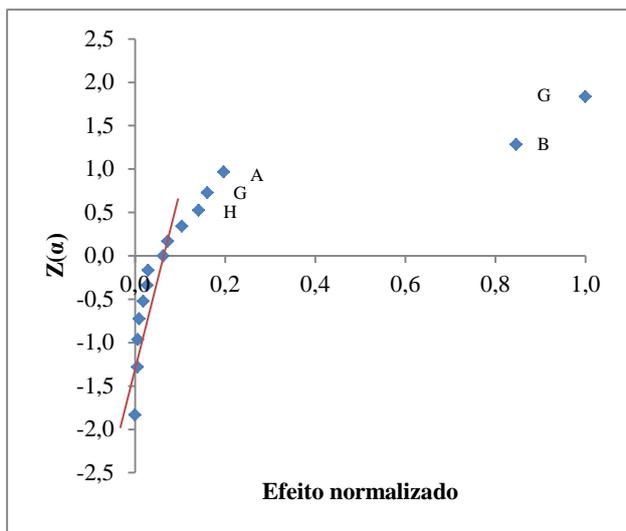


Tabela 24 – Resultados da análise ANOVA ao 2º ciclo de simulações: efeitos e interações principais

Fonte de variação	SS	g.l.	DQM	F ₀
A	2,98E+09	1	2,98E+09	14,73
B	5,13E+10	1	5,13E+10	253,58
G	2,02E+09	1	2,02E+09	9,97
H	1,58E+09	1	1,58E+09	7,84
GH	7,14E+10	1	7,14E+10	353,17
Erro	2,02E+09	10	2,02E+08	
Total	1,31E+11	15		

Figura 32 – Representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos do 2º ciclo de simulações

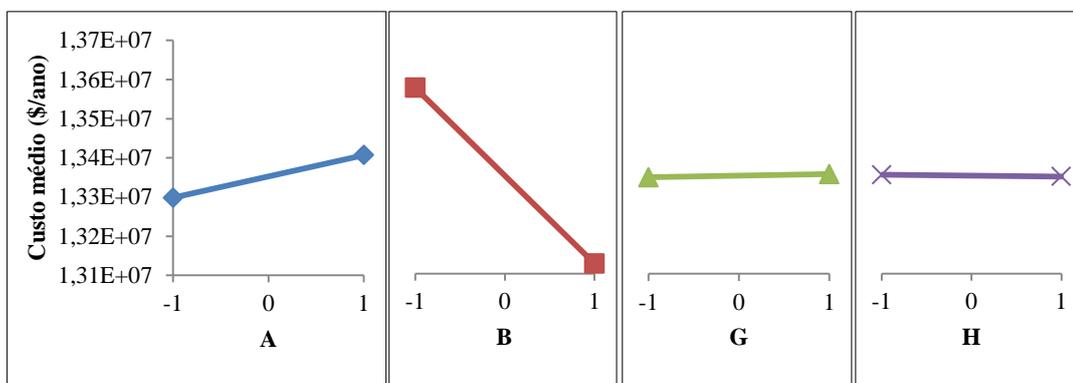


Figura 33 – Variação do custo médio com os efeitos principais do 2º ciclo de simulações

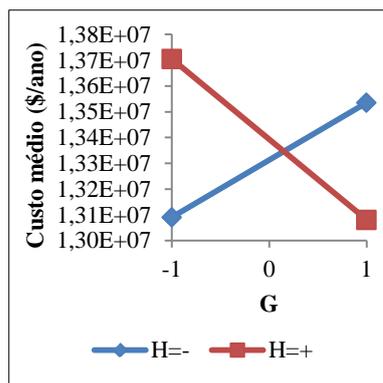


Figura 34 – Variação do custo médio com a interação GH, interação principal do 2º ciclo de simulações

Por regressão dos resultados a uma equação de primeira ordem obtém-se:

$$\hat{y} = 1,34 \times 10^7 + 5,46 \times 10^4 x_A - 2,26 \times 10^5 x_B + 3,94 \times 10^3 x_G - 2,36 \times 10^3 x_H - 2,67 \times 10^5 x_G x_H$$

Equação 7

Mediante análise dos resultados apresentados na [figura 32](#), [figura 33](#) e [figura 34](#), comparativamente ao primeiro ciclo de simulações realizado no formato de design fatorial fracionado, os principais efeitos

mantêm-se, no entanto para os novos níveis simulados apenas a interação GH se mantém e neste ciclo tem maior impacto que B sobre o custo, ao contrário do obtido anteriormente. Comparando com o modelo de regressão obtido para o 1º ciclo de simulações (equação 6) verifica-se que a contribuição do fator B para a variação do custo se mantém similar, sendo o seu melhor nível o mais alto, no entanto ocorre um significativo decréscimo da contribuição dos fatores G e H para a variação do custo.

Relativamente aos fatores G e H, apesar da inversão do sinal dos respetivos coeficientes bem como a diminuição do seu efeito sobre o custo, devido ao peso da sua interação (GH), cujo efeito é superior ao efeito individual dos fatores com interação, são obtidos menores custos quando se mantêm ambos os fatores no seu nível mais baixo ou no seu nível mais alto, verificando-se um custo ligeiramente menor mantendo G e H no seu nível mais baixo, à semelhança do obtido no primeiro ciclo de simulações.

O efeito da interação BG no segundo ciclo de simulações deixa de ser significativa, podendo tal dever-se à diminuição da contribuição de G.

Relativamente ao fator A, verifica-se a inversão do seu efeito, bem como a inversão de sinal do coeficiente associado no modelo de regressão obtido, sendo o melhor nível o nível mais baixo, correspondente ao melhor valor obtido no ciclo de simulações anteriores, pelo que se considera o fator A otimizado.

Os resultados relativamente à avaliação dos resíduos demonstram a inexistência de anomalias aos dados obtidos, bem como uma boa aproximação do modelo aos resultados do ciclo de simulação, conforme se apresenta na tabela 25 e figura 35.

Tabela 25 – Resíduos para o 2º ciclo de simulações

Combinação	\hat{y}	y	Resíduo
(1)	1,326E+07	1,32E+07	-1,53E+04
a	1,336E+07	1,34E+07	8,01E+03
b	1,280E+07	1,28E+07	3,30E+04
ab	1,291E+07	1,30E+07	-8,31E+04
g	1,380E+07	1,37E+07	6,12E+04
ag	1,391E+07	1,38E+07	1,22E+05
bg	1,335E+07	1,33E+07	4,40E+04
abg	1,345E+07	1,33E+07	1,37E+05
h	1,379E+07	1,39E+07	-1,30E+05
ah	1,389E+07	1,40E+07	-1,29E+05
bh	1,333E+07	1,34E+07	-9,48E+04
abh	1,344E+07	1,35E+07	-1,03E+04
gh	1,326E+07	1,32E+07	2,50E+04
agh	1,337E+07	1,33E+07	2,77E+04
bgh	1,281E+07	1,28E+07	4,65E+04
abgh	1,291E+07	1,30E+07	-7,24E+04

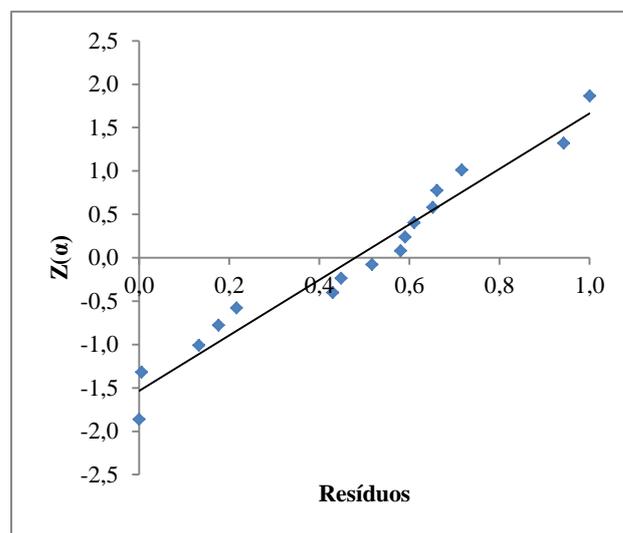


Figura 35 – Representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos para o 2º ciclo de simulações

3º ciclo de simulações

Atendendo aos resultados do 2º ciclo de simulações realizou-se um novo ciclo de simulações segundo o método de design fatorial completo a dois níveis, variando apenas os fatores cujo efeito se determinou como

significativo no 2º ciclo de simulações. O fator A não é considerado no presente ciclo, sendo mantido no nível anteriormente determinado como ótimo, correspondente à variável do processo N_F igual a 9.

Os fatores significativos para o presente ciclo de simulações são simulados nos segundos os níveis apresentados na [tabela 26](#).

Tabela 26 – Designação e níveis das variáveis de otimização do 3º ciclo de simulações

Fatores	Variáveis do processo	Melhor nível no 2º ciclo de simulações	Nível baixo (-1)	Nível alto (1)
B	NT_p	22	22	24
G	V3 (kmol/h)	265	255	265
H	L1 (kmol/h)	225	215	225

Os resultados do presente ciclo de simulações ([tabela 27](#)) e respetiva avaliação encontram-se abaixo apresentados.

Tabela 27 – Resultados do 3º ciclo de simulações

Simulação		B	G	H	Custo total
1	(1)	22	255	215	1,30E+07
2	b	24	255	215	1,26E+07
3	g	22	265	215	1,33E+07
4	bg	24	265	215	1,32E+07
5	h	22	255	225	1,36E+07
6	bh	24	255	225	1,33E+07
7	gh	22	265	225	1,28E+07
8	bgh	24	265	225	1,26E+07

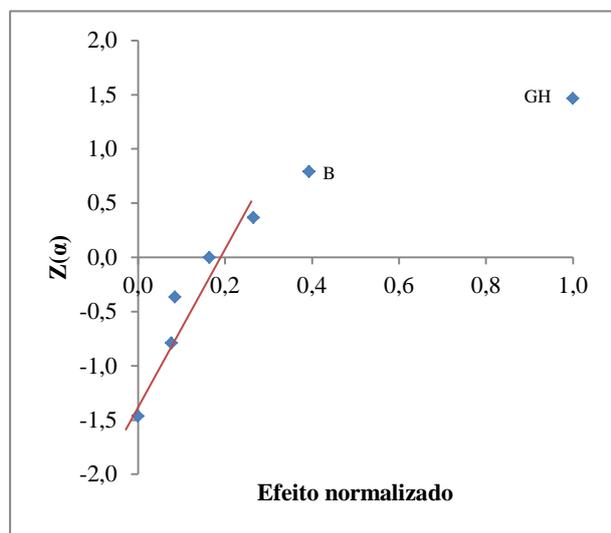


Figura 36 – Representação gráfica de probabilidade normal dos efeitos do 3º ciclo de simulações

Tabela 28 – Resultados da análise ANOVA ao 3º ciclo de simulações: efeitos e interações principais

Fonte de variação	SS	g.l.	DQM	F_0
B	1,56E+10	1	1,56E+10	7,00
GH	1,01E+11	1	1,01E+11	45,14
Erro	1,12E+10	5	2,23E+09	
Total	1,28E+11			

Considerando apenas os fatores B, G e H, verifica-se que o único fator com efeito significativo é o B, respeitante ao número de pratos total no prefracionador.

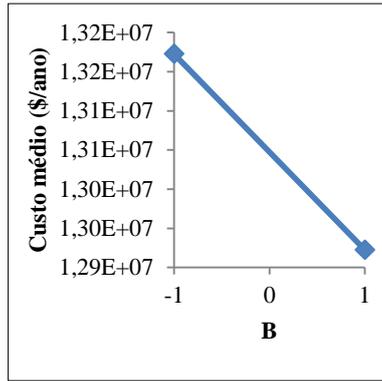


Figura 37 – Variação do custo médio com B, efeito principal do 3º ciclo de simulações

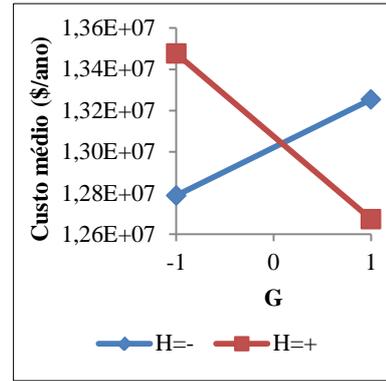


Figura 38 – Variação do custo médio com a interação GH, interação principal do 3º ciclo de simulações

$$\hat{y} = 1,30 \times 10^7 - 1,25 \times 10^5 x_B - 3,17 \times 10^5 x_G x_H \tag{Equação 8}$$

De forma similar aos ciclos anteriores a interação GH resulta numa interação cujo efeito é significativo, verificando-se neste ciclo que o custo é minimizado mantendo ambos os fatores no seu nível mais alto. Verifica-se ainda que os efeitos dos fatores associados a esta interação não são significativos. Os fatores G e H consideram-se otimizados com a inversão do melhor nível (melhor nível do ciclo anterior).

Os resultados relativamente à avaliação dos resíduos demonstram uma satisfatória aproximação do modelo de regressão obtido, Equação 8, tendo que os valores obtidos são de ordem significativamente inferior relativamente à ordem da resposta e a sua distribuição é considerada satisfatória (tabela 29 e figura 39).

Tabela 29 – Resíduos para o 3º ciclo de simulações

Combinação	\hat{y}	y	Resíduo
(1)	1,286E+07	1,30E+07	1,34E+05
b	1,261E+07	1,26E+07	-1,94E+04
g	1,349E+07	1,33E+07	-1,88E+05
bg	1,324E+07	1,32E+07	-3,48E+04
h	1,349E+07	1,36E+07	1,39E+05
bh	1,324E+07	1,33E+07	8,37E+04
gh	1,286E+07	1,28E+07	-8,53E+04
bgh	1,261E+07	1,26E+07	-2,95E+04

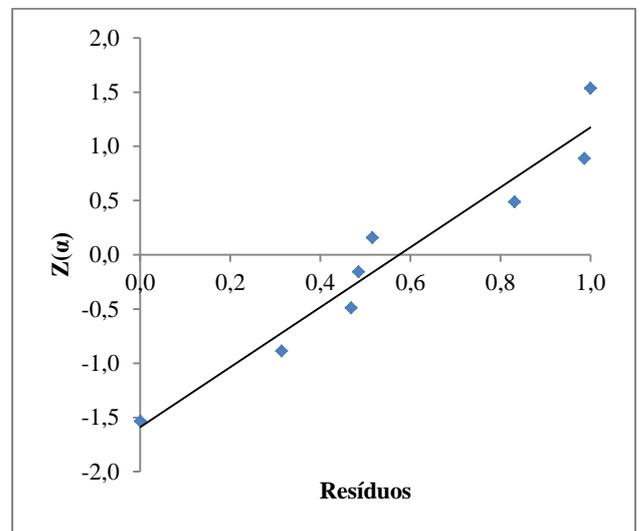


Figura 39 – Representação gráfica de probabilidade normal dos resíduos para o 3º ciclo de simulações

5.2.2 OTIMIZAÇÃO PARAMÉTRICA DO NÚMERO DE PRATOS DO PREFRACIONADOR

Após o 3º ciclo de simulações apenas B permanece como fator significativo sobre a variação dos custos, correspondente à altura do prefracionador, e verificada a não ocorrência de interações significativa de outras variáveis com B neste último ciclo, procede-se à otimização paramétrica deste fator.

Atendendo a que A representa a posição da alimentação no prefracionador e que a sua otimização está intimamente relacionada com o perfil de composições no prefracionador, o qual depende dos caudais de interligação e do seu posicionamento, e estabelecidos os caudais de interligação, o valor ótimo de A será relativo ao número total de pratos da coluna, optando-se assim por manter a posição relativa da alimentação relativamente ao número total de pratos do prefracionador (B), a qual foi determinada segundo os resultados obtidos no 2º ciclo de simulações, onde se obtém os menores custos para A=9 com B=22, o que corresponde à razão A/B de 0.409. Mantendo esta razão, A=0.409B, mediante a variação de B, obtém-se os resultados apresentados na [figura 40](#).

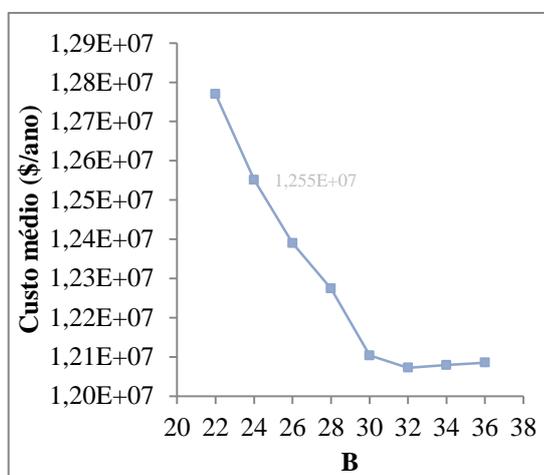


Figura 40 – Variação dos custos em função de NT_p (B)

O enunciado relativo à influência de A é comprovado pela resposta obtida para B igual 24 ([figura 40](#)) com o valor de A determinado pela razão estabelecida, quando comparada com a obtida no 3º ciclo de simulações, onde o valor de A foi mantido igual ao valor ótimo determinado no 2º ciclo de simulações, para os mesmos níveis de G e H, sendo o valor da resposta obtida na presente avaliação ligeiramente inferior à obtida no 3º ciclo de simulações.

Combinando técnicas associadas ao *design* fatorial com o conhecimento do sistema em avaliação foi efetuada a otimização do mesmo ([tabela 30](#)).

Tabela 30 – Valores ótimos das variáveis de design do sistema FTCDC

Variável do processo	Fator	Valor ótimo
N_F	A	13
NT_p	B	32
NT_{s1}	C	15
NT_{s2}	D	51
N_{SD}	E	42
NT_{s3}	F	8
V3 (kmol/h)	G	265
L1 (kmol/h)	H	225

5.2.3 AVALIAÇÃO PARAMÉTRICA DA CONDIÇÃO TÉRMICA DA ALIMENTAÇÃO E PRESSÃO DE FUNCIONAMENTO

Avaliada a influência da condição térmica da alimentação ao prefractionador e da pressão de topo da coluna principal ([figura 41](#) e [figura 42](#)) verifica-se que as condições ótimas das variáveis em análise correspondem às condições de partida sobre as quais as restantes variáveis de otimização consideradas foram otimizadas.

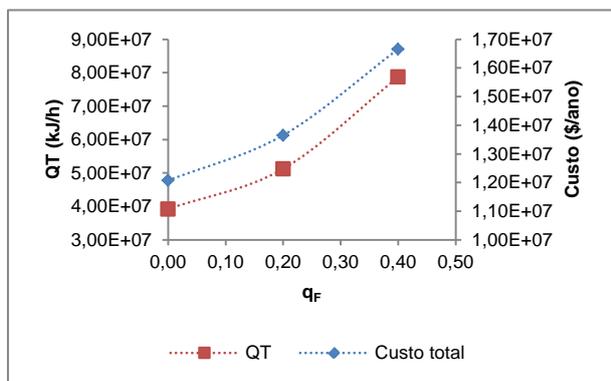


Figura 41 – Variação dos custos em função da condição térmica da alimentação ao prefractionador

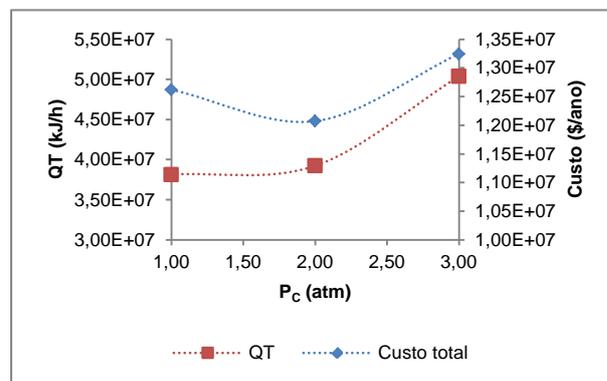


Figura 42 – Variação dos custos em função da pressão de topo da coluna principal

No presente estudo, bem como nos trabalhos anteriormente reportados, as presentes variáveis em análise não são consideradas para efeitos de otimização, sendo frequente a dependência da condição térmica da alimentação de operações a montante no processo que dão origem à corrente de alimentação e normalmente a pressão de operação é determinada atendendo a considerações relacionadas com as condições de pressão e temperatura dos produtos e utilidades necessárias, tendo podem-se recorrer para sua determinação ao algoritmo apresentado no [anexo 6](#).

Não obstante, uma vez que o funcionamento ótimo deste sistema está intrinsecamente relacionado com os caudais das correntes de interligação que alimentam o prefractionador, ou seja, da separação obtida neste, otimizando os caudais para determinadas condições de alimentação e pressão de funcionamento, é expectável que os seus valores ótimos sejam os pré-determinados.

5.3 COMPARAÇÃO ENTRE OS SISTEMAS

Na [tabela 31](#) e [tabela 32](#) apresentam-se os valores para as variáveis estruturais e de condições de operação que resultam no menor custo.

Tabela 31 – Variáveis de design otimizadas do sistema ST

Coluna 1		Coluna 2	
NT_{c1}	43	NT_{c2}	48
N_F	21	N_{D1}	23
P_{c1} (atm)	3	P_{c2} (atm)	1
q_F	1		

Tabela 32 – Variáveis de design otimizadas do sistema FTCDC

Prefracionador		Coluna principal	
NT_p	32	NT_c	74
N_F	13	N_{L1}	15
q_F	0	N_{SD}	42
P_p (atm)	2,25	N_{V3}	66
		V3 (kmol/h)	265
		L1 (kmol/h)	225
		P_c (atm)	2

Tabela 33 – Comparação do consumo energético e custo total entre os sistemas ST e FTCDC

Sistema	Consumo de energia (kJ/h)	Diferença de consumo de energia relativo a ST (%)	Custo total (\$/ano)	Diferença de custo total relativo a ST (%)
ST	4,27E+07		1,09E+07	
FTCDC	3,92E+07	-9%	1,21E+07	11%

Dos *designs* inicialmente implementados, o do sistema tradicional apresentou-se como o sistema mais favorável em termos energéticos para a separação em estudo. Não obstante, após otimização, verifica-se uma redução significativa dos consumos para o sistema FTCDC, destacando-se como principais variáveis de otimização os caudais de interligação e a relação entre eles e o *design* estrutural do prefracionador. De notar que estas variáveis intrinsecamente relacionados com a separação obtida no prefracionador.

Apesar do sistema FTCDC se apresentar como um sistema energeticamente mais eficiente que o tradicional, após otimização dos *designs*, com uma diferença de consumo energético de menos 9% relativo ao sistema tradicional, os custos associados ao sistema FTCDC são superiores aos do sistema tradicional, tendo que a poupança energética obtida não suplanta os custos associados (tabela 33).

Relativamente ao trabalho de otimização e simulação envolvido, é importante notar que o maior número de graus de liberdade no *design* e as possíveis interações entre as variáveis do sistema FTCDC, podem tornar os procedimentos de otimização via simulação muito dispendiosos em termos de tempo, comparativamente com o sistema tradicional, sendo necessário um elevado número de simulações para proceder à otimização do sistema. Não obstante, através de técnicas de *design* experimental e métodos estatísticos para avaliação dos resultados obtidos é possível tornar mais célere o procedimento de otimização via simulação deste tipo de sistemas, conforme o demonstrado com a aplicação de técnicas de design fatorial fracionado e completo.

6 SIMULAÇÃO DINÂMICA E CONTROLO

Neste capítulo procede-se à implementação da simulação dinâmica e comparação da controlabilidade entre os sistemas em estudo.

A simulação dinâmica de processos, baseada em modelos dinâmicos, permite melhorar o seu *design*, otimização e operação, cujos resultados traduzirão de uma forma mais realística o desempenho do processo desenhado, uma vez que estes nunca se encontram num verdadeiro estado estacionário. Com a simulação dinâmica de processos é possível confirmar se o processo produzirá o produto desejado, ou seja, cumprirá os

objetivos para os quais foi desenhado, de forma segura e de fácil operação. É possível desenhar e testar diferentes configurações de controlo escolhendo a que melhor se adequa para implementação. É também possível examinar as respostas dinâmicas às perturbações do sistema e otimizar a sintonia dos controladores implementados [7].

No presente trabalho, através do modo de simulação dinâmica do HYSYS testar-se-ão as configurações de controlo desenhadas e implementadas em ambos os sistemas em estudo, proceder-se-á a sintonização dos controladores e comparar-se-ão os resultados obtidos para cada um dos sistemas.

6.1 ETAPAS DE IMPLEMENTAÇÃO DOS SISTEMAS PARA SIMULAÇÃO DINÂMICA

Com base nas linhas de orientação e passos a seguir enunciados em *Aspen HYSYS Dynamics - User Guide* [7] e em *Using Process Simulators in Chemical Engineering: A Multimedia guide for the Core Curriculum* [65], para efetuar a transição da simulação em modo de estado estacionário para simulação em modo dinâmica de um processo em HYSYS as seguintes etapas devem ser seguidas:

1. Simulação em estado estacionário: resolução dos balanços de massa e energia em estado estacionário;
2. Determinação os volumes e especificação dos níveis de líquido dos tanques;
3. Definição da configuração de controlo;
4. Implementação e dimensionamento de válvulas de controlo;
5. Implementação/ configuração das malhas de controlo
6. Criação de *stripcharts* para observação do comportamento das diferentes variáveis do processo;
7. Passar para o modo de simulação dinâmica
8. Correr a simulação
9. Sintonização dos controladores

Sendo recomendado que cada etapa seja guardada num ficheiro distinto.

6.1.1 SIMULAÇÃO EM ESTADO ESTACIONÁRIO

Para simulação em estado estacionário dos sistemas em estudo, recorre-se aos dados obtidos após otimização de cada um dos sistemas (ponto [5.3](#)), tendo que a implementação de ambos os sistemas é efetuada de acordo com o descrito nos pontos [4.2](#) e [4.3](#).

Adicionalmente foi efetuado o ajuste das pressões das correntes de entrada nas colunas de ambos os sistemas, atendendo aos perfis de pressão das colunas ([figura 43](#) e [figura 44](#)).

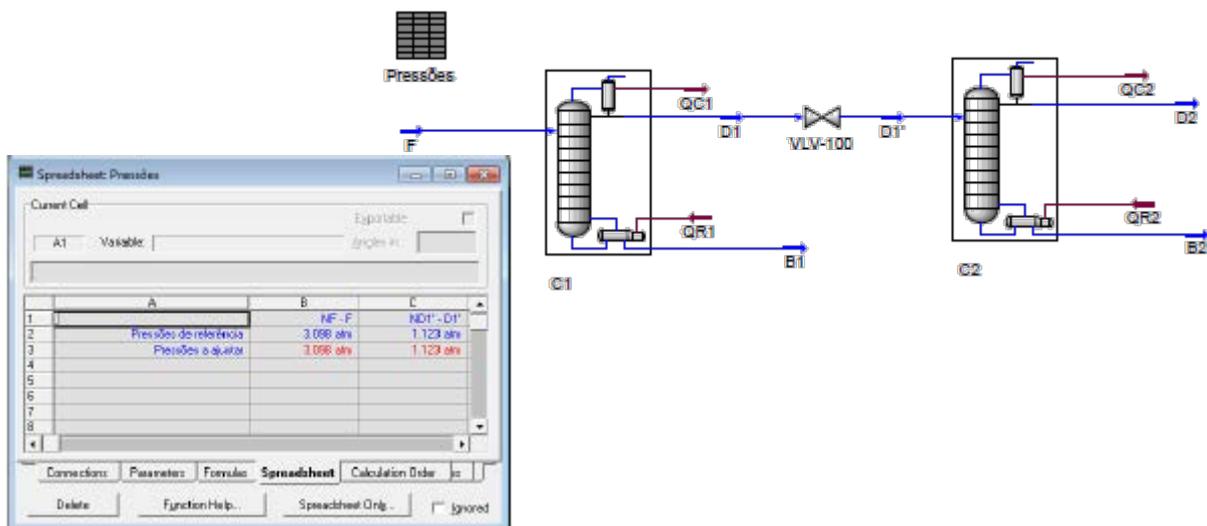


Figura 43 – Flowsheet do sistema ST

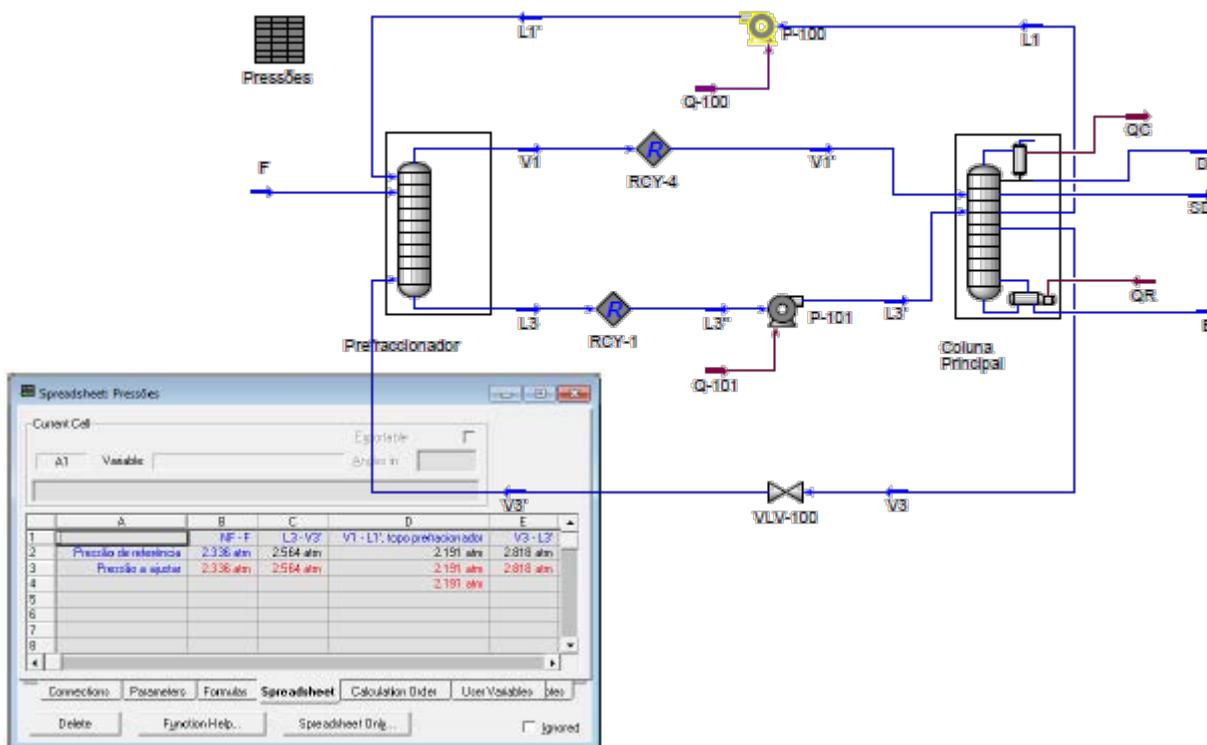


Figura 44 – Flowsheet do sistema FTCDC

Para o sistema FTCDC em específico, tendo que a pressão de topo do pre-fractionador em simulação dinâmica (operação) é definida pela pressão no prato de entrada da corrente de interligação V1 e uma vez que o objetivo final em termos de operação é que o fluxo de vapor entre as colunas neste sistema seja assegurado apenas pelas diferenças de pressão, alterou-se a forma de implementação no sentido em que a pressão no topo do pre-fractionador seja definida pela pressão da corrente de interligação L1 a saída da coluna principal.

Na [tabela 34](#) e [tabela 35](#) apresentam-se os dados de implementação dos sistemas tradicional e FTCDC e um resumo dos resultados de simulação em estado estacionário em termos de caudais de refluxo, de correntes de produto e consumos de energia.

Tabela 34 - Dados de implementação dos sistemas tradicional e resultados de simulação

		Coluna 1		Coluna 2	
Dados Estruturais e Operação	Número de pratos total	NT_{c1}	43	NT_{C2}	48
	Prato de alimentação	N_F	21	N_{D1}	23
	Tipo de condensador	Total		Total	
	Tipo de Enchimento	Sieve		Sieve	
	Seccionamento	Uniforme		Uniforme	
	Pressão de topo	P_{c1} (atm)	3	P_{C2} (atm)	1
	Perda de carga ⁵	ΔP_{c1}	0,207	ΔP_{c2}	0,263
	Condição térmica da alimentação	q_F	1	-	-
Especificações	Corrente de produto de topo	Recuperação de C em B1, fração molar	0,980	Composição de D2 em A, fração molar, x_{D2}	0,975
	Corrente de produto de fundo	Composição de B1 em C, fração molar, x_{B1}	0,975	Composição de B2 em B, fração molar, x_{B2}	0,950
Resultados de simulação	Calor removido no condensador (kJ/h)	Q_{C1}	-1,30E+07	Q_{C2}	-1,08E+07
	Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	Q_{R1}	9,08E+06	Q_{R2}	1,03E+07
	Caudal refluxo (kmol/h)	R1	272,50	R2	231,40
	Caudal da corrente de produto de topo (kmol/h)	D1	66,50	D2	33,15
	Caudal da corrente de produto de fundo (kmol/h)	B1	33,50	B2	33,35

Tabela 35 - Dados de implementação dos sistemas FTCDC e resultados de simulação

		Prefracionador		Coluna Principal	
Dados Estruturais e Operação	Número de pratos total	NT_p	32	NT_C	74
	Pratos de alimentação	N_F	13	N_{V1}	15
				N_{L3}	66
	Pratos de extração lateral			N_{L1}	15
			N_{SD}	42	

⁵ Resultado do dimensionamento das colunas através “Tray Sizing”

Especificações				N_{V3}	66
	Tipo de condensador	-	-	Total	
	Tipo de enchimento	Valve		Bubble cap	
	Seccionamento	Uniforme		Não uniforme	
	Pressão de topo	P_p (atm)	2,191	P_{s1}	2,000
				P_{s2}	2,191
				P_{s3}	2,818
	Perda de carga ⁶	ΔP_{c1}	0,374	ΔP_{s1}	0,191
				ΔP_{s2}	0,628
				ΔP_{s3}	0,118
	Condição térmica da alimentação	q_F	0		
	Condição térmica da corrente de extração lateral	-	-	q_{L1}	0
				q_{SD}	0
				q_{V3}	1
	Composição em fração molar da corrente de produto	-	-	D em A, x_D	0,975
			SD em B, x_{SD}	0,950	
			B em C, x_B	0,975	
Resultados de simulação	Calor removido no condensador (kJ/h)		Q_C	-1,96E+07	
	Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)		Q_R	1,96E+07	
	Caudal refluxo (kmol/h)		R	469,96	
	Caudal das correntes de produto (kmol/h)		D	32,97	
			SD	33,34	
		B	33,69		

6.1.2 DETERMINAÇÃO DOS VOLUMES E ESPECIFICAÇÃO DOS NÍVEIS DE LÍQUIDO

O dimensionamento das colunas de separação é efetuado nos estudos de otimização, através da utilidade “Tray Sizing” do HYSYS.

O volume (V) dos tanques - ebulidores e condensadores das colunas, é determinado segundo a [equação 9](#), onde L representa os caudais líquidos que passam nos tanques, definidos pelas correntes líquidas associadas a cada um (para o condensador as correntes de refluxo, R e destilado, D e para o ebulidor a corrente líquida que alimenta o ebulidor), t_r o tempo de residência, o qual se assume como sendo 10 minutos para o condensador e 15 minutos para o ebulidor [14] e h o nível de líquido relativo à altura do tanque, o qual foi estabelecido de acordo com o valor por defeito assumido no HYSYS e normalmente usado, de 50%.

$$V = L \cdot t_r / h$$

Equação 9

⁶ Resultado do dimensionamento das colunas através “Tray Sizing”

Os resultados de dimensionamento do sistema tradicional e FTCDC apresentam-se na [tabela 36](#) e [tabela 37](#), respetivamente.

Tabela 36 – Dimensionamento das colunas e tanques para o sistema ST

	Coluna 1		Coluna 2	
	Resultados de dimensionamento das colunas			
Tipo de enchimento	<i>Sieve</i>		<i>Sieve</i>	
Diâmetro (m)	1,372		1,524	
Pressão de topo (atm)	P_{c1}	3,000	P_{c2}	1,000
Perda de carga (atm)	ΔP_{c1}	0,207	ΔP_{c2}	0,263
	Dimensionamento dos tanques			
	Ebulidor			
Caudais (m ³ /h) ⇔ <i>Actual Vol. Flow (To condenser)</i>	28,97		28,40	
Tempo de retenção (minutos)	15,00		15,00	
Nível (%)	50%		50%	
Volume total (m ³)	14,48		14,20	
	Condensador			
Caudais (m ³ /h) ⇔ <i>Actual Vol. Flow (Reflux + D)</i>	36,28		26,97	
Tempo de retenção (minutos)	10,00		10,00	
Nível (%)	50%		50%	
Volume total (m ³)	12,09		8,99	

Tabela 37 – Dimensionamento das colunas e tanques para o sistema FTCDC

	Prefracionador				Coluna Principal			
	Secção do topo (s1)		Secção intermédia (s2)		Secção do fundo (s3)			
	Resultados de dimensionamento das colunas							
Tipo de enchimento	<i>Valve</i>				<i>Buble cap</i>			
Diâmetro (m)								
Pressão de topo (atm)	P_p	2,191	P_{s1}	2,000	P_{s2}	2,191	P_{s3}	2,818
Perda de carga (atm)	ΔP_p	0,374	ΔP_{s1}	0,191	ΔP_{s2}	0,628	ΔP_{s3}	0,118
	Dimensionamento dos tanques							
	Ebulidor							
Caudais (m ³ /h) ⇔ <i>Actual Vol. Flow (To condenser)</i>	57,53							
Tempo de retenção (minutos)	15,00							
Nível (%)	50%							
Volume total (m ³)	28,76							
	Condensador							
Caudais (m ³ /h) ⇔ <i>Actual Vol. Flow (Reflux + D)</i>	53,18							
Tempo de retenção (minutos)	10,00							
Nível (%)	50%							
Volume total (m ³)	17,73							

6.1.3 DEFINIÇÃO DA CONFIGURAÇÃO DE CONTROLO

O problema de controlo de processos, dada a sua potencial contribuição na otimização da operação, que por sua vez se repercute na rentabilidade dos processos, bem como em aspetos de segurança e ambientais, é atualmente um tema alvo de extensa investigação e inovação, com desenvolvimento de novas e melhoradas

estratégias e técnicas de controlo, baseadas nas análises do estado estacionário, mas sobretudo da dinâmica dos processos.

Relativamente ao controlo de colunas de destilação convencionais, este é um aspeto extensivamente estudado, sendo possível encontrar devidamente documentadas diferentes estratégias e técnicas de controlo que atendem aos variáveis e distintos aspetos deste tipo de operação e aos diferentes objetivos com esta relacionada. No entanto para o sistema FTCDC, devido à complexidade associada a sua operação e à sua não utilização à escala industrial, a informação disponível sobre estratégias e técnicas de controlo para este sistema é ainda escassa, tendo que maiorias dos estudos apresentados se baseiam em estratégias que constituem uma adaptação das estratégias de controlo já adotadas para colunas de destilação convencionais.

Conforme previamente mencionado no ponto [2.4](#), os passos para a determinação de uma estrutura de controlo adequada incluem:

1. A definição dos objetivos do sistema de controlo e a natureza das perturbações;
2. Percepção dos princípios do processo em termos de comportamento dinâmico;
3. Proposta uma estrutura de controlo consistente com os objetivos e características do processo;
4. Atribuição de controladores e avaliação da estrutura de controlo proposta com as perturbações previstas através do uso de simulação dinâmica.

Para ambos os sistemas consideram-se como objetivos o controlo de balanço material e restrições de forma a assegurar a operabilidade dos sistemas, estando estes associados ao controlo regulatório. O objetivo de qualidade consiste no cumprimento das especificações do produto previamente estabelecidas para a simulação em estado estacionário.

Determinadas as possíveis variáveis manipuladas, controladas e perturbações dos sistemas, diferentes estudos podem ser conduzidos para determinação da “melhor” escolha, bem como para a avaliação da interação entre as malhas de controlo desta forma definidas, sendo exemplo destes a matriz de ganhos relativos (RGA – *Relative Gain Array*) e o índice de Niederlinske (NI – *Niederlinske index*).

No presente trabalho a escolha do emparelhamento das variáveis e respetivas configurações de controlo baseia-se em técnicas de controlo tradicionalmente aplicadas em processos de destilação, cuja aplicação e análise se encontra brevemente descrita nos pontos [2.4](#) e [3.3](#).

Para efeitos de avaliação do emparelhamento escolhido para controlo de composição, atendendo á conhecida interação entre as malhas de controlo desenhadas, a escolha foi complementada pela obtenção e análise da matriz de ganhos relativos para cada coluna dos sistemas em estudo, obtida de acordo com o procedimento apresentado por Svrcek et al. em “A Real-Time Approach to Process Control”[14], cuja determinação se apresenta no [Anexo 7.a.](#), sendo igualmente avaliada a aplicabilidade da simulação em HYSYS para a sua obtenção.

6.1.3.1 CONFIGURAÇÃO DE CONTROLO DO SISTEMA TRADICIONAL

No sistema tradicional para a separação de uma mistura tricomponente usa-se uma sequência de duas colunas com fluxo unidirecional de uma das correntes de produto da primeira coluna para a segunda coluna, constituindo esta corrente a sua alimentação.

Atendendo ao objetivo estabelecido em termos de controlo de qualidade, verifica-se a necessidade de um eficaz controlo da composição da corrente que alimenta a segunda coluna, no que diz respeito ao limite superior de impureza nesta corrente, pois este define à partida a possibilidade de se poder ou não cumprir a especificações de produto associadas às composições das correntes obtidas na segunda coluna, pelo que se implementará um sistema de controlo dual em termos de composição em ambas as colunas do sistema.

Associado aos objetivos de controlo de balanço material e restrições, o controlo regulatório em ambas as colunas inclui o controlo dos níveis nos condensadores e ebulidores, o qual não necessita de ser apertado e o controlo de pressão na coluna, o qual deve ser um controlo apertado de forma a manter a variável controlada no seu ponto de operação, dada forte influência dos perfis de pressão na operação de separação.

Como variáveis manipuladas, em ambas as colunas, são consideradas:

- Caudal da corrente de produto de topo (D_1 e D_2);
- Caudal do produto de fundo (B_1 e B_2)
- Caudal de refluxo (R_1 e R_2)
- Calor fornecido no ebulidor (QR_1 e QR_2), manipulando-se de forma indireta o caudal de vapor de ebulição;
- Calor retirado no condensador (QC_1 e QC_2), manipulando de forma indireta caudal de vapor de topo nas colunas;

Atendendo aos objetivos de controlo, consideram-se como variáveis a controlar, para efeitos de:

- Controlo de qualidade, em ambas as colunas:
 - Composição das correntes de produto (x_{D_1} e x_{B_1} , x_{D_2} e x_{B_2});
- Controlo regulatório, em ambas as colunas:
 - Pressão de topo (P_{c1} e P_{c2})
 - Níveis no ebulidor (h_{B_1} e h_{B_2}) e condensador (h_{D_1} e h_{D_2}).

Considerando-se como perturbações ao sistema as variáveis associadas à corrente de alimentação, nomeadamente caudal F e composição z_F .

A configuração de controlo implementada baseia-se no tradicional modo de controlo por *feedback* com malhas de controlo SISO (*single input – single output*, ou seja, entrada única-saída única), optando-se no presente trabalho pela implementação e teste da denominada configuração-LV [22], [24], sendo usado o emparelhamento de variáveis apresentado na [tabela 38](#).

Tabela 38 – Esquema de emparelhamento das variáveis para o sistema ST

Coluna 1		Coluna 2	
Variável controlada	Variável manipulada	Variável controlada	Variável manipulada
P_{c1}	QC1	P_{c2}	QC2
h_{D1}	D1	h_{D2}	D2
h_{B1}	B1	h_{B2}	B2
x_{D1}	R1	x_{D2}	R2
x_{B1}	QR1	x_{B2}	QR2

6.1.3.2 CONFIGURAÇÃO DE CONTROLO DO SISTEMA FTCDC

O sistema FTCDC consiste numa sequência de duas colunas, um prefracionador e uma coluna principal, interligadas por correntes de vapor e líquido, apenas com um condensador e um ebulidor na coluna principal. Duas correntes, uma de vapor e uma líquida, extraídas da coluna principal, entram no prefracionador, assegurando um prefracionamento dos componentes da sua corrente de alimentação, que constitui a corrente de alimentação ao sistema, e por sua vez, as correntes de produto do prefracionador constituem a alimentação da coluna principal. Da coluna principal, em vez das tradicionais duas correntes de produto, obtém-se uma terceira corrente de produto por extração lateral.

Esta configuração, comparativamente com uma coluna convencional de destilação, apresenta um maior número de graus de liberdade, o que torna mais complexa a sua operação.

Como variáveis manipuladas, são consideradas:

- Caudal da corrente de produto de topo (D);
- Caudal da corrente de produto de extração lateral (SD);
- Caudal do produto de fundo (B);
- Caudal de refluxo (R);
- Calor fornecido no ebulidor (QR), manipulando-se de forma indireta o caudal de vapor de ebulição;
- Calor retirado no condensador (QC), manipulando de forma indireta caudal de vapor de topo da coluna principal;
- Caudais das correntes de interligação ao prefracionador (L1 e V3);

Atendo aos objetivos de controlo, quer de qualidade quer regulatório, as seguintes variáveis são identificadas como variáveis de controlo:

- Controlo de qualidade:
 - Composição das correntes de produto (x_D , x_{SD} e x_B);
- Controlo regulatório:

- Pressão de topo na coluna principal (P_c);
- Níveis no ebulidor (h_B) e condensador (h_D);
- Caudais das correntes de interligação ao prefracionador (L1 e V3);

Considerando-se como perturbações ao sistema as variáveis associadas à corrente de alimentação, nomeadamente caudal F e composição z_F .

Atendendo aos estudos anteriormente reportados sobre controlo do sistema FTCDC [18], [50], [54] com adoção do modo de controlo por *feedback* com malhas de controlo SISO (*single input – single output*, ou seja, entrada única-saída única), opta-se pela implementação da configuração-LV, adaptada da configuração-LV usada para colunas convencionais de destilação [17], sendo usado o emparelhamento de variáveis apresentado na [tabela 39](#).

Tabela 39 – Esquema de emparelhamento das variáveis para o sistema FTCDC

Coluna Principal e correntes de interligação	
Variável controlada	Variável manipulada
P_c	QC
h_D	D
h_B	B
V3	V3
L1	L1
x_D	R
x_{SD}	SD
x_B	QR

6.1.4 IMPLEMENTAÇÃO DAS VÁLVULAS DE CONTROLO

A implementação das válvulas de controlo, através da operação “Valve”, é determinada pela estratégia de controlo adotada. Para o dimensionamento das válvulas, efetuado em HYSYS através do *Size Valve* disponível nas suas propriedades em *Rating* ou *Dynamics*, considerou-se uma perda de carga de 30 kpa (aproximadamente 0.296 atm) e mantiveram-se os valores de origem do HYSYS para os restantes parâmetros passíveis de serem alterados.

Para o sistema FTCDC, uma vez definida a pressão de topo do prefracionador pelo valor verificado para L1 à saída da coluna principal, e sendo o perfil de pressão no prefracionador dependente da pressão de topo. A perda de carga associada à válvula anteriormente introduzida em V3, que é também usada para efeitos de controlo, é definida pela pressão de V3 à saída da coluna de principal e pela pressão na base do prefracionador em vez de especificada, tendo que tratando-se de uma corrente de vapor se evita desta forma o uso de compressores.

As válvulas associadas à manipulação das correntes de energia e das correntes de refluxo não são implementadas no *flowsheet*, uma vez que o simulador permite a sua definição aquando da implementação dos controladores e criação das respetivas malhas de controlo.

6.1.5 IMPLEMENTAÇÃO DAS MALHAS DE CONTROLO

As malhas de controlo em cada sistema são definidas pela estratégia e técnicas de controlo adotadas.

A sua implementação em HYSYS é feita através das operações de controlo (“Control Ops”) disponíveis, por implementação de “Controllers”. Genericamente na implementação de qualquer tipo de controlador é necessária a definição nas suas propriedades, em *Connections* a variáveis de entrada e de saída, criando-se desta forma a malha controlo associada ao controlador implementado. A parametrização dos controladores depende do tipo de controlador escolhido e é definida em *Parameters*.

Através do HYSYS é possível a implementação de malhas de controlo com controladores do tipo PID, MPC, *Split Range Controller*, *Ratio Controller* e *DMCplus Controller*.

A configuração de controlo de cada sistema é implementada com introdução dos respetivos elementos finais de controlo (válvulas) e com a definição das malhas de controlo mediante a introdução e configuração dos controladores. Para as válvulas introduzidas com a definição das malhas de controlo foi necessária a definição do seu alcance em termos dos valores mínimos e máximos para as variáveis manipuladas que lhe estão associadas, tendo que no presente estudo se considerou uma máxima variação relativamente ao valor de estado estacionário de $\pm 20\%$ aproximadamente.

Na [figura 45](#) apresenta-se o *flowsheet* do sistema tradicional com a implementação da configuração-LV para controlo da operação de ambas as colunas do sistema.

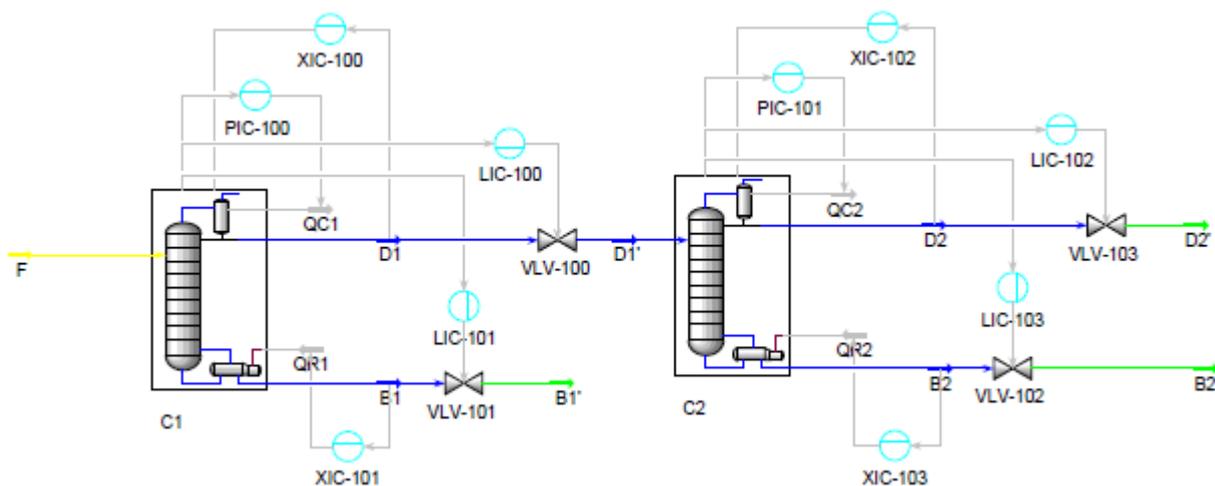


Figura 45 – *Flowsheet* do sistema ST - sistema de controlo com configuração-LV

Na [figura 46](#) apresenta-se o *flowsheet* do sistema FTCDC com a implementação da configuração-LV adaptada ao sistema FTCDC.

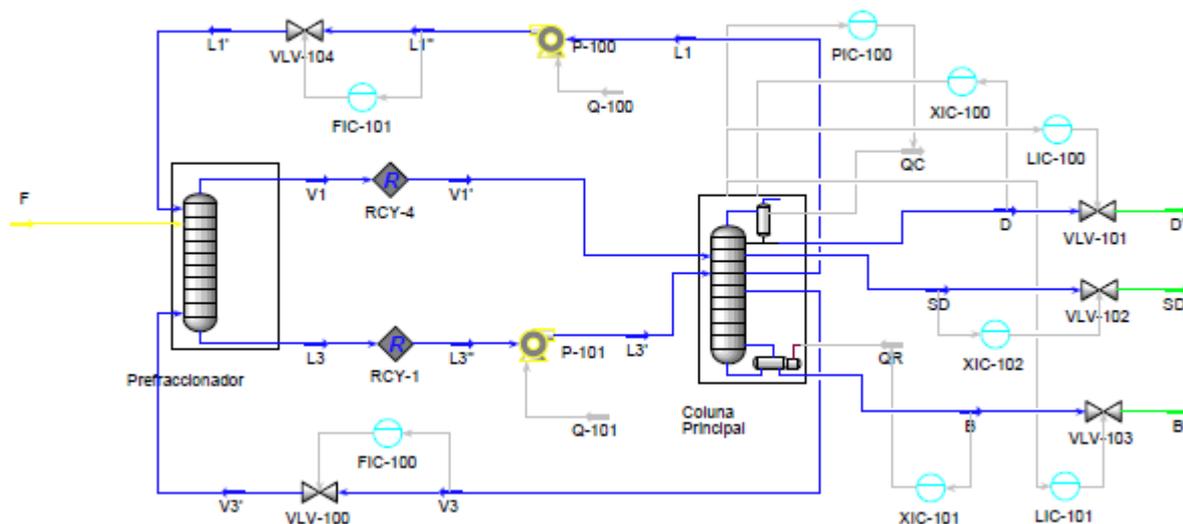


Figura 46 – Flowsheet do sistema FTCDC - sistema de controlo com configuração-LV

Nas tabelas que se seguem apresenta-se a parametrização de cada malha para ambos os sistemas, tradicional e FTCDC, e conforme se pode verificar os controladores associados às malhas de controlo de nível encontram-se já parametrizados, o que é resultado da implementação de forma automática das respetivas malhas de controlo.

Em HYSYS, associado às operações “Condenser” e “Reboiler” existe disponível nas suas propriedades, no separador *Dynamics*, a inserção da malha de controlo, a qual se associa automaticamente á corrente de saída de produto ligada à operação em questão.

Nas tabelas abaixo apresentadas é indicada a configuração dos controladores e respetivas malhas de controlo implementadas em cada um dos sistemas em estudo.

Tabela 40 – Configuração dos controladores implementados na coluna 1 do sistema ST – controlo regulatório

Malha de controlo	Pressão		Nível do condensador		Nível do ebulidor	
Variável controlada (CV)	P _{c1}		h _{D1}		h _{B1}	
Variável manipulada (MV)	QC1		D1		B1	
Controlador	PIC-100		LIC-100		LIC-101	
Modo de ação	Direto		Direto		Direto	
Valor da variável controlada (ou do processo) (PV)	3,00	atm	50,00	%	50,00	%
Valor do Set-point de CV (SP)	3,00	atm	50,00	%	50,00	%
Percentagem de abertura da válvula de controlo (OP)	49,40	%	50,00	%	50,00	%
Valor equivalente de MV para o valor calculado para OP	1,30E+07	kJ/h	66,50	kmol/h	33,50	kmol/h
CV mínimo	2,00	atm	0,00	%	0,00	%
CV máximo	4,00	atm	100,00	%	100,00	%
MV mínimo	1,00E+07	kJ/h	0,00	%	0,00	%
MV máximo	1,60E+07	kJ/h	100,00	%	100,00	%
kc	-		1,80		1,80	
τ _i	-	minutos	226,49	minutos	524,27	minutos
τ _d	-	minutos	-	minutos	-	minutos

Tabela 41 – Configuração dos controladores implementados na coluna 1 do sistema ST – controlo de composição

Malha de controlo	Composição produto topo	Composição produto fundo
-------------------	-------------------------	--------------------------

CV	x_{D1}		x_{B1}	
MV	R1		QR	
Controlador	XIC-100		XIC-101	
Modo de ação	Direto		Inverso	
PV	0,010	fração molar	0,975	fração molar
SP	0,010	fração molar	0,975	fração molar
OP	51,97	%	52,00	%
MV	272,51	kmol/h	9,08E+06	kJ/h
CV mínimo	0,000	fração molar	0,000	fração molar
CV máximo	0,100	fração molar	1,000	fração molar
MV mínimo	210,00	kmol/h	7,00E+06	kJ/h
MV máximo	330,00	kmol/h	1,10E+07	kJ/h
kc	-		-	
τ_i	-	minutos	-	minutos
τ_d	-	minutos	-	minutos

Tabela 42 – Configuração dos controladores implementados na coluna 2 do sistema ST – controle regulatório

Malha de controlo	Pressão		Nível do condensador		Nível do ebulidor	
CV	P_{c2}		h_{D2}		h_{B2}	
MV	QC2		D2		B2	
Controlador	PIC-101		LIC-102		LIC-103	
Modo de ação	Direto		Direto		Direto	
PV	1,00	atm	50,00	%	50,00	%
SP	1,00	atm	50,00	%	50,00	%
OP	56,17	%	50,00	%	50,00	%
MV	1,08E+07	kJ/h	33,15	kmol/h	33,35	kmol/h
CV mínimo	0,00	atm	0,00	%	0,00	%
CV máximo	2,00	atm	100,00	%	100,00	%
MV mínimo	8,00E+06	kJ/h	0,00	%	0,00	%
MV máximo	1,30E+07	kJ/h	100,00	%	100,00	%
kc	-		1,80		1,80	
τ_i	-	minutos	354,68	minutos	565,24	
τ_d	-	minutos	-	minutos	-	-

Tabela 43 – Configuração dos controladores implementados na coluna 2 do sistema ST – controle de composição

Malha de controlo	Composição produto topo		Composição produto fundo	
CV	x_{D2}		x_{B2}	
MV	R2		QR2	
Controlador	XIC-102		XIC-103	
Modo de ação	Inverso		Inverso	
PV	0,975	fração molar	0,950	fração molar
SP	0,975	fração molar	0,950	fração molar
OP	51,40	%	46,69	%
MV	231,40	kmol/h	1,03E+07	kJ/h
CV mínimo	0,000	fração molar	0,000	fração molar
CV máximo	1,000	fração molar	1,000	fração molar
MV mínimo	180,00	kmol/h	8,00E+06	kJ/h
MV máximo	280,00	kmol/h	1,30E+07	kJ/h
kc	-		-	
τ_i	-	minutos	-	minutos
τ_d	-	-	-	-

Tabela 44 – Configuração dos controladores implementados no FTCDC – controle regulatório

Malha de controlo	de	Pressão	Nível do condensador	Nível do ebulidor	Caudal da corrente de interligação	Caudal da corrente de interligação de
-------------------	----	---------	----------------------	-------------------	------------------------------------	---------------------------------------

				líquida	vapor
CV	P _c	h _D	h _B	L1	V3
MV	QC	D	B	L1	V3
Controlador	PIC-100	LIC-100	LIC-101	FIC-100	FIC-101
Modo de ação	Direto	Direto	Direto	Inverso	Inverso
PV	2,00 atm	50,00 %	50,00 %	225,00 kmol/h	265,00 kmol/h
SP	2,00 atm	50,00 %	50,00 %	225,00 kmol/h	265,00 kmol/h
OP	50,92 %	50,00 %	50,00 %	50,00 %	50,00 %
MV	1,96E+07 kJ/h	32,97 kmol/h	33,69 kmol/h	225,00 kmol/h	265,00 kmol/h
CV mínimo	1,00 atm	0,00 %	0,00 %	0,00 kmol/h	0,00 kmol/h
CV máximo	3,00 atm	100,00 %	100,00 %	500,00 kmol/h	500,00 kmol/h
MV mínimo	1,50E+07 kJ/h	0,00 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %
MV máximo	2,40E+07 kJ/h	100,00 %	100,00 %	100,00 %	100,00 %
kc	-	1,80	1,80	-	-
τ _i	- minutos	678,19 minutos	1041,72 minutos	- minutos	- minutos
τ _d	- minutos	- minutos	- minutos	- minutos	- minutos

Tabela 45 – Configuração dos controladores implementados no sistema FTCDC – controlo de composição

Malha de controlo	Composição produto topo	Composição produto fundo	Composição produto intermediário
CV	x _D	x _B	x _{SD}
MV	R	QR	SD
Controlador	XIC-100	XIC-101	XIC-102
Modo de ação	Inverso	Inverso	Direto
PV	0,975 fração molar	0,975 fração molar	0,950 fração molar
SP	0,975 fração molar	0,975 fração molar	0,950 fração molar
OP	49,97 %	51,48 %	50,00 %
MV	470,29 kmol/h	1,96E+07 kJ/h	33,34 kmol/h
CV mínimo	0,000 fração molar	0,000 fração molar	0,000 fração molar
CV máximo	1,000 fração molar	1,000 fração molar	1,000 fração molar
MV mínimo	370,00 kmol/h	1,50E+07 kJ/h	0,00 %
MV máximo	570,00 kmol/h	2,40E+07 kJ/h	100,00 %
kc	-	-	-
τ _i	- minutos	- minutos	- minutos
τ _d	- minutos	- minutos	- minutos

6.1.6 CRIAÇÃO DE STRIPCHARTS

Em HYSYS os denominados *stripcharts* são uma ferramenta de representação gráfica dinâmica das diferentes variáveis do processo em função do tempo, e são criados através das propriedades do controlador implementado, em *Stripcharts*. Permitem a análise gráfica em tempo real de simulação do comportamento das variáveis ao longo tempo bem como o registo dos seus valores, disponíveis em “Databook” no menu “Tools”.

6.1.7 PASSAGEM PARA SIMULAÇÃO DINÂMICA

As especificações requeridas pelas operações unitárias em simulação dinâmica são distintas das requeridas para a simulação em estado estacionário [7].

Em HYSYS o modo de estado estacionário usa operações modulares que são combinadas através de um algoritmo não sequencial. A informação é processada assim que é introduzida e os resultados de qualquer

cálculo são automaticamente propagados pelo *flowsheet*, tanto para frente como para trás. Os balanços de energia, mássicos e de composição são considerados ao mesmo tempo. As especificações de pressão, temperatura e composição são igualmente consideradas [7].

Em modo dinâmico, os balanços materiais, de energia e de composição não são considerados ao mesmo tempo. Os balanços materiais ou de pressão-caudal são resolvidos em cada passo de tempo. Os balanços de composição e de energia são, por defeito, resolvidos de forma menos frequente. A pressão e o caudal são calculados simultaneamente numa matriz de pressão-caudal ao passo que os balanços de composição e energia são resolvidos de uma forma modular sequencial [7].

Dado que o *solver* de pressão e caudal considera exclusivamente balanços de pressão (P) e caudal (F) na rede, as especificações P-F são separadas das especificações de temperatura e composição, sendo entradas que usam a regra “uma especificação P-F por corrente fronteira do *flowsheet*”. As especificações de temperatura e composição são calculadas sequencialmente para cada operação unitária e corrente de material a jusante usando o modelo de retenção (*holdup model*). Ao contrário do que ocorre no modo de estado estacionário, a informação não é processada imediatamente após introduzida/alterada. O integrador deve ser corrido após cada adição de operações unitárias no *flowsheet*. Uma vez que se corra o integrador, as condições para as correntes de saída da operação unitária adicionada são calculadas [7].

Antes de passar para simulação dinâmica, atendendo a que em qualquer planta o fluxo material ocorre devido a forças de condução e resistência, a simulação do *flowsheet* deve ser estabelecida para que sejam contabilizadas diferenças de pressão realistas em todo o processo.

6.1.7.1 ALTERAÇÕES DE ESPECIFICAÇÕES E UTILIZAÇÃO DO *DYNAMICS ASSISTANT*

Para passar ao modo dinâmico de simulação é necessário proceder à alteração das especificações do processo, nomeadamente é necessário selecionar as especificações das correntes de entrada e saída do processo, tendo que normalmente se especificam as mesmas em termos de pressão. A alimentação ao sistema, corrente F, é especificada em termos de caudal.

Com o HYSYS, é também possível proceder a este tipo de alterações de forma automática através da ferramenta *Dynamics Assistant*, que é uma ferramenta de análise que identifica as possíveis alterações a efetuar para passar a modo de simulação dinâmica bem como possíveis fontes de conflito que poderão conduzir a erros quando em modo dinâmico de simulação.

As alterações propostas para cada item identificado, descritas nos respetivos separadores das propriedades do *Dynamic Assistant*, podem ou não ser aceites atendendo à análise e avaliação das mesmas.

Para ambos os casos em estudo a identificação das alterações a efetuar foi realizada através do *Dynamics Assistant* sendo aceites a alteração/introdução das especificações das correntes do processo.

Em ambos sistemas, tradicional e FTCDC foram identificados dois itens a ter a consideração, para além da alteração das especificações de corrente, os quais se encontram indicados, a título de exemplo para o sistema tradicional, na [figura 47](#).

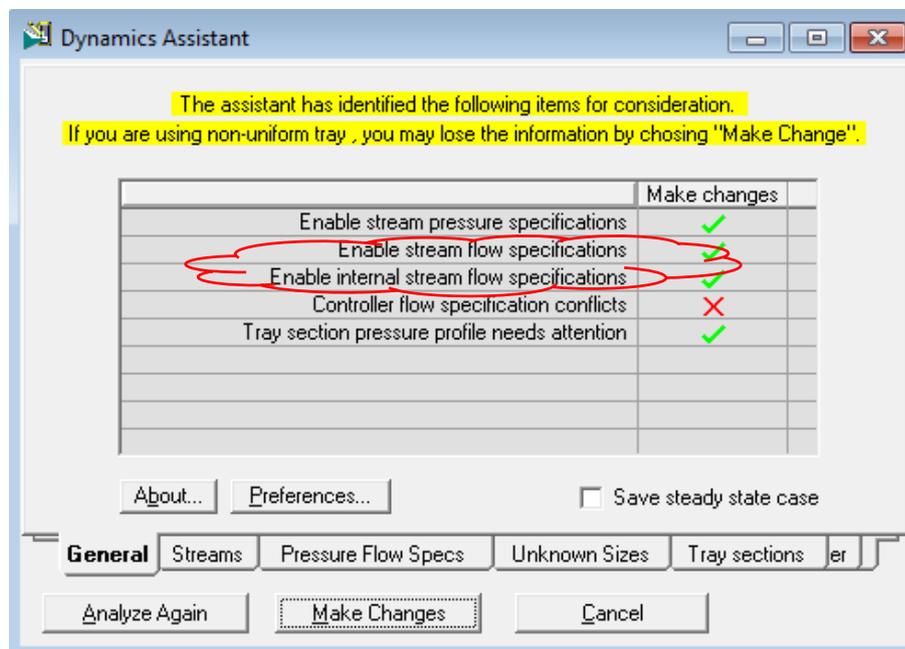


Figura 47 – Página geral do *Dynamics Assistant* para o sistema tradicional

O conflito identificado relativo à especificação de caudal do controlador, quarto item, é resolvido quando se permite a especificação de caudal da corrente interna, ou seja da corrente de refluxo, por aceitação da alteração apresentada no terceiro item.

Relativamente ao último item identificado, este diz respeito às perdas de pressão das secções de pratos implementadas, calculadas através do *tray sizing*, para o modo de estado estacionário, em que na análise realizada pelo *dynamics assistant*, tais valores são inconsistentes com os calculados pelo modo dinâmico, segundo os parâmetros de dimensionamento de ambas as colunas igualmente estabelecidos através do *tray sizing* ([figura 48](#)). Esta diferença está relacionada com o cálculo dos fatores k de perda de carga dos caudais internos. Mantendo selecionado o método de cálculo predefinido para os fatores k, o método de diâmetro da torre, na simulação em modo dinâmico verifica-se uma alteração significativa dos perfis de pressão relativamente aos obtidos para a simulação em modo de estado estacionário, o que faz com que sejam necessárias algumas iterações até atingir a estabilização da operação da coluna quando na passagem da simulação para modo dinâmico, verificando-se também uma variação significativa dos parâmetros controlados relativamente aos resultados de estado estacionário mantendo os mesmos valores para as variáveis manipuladas.

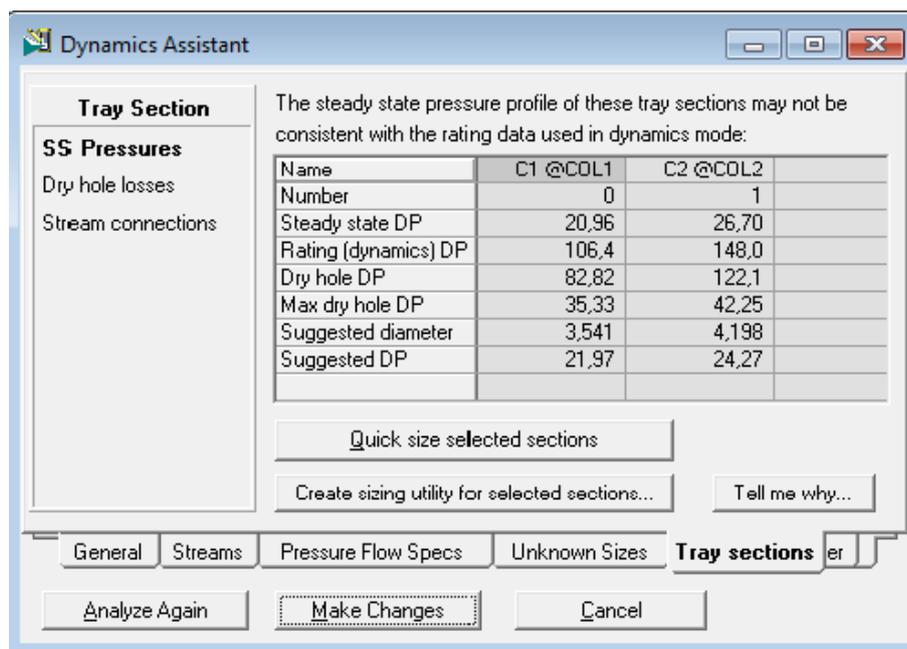


Figura 48 – Página relativa às secções de pratos do *Dynamics Assistant* para o sistema ST.

A função de ajuda do HYSYS sugere algumas das possíveis alterações a efetuar. Estas implicam a alteração do dimensionamento das colunas ou dos seus perfis de pressão. Adicionalmente, e conforme foi aplicado no presente trabalho, é possível o cálculo dos fatores k usando um método interno do HYSYS de acordo com os resultados de estado estacionário através das propriedades das secções, consultáveis no *subflowsheet* da respetiva coluna, no separador *Dynamics*.

6.1.8 CORRER A SIMULAÇÃO DINÂMICA

Após alteração do modo de simulação em HYSYS para modo dinâmico o “Integrator” é usado para fazer correr a simulação dinâmica. Este permite controlo de alguns parâmetros usados no HYSYS, como o passo de tempo e tempo de paragem da simulação, mas também alguns parâmetros avançados como as velocidades de execução dos diferentes balanços, entre outros.

6.1.8.1 PARAMETRIZAÇÃO DO INTEGRADOR

O HYSYS resolve todas as equações usando o método de integração implícito de Euler, tendo que nas suas propriedades vários parâmetros de integração predefinidos que podem ser alterados.

Através da realização de diferentes simulações e por análise dos seus resultados ao longo do tempo verificou-se a necessidade de ajustar alguns parâmetros de integração nomeadamente o passo de integração, disponível nas propriedades gerais (em *General*) do “Integrator” e também as velocidades de cálculo dos balanços, especificamente para o sistema FTCDC, nas propriedades de execução (em *Execution*), conforme se apresenta a título de exemplo na [figura 49](#).

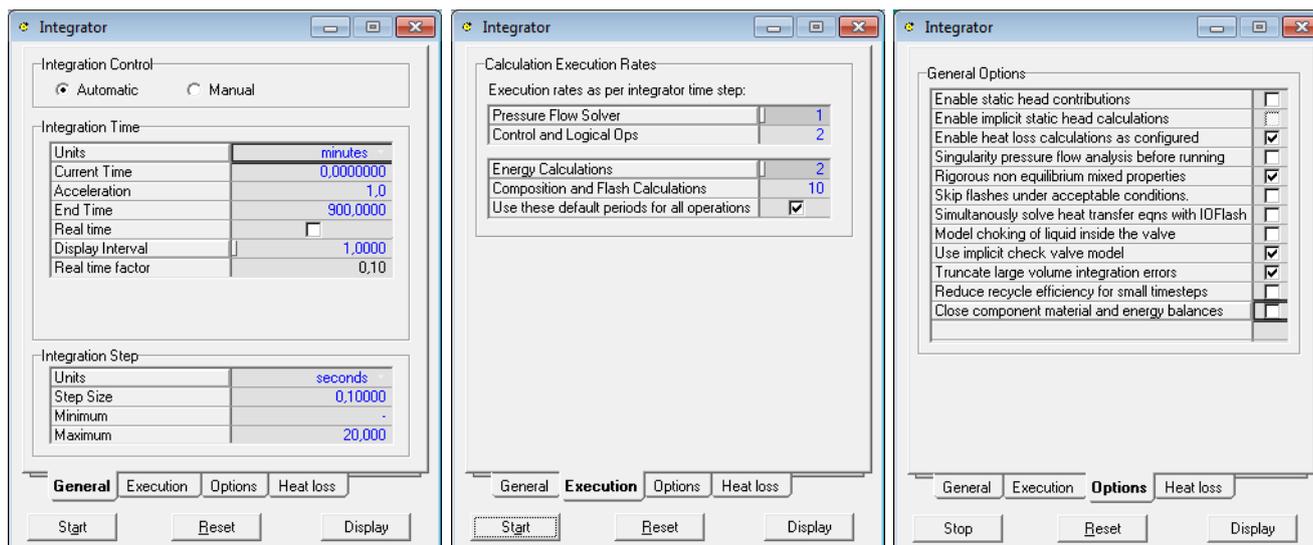


Figura 49 – Propriedades gerais, de execução e opções do “Integrator” para o sistema ST

Relativamente ao passo de integração, normalmente para processos ou operações mais complexas é necessário diminuir o passo de integração para garantir a correta integração do modelo, sendo facilmente identificável a necessidade deste ajuste uma vez que o próprio simulador apresenta mensagens de erro durante a simulação no caso de o passo ter um valor demasiado elevado.

No que diz respeito à velocidade dos cálculos dos balanços, para o sistema FTCDC, verificou-se a necessidade de diminuir o valor associado à velocidade de cálculos de composição e *flash* para 4 (sendo o valor predefinido 10) e adicionalmente nas opções (em *Options*) do “Integrator” foi removida a seleção do truncamento de largos erros de integração de volumes e selecionado o fecho dos balanços de materiais e de energia, uma vez que foi detetado nos resultados obtidos durante as primeiras simulações deste sistema valores díspares relativos aos caudais das correntes de saída do prefracionador.

No presente trabalho a alteração da parametrização, foi efetuada por tentativa e erro, atendendo ao tipo de erros detetados. Das simulações inicialmente efetuadas concluiu-se que, apesar de vir mencionado no manual “Aspen HYSYS - Unit Operations Guide v7.2” que devem ser mantidos os valores de parametrização do “Integrator”, atendendo às mensagens de erro do simulador bem como aos resultados dos balanços, nomeadamente através da avaliação dos caudais obtidos durante a simulação verificou-se a necessidade proceder à alteração desta parametrização.

6.1.8.2 ESTABILIZAÇÃO DA SIMULAÇÃO

Para obter a estabilização dos processos em simulação procedeu-se ao fecho das malhas de controlo regulatório, de pressão e níveis. Adicionalmente, no sistema FTCDC foram fechadas as malhas de controlo dos caudais de interligação de forma a estabilizar a operação do prefracionador.

Os controladores de pressão e caudal foram parametrizados de acordo com as linhas de orientação disponíveis na literatura [7], tendo que para:

- Malhas de controlo de caudal é comum o uso de controladores PI, cujos valores de parametrização para o componente proporcional tipicamente se encontra entre 0,4 e 0,65 e o componente integral entre 0,05 e 0,25 minutos;
- Malhas de controlo da pressão gasosa é igualmente comum o uso de controladores PI, cujo componente proporcional deve ser estabelecido entre 2 e 10 e o componente integral entre 2 e 10 minutos.

No presente estudo para efeitos de inicialização da simulação dinâmica com controlo regulatório em modo automático nas malhas de controlo de pressão usou-se controladores PI com máximo valor de ganho indicado, 10 (componente proporcional) e o menor valor de tempo integral, 2 minutos, de forma a assegurar uma rápida resposta das malhas de controlo, dada a influência dos perfis de pressão das colunas na separação. Nas malhas de controlo de caudal, apenas usadas no sistema FTCDC, foram parametrizados controladores PI, estabelecendo como ganho do controlador 0,5 e tempo integral de 0,1 minutos, conduzindo desta forma a uma rápida resposta do controlador às variações de caudal, de forma a manter de forma relativamente estável a operação do prefracionador.

No arranque da simulação do sistema FTCDC verificou-se adicionalmente a necessidade integrar no sistema de controlo o controlo do caudal da corrente lateral de produto, verificada a variação de composição nesta corrente devida em parte á variação de valor do seu caudal relativamente ao valor de estado estacionário, o que se deve à variação dos perfis de pressão entre a simulação em modo de estado estacionário e em modo dinâmico.

Assim, alterando a configuração de controlo inicialmente desenhada, é aplicado o controlo em cascata da composição do produto intermediário, por manipulação do valor de caudal da sua corrente que por sua vez é controlado através da manipulação da abertura da válvula associada á respetiva corrente, com a introdução de uma malha adicional de controlo ([tabela 46](#); [figura 50](#)).

Tabela 46 – Alterações ao sistema de controlo implementado no sistema FTCDC: configurações dos controladores

Malha de controlo	Composição produto intermediário		Caudal da corrente de produto intermediário	
CV	x _{SD}		SD	
MV	FIC-102		SD	
Controlador	XIC-102		FIC-102	
Modo de ação	Direto		Inverso	
PV	0,950	fração molar	33,34	kmol/h
SP	0,950	fração molar	33,34	kmol/h
OP	50,00	%	50,00	%
MV	33,34	kmol/h	33,34	kmol/h
CV mínimo	0,000	fração molar	0,00	kmol/h
CV máximo	1,000	fração molar	66,00	kmol/h
MV mínimo	0,00	%	0,00	%
MV máximo	100,00	%	100,00	%
kc	-		0,5	
τ _i	-	minutos	0,1	minutos
τ _d	-	minutos	-	minutos

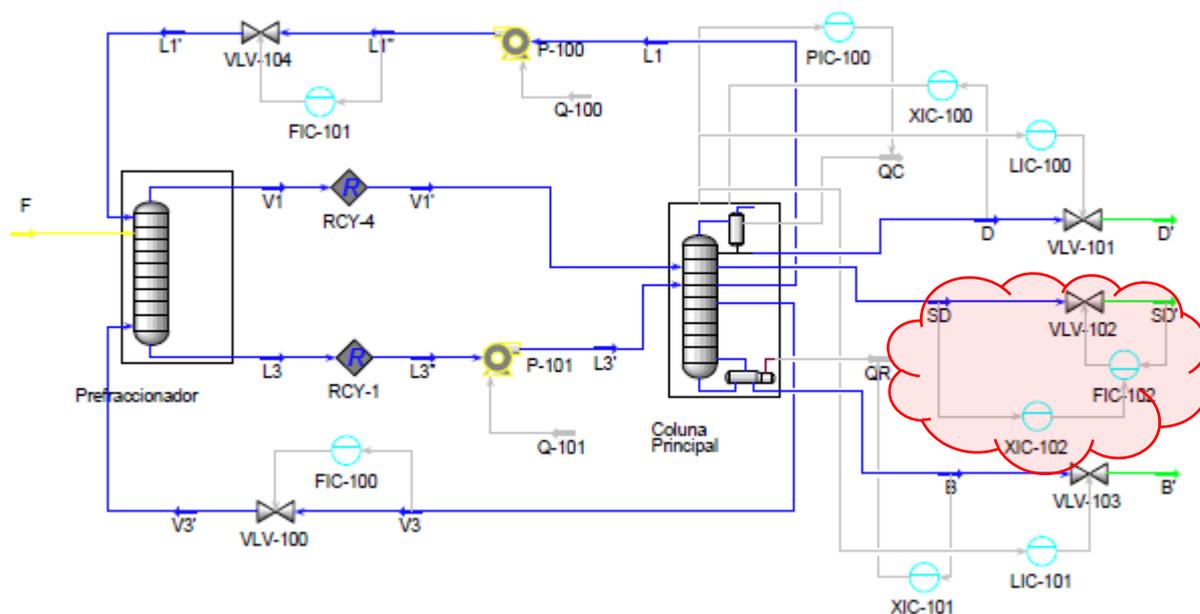


Figura 50 – Flowsheet do sistema FTDC – alteração à configuração da malha de controlo da composição do produto intermediário

6.1.9 SINTONIZAÇÃO DOS CONTROLADORES

Os controladores PID são os controladores *feedback* mais comumente usados na indústria, com três parâmetros sintonizáveis, o parâmetro proporcional, genericamente considerado o principal componente da equação do controlador, e os parâmetros integral e derivativo que devem ser usados para afinar a resposta proporcional. O componente integral assegura que o erro de rastreamento é assintoticamente reduzido a zero, enquanto o componente derivativo confere uma capacidade preditiva potencialmente aumentando o desempenho [2].

O tema da sintonização de controladores PID, apesar da sua simplicidade, tem sido discutido em vários livros e múltiplos artigos de investigação desde o trabalho de referência de Ziegler e Nichols (1942) [2].

Para sintonização dos controladores são usados quer métodos *on-line*, implementados com controladores *on-line*, ou com métodos baseados em modelos, que se dependem de modelos do processo. A principal vantagem dos métodos *on-line* é de que a sintonização é feita com controlo em malha fechada não sendo necessário o modelo do processo, no entanto estes provêm parâmetros iniciais de controlo que são usualmente melhorados iterativamente durante a operação. Além disso, as regras típicas de sintonia *on-line* aplicam-se estritamente a malhas de controlo SISO. Para sistemas de controlo multivariável é frequentemente necessária dessintonização para prevenir a introdução de instabilidade devido a interações de processo [2].

É também possível encontrar na literatura linhas de orientação relativas aos intervalos de valores para parametrização dos controladores PID para determinados processos. No “Aspen HYSYS Dynamics - User Guide v7.2” [7] é apresentada uma lista de parâmetros de sintonização geral para vários processos, otimizados para um critério de erro de razão de decaimento de 1/4, que inclui controlo de caudal, de pressão de líquido, pressão de gás, nível de líquido, e controlo de temperatura.

Associado às operações “PID Controller” do HYSYS é possível a parametrização do controlador através da página *autotuner* disponível nas suas propriedades, que inclui uma função de autossintonização que provê parâmetros de sintonização de controladores PID baseados no design do ganho regular e fase da margem [66].

6.1.9.1 AUTOTUNER

A função *autotuner* do HYSYS provê os parâmetros de sintonia para o controlador PID baseado no *design* do ganho e margem de fase. O *autotuner* em si pode ser visto como um objeto de controlo que foi integrado no controlador PID e é baseado numa técnica de relé de *feedback* incorporando por defeito um relé com histerese (h) [7]. Os relés são bastante comuns em automação e controle [66], e o método de autossintonização de relé de *feedback* para sintonização automática de controladores PID de Åström e Hägglund [67] foi um dos primeiros a ser comercializado e manteve-se atrativo devido á sua simplicidade e robustez[68]. O digrama de blocos de um sistema de relé de *feedback* padrão apresenta-se na [figura 51](#).

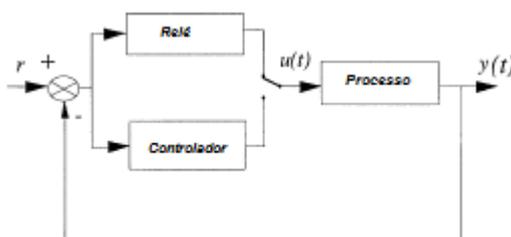


Figura 51 – Sistema do relé de feedback

Na [figura 52](#) apresenta-se um exemplo de um relé com uma amplitude (d) e uma histerese (h) sendo representado num gráfico da saída $u(t)$ versus o erro de entrada no relé $e(t)$. Este tipo de relé que é uma não-linearidade de valor duplo, às vezes referido como tendo memória. Noutras palavras, o valor da saída depende da direção em que o erro do processo está a chegar.

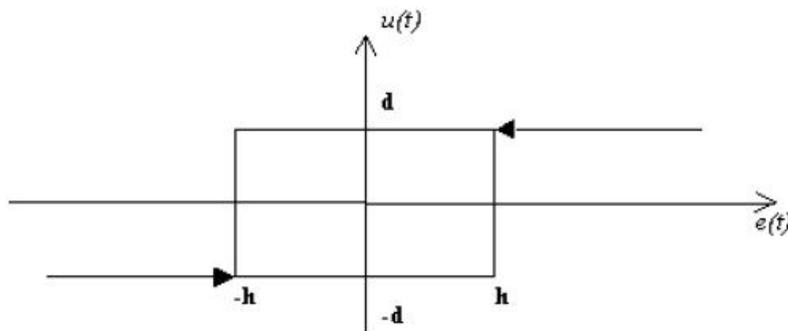


Figura 52 – Representação gráfica da saída $u(t)$ versus a entrada de erro no relé $e(t)$ de um relay com uma amplitude (d) e uma histerese (h)

Fonte: Aspen HYSYS - Unit Operations Guide v7.2. (2010)[66]

Os parâmetros do controlador PID que são obtidos a partir do *autotuner* baseiam-se numa metodologia de desenho que utiliza uma margem de ganho com um ângulo de fase especificado. Este *design* é muito similar à do ganho regular e metodologia de margem de fase, exceto que é mais exato uma vez que o relê tem a

capacidade de determinar pontos no domínio da frequência com precisão e rapidez. Além disso, a experiência com relé é controlada e não leva muito tempo durante o ciclo de ajuste [7].

A página *autotuner* (figura 53), acessível através das propriedades dos controladores implementados, permite especificar os parâmetros de auto-ajuste, contendo dois grupos de parâmetros:

- Parâmetros do *autotuner*, requeridos para o cálculo dos parâmetros do controlador;
- Resultados do *autotuner*, onde são apresentados os parâmetros calculados para o controlador, existindo a opção de aceitar os parâmetros calculados como os parâmetros correntes do controlador, de forma manual ou automática.

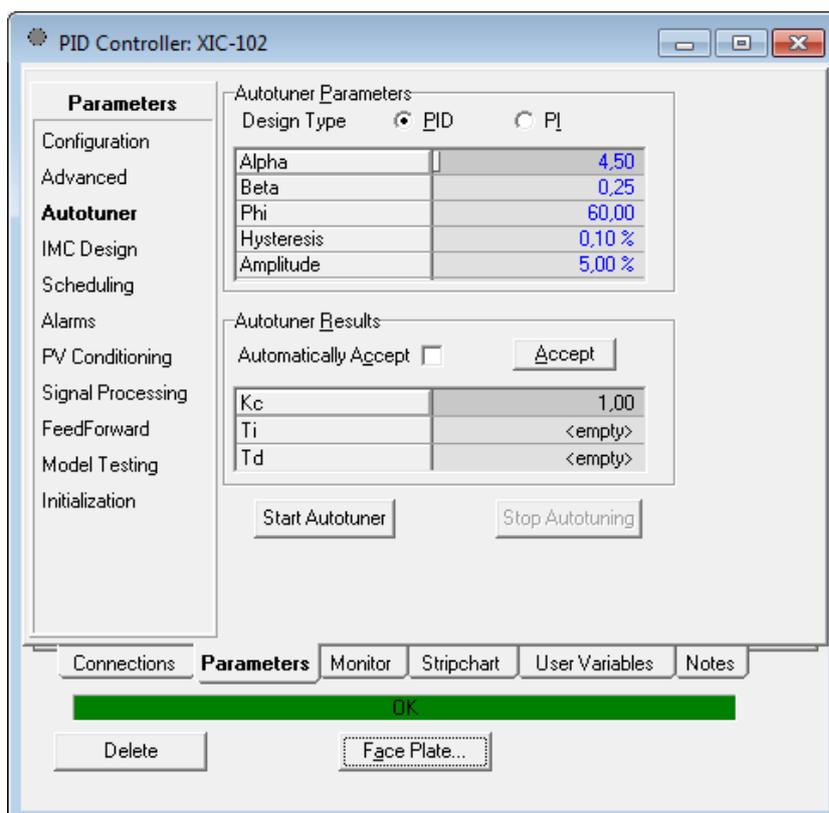


Figura 53 – Página do *autotuner* das propriedades do “PID Controller” do HYSYS

No grupo dos parâmetros do *autotuner*, pode-se especificar o tipo de controlador a parametrizar, PID ou PI e bem como parâmetros associados ao cálculo dos parâmetros do controlador, os quais se encontram com valores predefinidos e que para o efeito podem ser usados no seu valor predefinido (figura 53) ou alterados dentro das gamas de valores se apresentam na tabela 47.

Tabela 47 – Parâmetros do *autotuner* integrado no “PID Controller” do HYSYS

Parâmetros	Intervalo de valores
Razão (τ_i/τ_d) (Alpha)	$3.0 \leq \alpha \leq 6.0$
Razão de Ganho (Beta)	$0.10 \leq \beta \leq 1.0$
Fase do ângulo (Phi)	$30^\circ \leq \varphi \leq 65^\circ$
Histerese do Relé (h)	$0.01\% \leq h \leq 5.0\%$
Amplitude do Relé (d)	$0.5\% \leq d \leq 10.0\%$

No presente trabalho a amplitude e histerese do relé foram manipuladas atendendo às características das malhas a sintonizar. Na sintonização de colunas de destilação é necessário atender á forte não linearidade do processo e à interação entre as malhas de controlo de composição.

Normalmente, usando sistemas de controlo tradicionais nas colunas de destilação, os controladores de composição são sintonizados para intervalos próximos do ponto de operação, dada a não linearidade deste tipo de processos, motivo pelo qual se reduziu a amplitude do relé predefinida para variações das variáveis manipuladas da ordem dos 2% no sistema tradicional e para 1% no sistema FTCDC. Acompanhando esta redução, é mantida a relação entre o valor de histerese e de amplitude reduzindo de forma proporcional o valor de histerese.

Atendendo a resultados de estudos conduzidos através de simulação de diferentes valores referentes para a fase de ângulo, razão de ganho e razão (τ_i/τ_d), optou-se por manter os seus valores nos valores predefinidos do HYSYS.

6.2 RESULTADOS DE SIMULAÇÃO DINÂMICA E CONTROLO

6.2.1 INICIALIZAÇÃO E ESTABILIZAÇÃO

Na inicialização da simulação de ambos os sistemas em modo dinâmico foi colocado em modo automático as malhas de controlo associadas ao controlo regulatório, nomeadamente as malhas de pressão, nível e caudal, estas últimas respeitantes exclusivamente ao sistema FTCDC.

Na [figura 54](#) e [figura 55](#) apresentam-se as respostas obtidas na inicialização da simulação em modo dinâmico com o controlo regulatório em modo automático para as colunas 1 e 2 do sistema tradicional⁷.

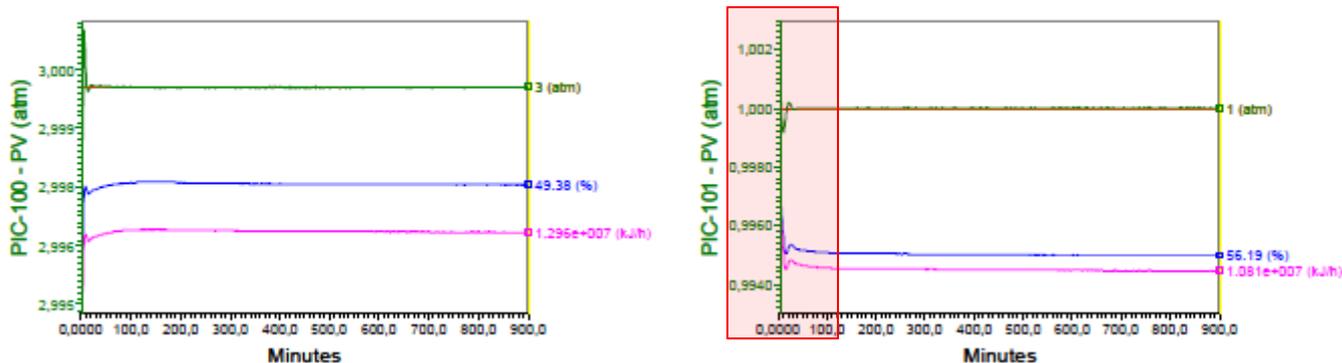


Figura 54 – Respostas das malhas de controlo de pressão em modo automático (PV, SP, OP e MP) do sistema ST

⁷ Para todos os *stripcharts* apresentados:

- As linhas verdes e vermelhas dizem respeito á variável do processo, ao valor de processo e set-point, respetivamente;
- As linhas rosa e azuis dizem respeito á variável manipulada, ao valor de processo á percentagem de abertura da válvula de controlo associada.

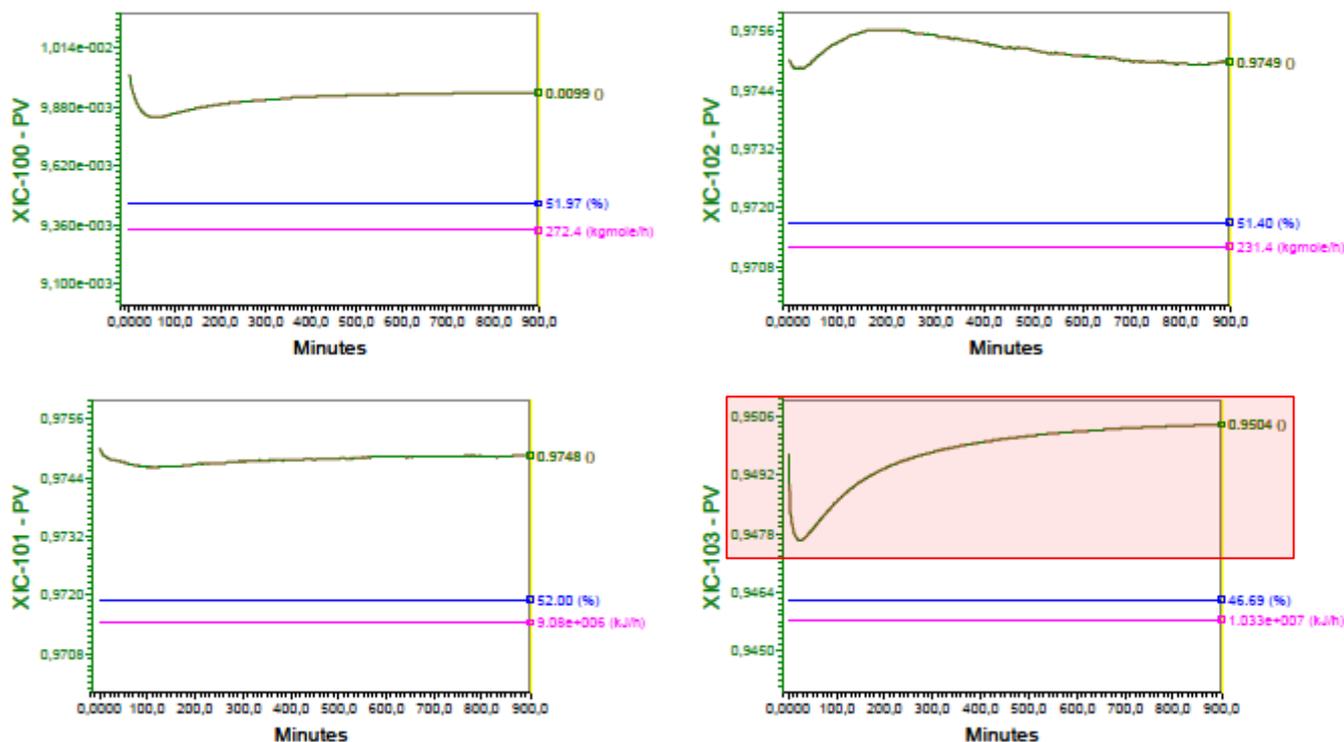


Figura 55 – Respostas das malhas de controlo de composição em modo manual (PV, SP, OP e MP) do sistema ST

Dos resultados obtidos para a malha de controlo de pressão (PIC-100), à exceção dos momentos iniciais, não se verificam alterações significativas na operação da coluna 1 relativamente ao estado estacionário para o mesmo ponto de operação, obtendo-se respostas relativamente estáveis.

As malhas de controlo de composição, em modo manual (XIC-100, para o produto de topo e XIC-101, para o produto de fundo), sofrem igualmente uma ligeira oscilação relativamente às variáveis de processo controladas uma vez que são afetadas pela perturbação inicial no perfil de pressão e com o controlo em modo manual, mantendo as variáveis manipuladas no seu valor original, a sua recuperação ao estado estacionário é mais demorada relativamente à pressão.

Na coluna 2 verificam-se oscilações iniciais relativamente mais acentuadas na malha de controlo da pressão (PIC-101) bem como nas malhas de controlo de composição (XIC-102, para o produto de topo e XIC-103 para produto de fundo). À partida este comportamento deve-se às oscilações iniciais na coluna 1 que se repercutem à posteriori na coluna 2, uma vez que a sua alimentação é a corrente de produto de topo da coluna 1.

De simulações conduzidas com o controlo regulatório em modo manual e em modo automático verifica-se que estas oscilações na resposta da pressão estão sobretudo associadas à necessidade de um maior número de cálculos iterativos até estabilização da simulação em modo dinâmico, o que por sua vez afeta as respostas obtidas nas malhas de controlo de composição e de nível, com maior impacto nas malhas no fundo da coluna uma vez que o cálculo do perfil de pressão é efetuado do topo para o fundo, sendo neste extremo onde se verificam as maiores variações relativamente ao estado estacionário. A inicialização com as malhas de

controlo regulatório em modo automático permite uma mais rápida recuperação do sistema ao seu ponto real de operação⁸.

Na [tabela 48](#) apresentam-se os valores obtidos em modo dinâmico para as respostas das malhas de controlo implementadas no sistema tradicional, nomeadamente relativamente ao controlo de pressão e composição, e para efeitos de comparação os resultados obtidos previamente em modo de estado estacionário.

Tabela 48 – Resultados de simulação em modo de estado estacionário (MEE) e em modo dinâmico (MD) após estabilização para o sistema ST

Variável	Modo de simulação	PIC-100	XIC-100	XIC-101	PIC-101	XIC-102	XIC-103
SP	MEE	3,00 atm	0,0100	0,9750	1,00 atm	0,9750	0,9500
	MD	3,00 atm	-	-	1,00 atm	-	-
PV	MEE	3,00 atm	0,0100	0,9750	1,00 atm	0,9750	0,9500
	MD	3,00 atm	0,0099	0,9748	1,00 atm	0,9749	0,9503
MV	MEE	1,297E+7 kJ/h	272,4 kmol/h	9,08E+6 kJ/h	1,081E+7 kJ/h	231,4 kmol/h	1,033E+7 kJ/h
	MD	1,296E+7 kJ/h	272,4 kmol/h	9,08E+6 kJ/h	1,081E+7 kJ/h	231,4 kmol/h	1,033E+7 kJ/h
OP (%)	MEE	49,40	51,97	52,00	56,17	51,40	46,69
	MD	49,38	51,97	52,00	56,19	51,40	46,69

Conforme se pode observar, no final do tempo de estabilização (900 minutos de simulação), relativamente ao controlo de pressão, que se encontra em modo automático, a variação da variável manipulada não é significativa mantendo o valor de pressão no seu valor de *set-point*. Relativamente ao controlo de composição, cujas malhas se encontram em modo manual de controlo, mantendo os valores das variáveis manipuladas no valor determinado em modo de estado estacionário, também não se verifica significativo afastamento dos valores de especificação.

Na [figura 56](#) e [figura 57](#) apresentam-se as respostas da malha de controlo de pressão (PIC-100) em modo automático das malhas de controlo de composição (XIC-100 para o produto de topo, XIC-101 para o produto de fundo e XIC-102 para o produto intermediário) em modo manual, do sistema FTCDC para a inicialização da sua simulação em modo de dinâmico.

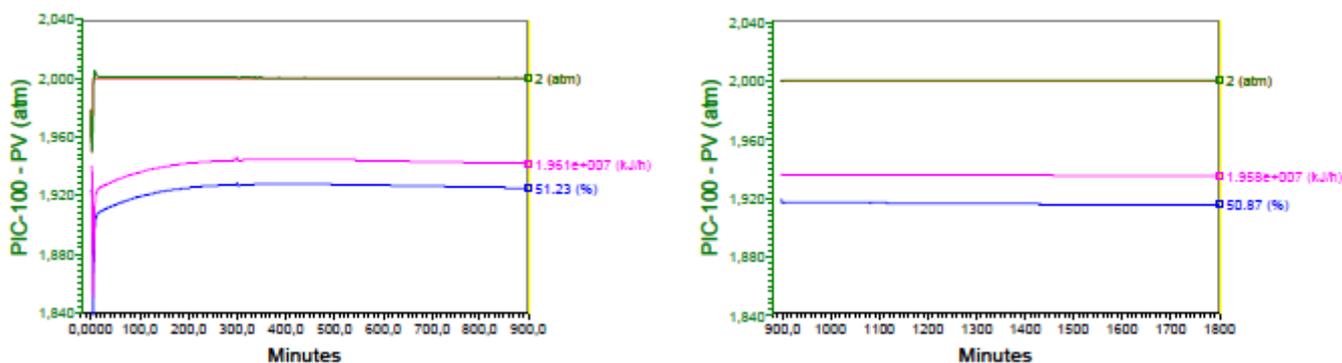


Figura 56 – Respostas das malhas de controlo de pressão em modo automático (PV, SP, OP e MP) do sistema FTCDC

⁸ Os resultados de inicialização para o sistema ST podem também ser consultados no ficheiro HYSYS:

- [ST P8.1 CONTROLO REGULATÓRIO EM MODO AUTOMÁTICO \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)

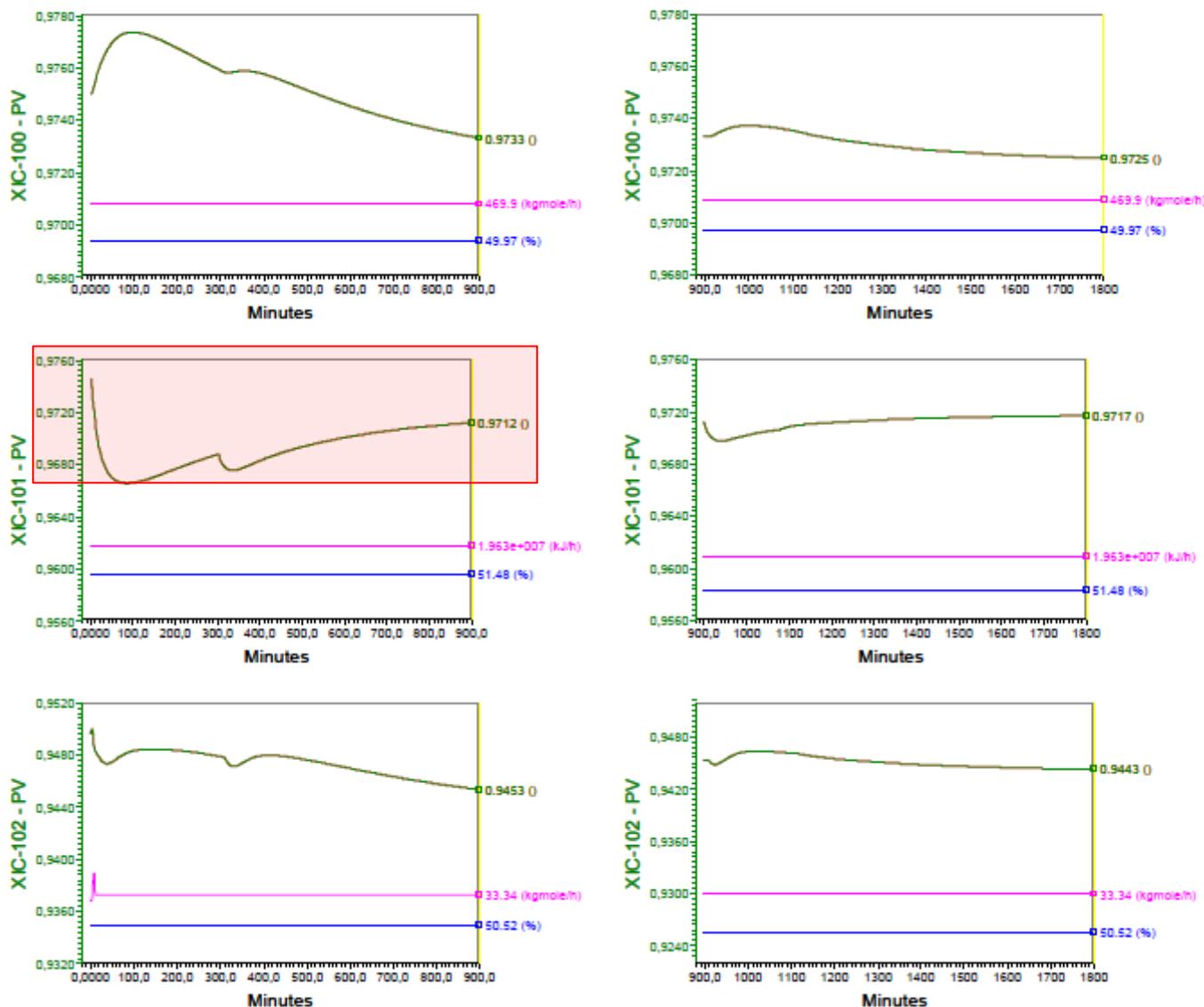


Figura 57 – Respostas das malhas de controlo de composição em modo manual (PV, SP, OP e MP) do sistema FTCDC

Ao contrário do verificado no sistema tradicional, considerando a inicialização da simulação em modo dinâmico, o sistema FTCDC apresenta oscilações mais significativas nas respostas obtidas, resultado da variação dos perfis de pressão, sendo necessária para sua estabilização a implementação do controlo regulatório em modo automático.

Relativamente às respostas das malhas de composição para além de se verificarem significativas oscilações, o tempo de estabilização das respostas destas malhas (1800 minutos de simulação) é significativamente maior comparativamente com o sistema tradicional.

Assim, mais que do que aos cálculos iterativos iniciais, os resultados obtidos para o sistema FTCDC devem-se uma alteração relevante dos perfis de pressão da sua operação, motivo pelo qual, como indicado no ponto 6.1.8.2 se verificou a necessidade da implementação de uma malha de controlo adicional (FIC-102) para assegurar a estabilização do valor de caudal da corrente de produto lateral (associada à malha

representada por XIC-102). Esta alteração de perfis de pressão resulta, após estabilização, na obtenção de valores de composição distintos dos obtidos em estado estacionário para o mesmo ponto de operação⁹.

Na [tabela 49](#) apresentam-se os valores obtidos em modo dinâmico para as respostas das malhas de controlo implementadas no sistema FTCDC, nomeadamente relativamente ao controlo de pressão e composição, e para efeitos de comparação os resultados obtidos previamente em modo de estado estacionário.

Tabela 49 – Resultados de simulação em MEE e MD após estabilização para o sistema FTCDC

Variável	Modo de simulação	PIC-100	XIC-100	XIC-101	XIC-103
SP	MEE	2,00 atm	0,9750	0,9750	0,9500
	MD	2,00 atm	-	-	-
PV	MEE	2,00 atm	0,9750	0,9750	0,9500
	MD	2,00 atm	0,9725	0,9717	0,9443
MV	MEE	1,958E+7 kJ/h	469,9 kmol/h	1,963E+7 kJ/h	33,34 kmol/h
	MD	1,958E+7 kJ/h	469,9 kmol/h	1,963E+7 kJ/h	33,34 kmol/h
OP (%)	MEE	50,92	49,97	51,48	50,52
	MD	50,87	49,97	51,48	50,52

Para além do tempo de estabilização superior, conforme já mencionado, o afastamento dos valores das variáveis do processo relativamente ao controlo de composição é significativamente superior ao verificado no sistema tradicional, ainda que em termos da malha de controlo não se verifique tal desvio.

6.2.2 SINTONIZAÇÃO DOS CONTROLADORES

Conforme mencionado nos pontos [6.1.5](#) e [6.1.8.2](#) os controladores das malhas de controlo de nível (cujos parâmetros dos controladores são automaticamente introduzidos pelo HYSYS), de pressão e de caudal (parametrizados de acordo com as linhas de orientação disponíveis na literatura) são parametrizados previamente à mudança para simulação em modo dinâmico.

A parametrização dos controladores das malhas de controlo de composição é obtida através do *Autotuner*, parametrizado segundo a [tabela 50](#) e [tabela 52](#) para o sistema tradicional e sistema FTCDC, respetivamente. Os resultados de sintonização, para controladores do tipo PI, tipicamente usados nas malhas de controlo de composição de colunas de destilação convencionais, apresentam-se na [tabela 51](#) e [tabela 53](#)¹⁰.

⁹ Os resultados de inicialização para o sistema FTCDC podem também ser consultados no ficheiro HYSYS:

- [FTCDC P8.1 INICIALIZAÇÃO - CONTROLO REGULATÓRIO EM MODO AUTOMÁTICO \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)
- [FTCDC P8.2 ESTABILIZAÇÃO - CONTROLO REGULATÓRIO EM MODO AUTOMÁTICO \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)

¹⁰ Os resultados de sintonização dos sistemas ST e FTCDC podem ser consultados nos seguintes ficheiros HYSYS:

- [ST P9.0 SINTONIZAÇÃO - COLUNA 1 - D1 \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)
- [ST P9.1 SINTONIZAÇÃO - COLUNA 1 - B1 \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)
- [ST P9.3 SINTONIZAÇÃO - COLUNA 2 - D2 \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)
- [ST P9.4 SINTONIZAÇÃO - COLUNA 2 - B2 \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)
- [FTCDC P9.0.0 SINTONIZAÇÃO - COLUNA PRINCIPAL - D.HSC](#)
- [FTCDC P9.0.1 SINTONIZAÇÃO - COLUNA PRINCIPAL - B.HSC](#)
- [FTCDC P9.0.2 SINTONIZAÇÃO - COLUNA PRINCIPAL - SD.HSC](#)

Tabela 50 – Parametrização do *autotuner* para sintonia dos controladores das malhas de controlo de composição do sistema ST

Controladores	XIC-100, 101, 102 e 103
Parâmetros	
Razão (Ti/Td) (Alpha)	4,5
Razão de Ganho (Beta)	0,25
Fase do ângulo (Phi)	60
Histerese do Relé (h) (%)	0,04
Amplitude do Relé (d) (%)	2

Tabela 51 – Parametrização dos controladores PI associados às malhas de controlo de composição do sistema ST

Malhas de controlo	Coluna 1		Coluna 2	
	Composição produto de topo	Composição produto de fundo	Composição produto de topo	Composição produto de fundo
Controladores PI	XIC-100	XIC-101	XIC-102	XIC-103
kc	0,27	3,34	4,06	3,24
τ_i	32,83	68,46	69,61	102,06
τ_d	0	0	0	0

Tabela 52 – Parametrização do *autotuner* para sintonia dos controladores das malhas de controlo de composição do sistema FT CDC

Controladores	XIC-100 e 101	XIC-102
Parâmetros		
Razão (Ti/Td) (Alpha)	4,5	4,5
Razão de Ganho (Beta)	0,25	0,25
Fase do ângulo (Phi)	60	60
Histerese do Relé (h) (%)	0,02	0,04
Amplitude do Relé (d) (%)	1	2

Tabela 53 – Parametrização dos controladores PI associados às malhas de controlo de composição do sistema FT CDC

Malhas de controlo	Coluna Principal		
	Composição produto de topo	Composição produto de fundo	Composição produto intermediário
Controladores PI	XIC-100	XIC-101	XIC-102
kc	1,58	3,36	4,43
τ_i	84,72	61,82	12,31
τ_d	0	0	0

Na [figura 58](#) apresenta-se a título de exemplo a representação gráfica das respostas registadas da malha XIC-102 durante o processo de sintonia do respetivo controlador.

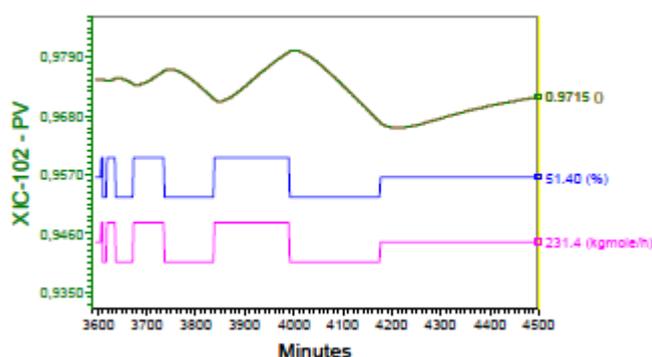


Figura 58 – Stripchart da malha de controlo XIC-102 do sistema ST - sintonia do controlador

6.2.2.1 CONTROLO EM MODO AUTOMÁTICO

Após sintonia dos controladores, as malhas de controlo de composição de cada coluna, previamente em modo manual, foram colocadas em modo automático e inserido o respetivo *set-point* para a variável controlada de acordo com as especificações de estado estacionário. Os *stripcharts* que se apresentam nas figuras seguintes dizem respeito às respostas obtidas com a inserção do *set-point* para a variável controlada em cada malha de controlo de composição.

Na [figura 59](#) apresentam-se a respostas obtidas nas malhas de controlo de composição da coluna 1 (à esquerda) e da coluna 2 (à direita) do sistema tradicional¹¹.

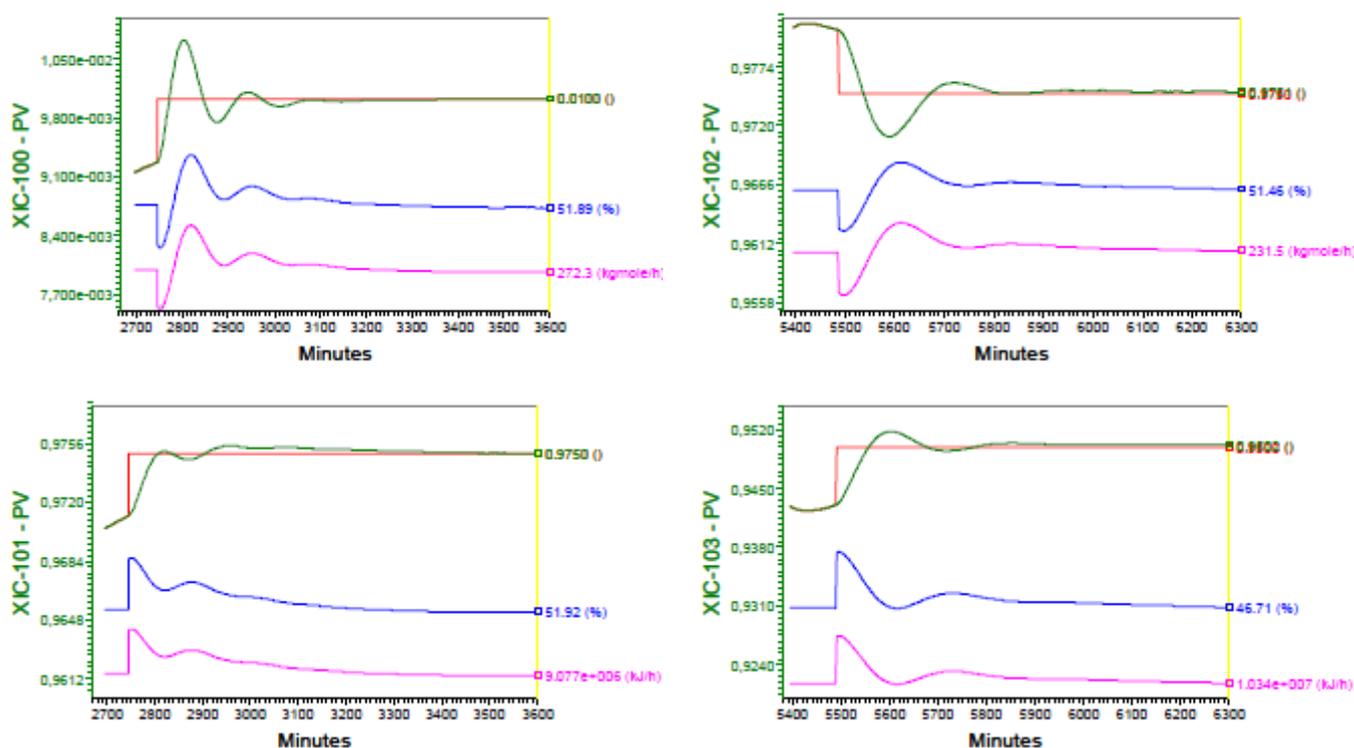


Figura 59 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema ST em modo automático

O afastamento inicial (relativamente ao seu ponto de operação na inicialização) dos valores de especificação resulta do processo de sintonização.

Ainda que as respostas obtidas à introdução de um *set-point* (com diferente valor do corrente valor da variável controlada) não partam de um ponto de operação estabilizado, é possível verificar que, genericamente e resultado da sintonia efetuada, as respostas dos controladores à alteração introduzida, com alteração do valor da variável manipulada, são bastante “agressivas”, observando-se oscilação das respostas e *overshoot* da variável controlada. Este efeito é típico dos controladores PI e será mais ou menos acentuado consoante o menor ou maior valor do tempo integral (τ_i) e sua relação com os tempos de resposta do

¹¹Os resultados com controlo em modo automático após sintonização das malhas de controlo de composição para o sistema ST podem ser consultados nos seguintes ficheiros HYSYS:

- [ST P9.2 ESTABILIZAÇÃO - COLUNA 1 - CONTROLO EM MODO AUTOMÁTICO \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)
- [ST P9.5 ESTABILIZAÇÃO - COLUNA 2 - CONTROLO EM MODO AUTOMÁTICO \(CONFIGURAÇÃO-LV\).HSC](#)

processo (em malha aberta). O aumento do tempo integral, promovendo uma resposta mais lenta, bem como a diminuição do ganho determinado para o controlador, poderia evita o fenómeno de *overshoot* verificado nas respostas das variáveis controladas de composição.

Através dos resultados apresentados na [tabela 54](#), obtidos após colocação das malhas de controlo de composição em modo automático com introdução dos respetivos *set-points* e decorridos 900 minutos de tempo de simulação, conclui-se que não existe diferença significativa entre os resultados obtidos em modo de estado estacionário relativamente aos valores das variáveis manipuladas, para cumprir as especificações para as variáveis controladas de composição.

Tabela 54 – Resultados de simulação em MEE e em MD com controlo em modo automático do sistema ST

Variável	Modo de simulação	PIC-100	XIC-100	XIC-101	PIC-101	XIC-102	XIC-103
SP	MEE	3,00 atm	0,0100	0,9750	1,00 atm	0,9750	0,9500
	MD	3,00 atm	-	-	1,00 atm	-	-
PV	MEE	3,00 atm	0,0100	0,9750	1,00 atm	0,9750	0,9500
	MD	3,00 atm	0,0100	0,9750	1,00 atm	0,9751	0,9502
MV	MEE	1,297E+7 kJ/h	272,4 kmol/h	9,08E+6 kJ/h	1,081E+7 kJ/h	231,4 kmol/h	1,033E+7 kJ/h
	MD	1,296E+7 kJ/h	272,2 kmol/h	9,076E+6 kJ/h	1,081E+7 kJ/h	231,5 kmol/h	1,034E+7 kJ/h
OP (%)	MEE	49,40	51,97	52,00	56,17	51,40	46,69
	MD	49,31	51,87	51,91	56,24	51,46	46,71

Na [figura 60](#) apresentam-se a respostas obtidas nas malhas de controlo de composição da coluna principal do sistema FTCDC.

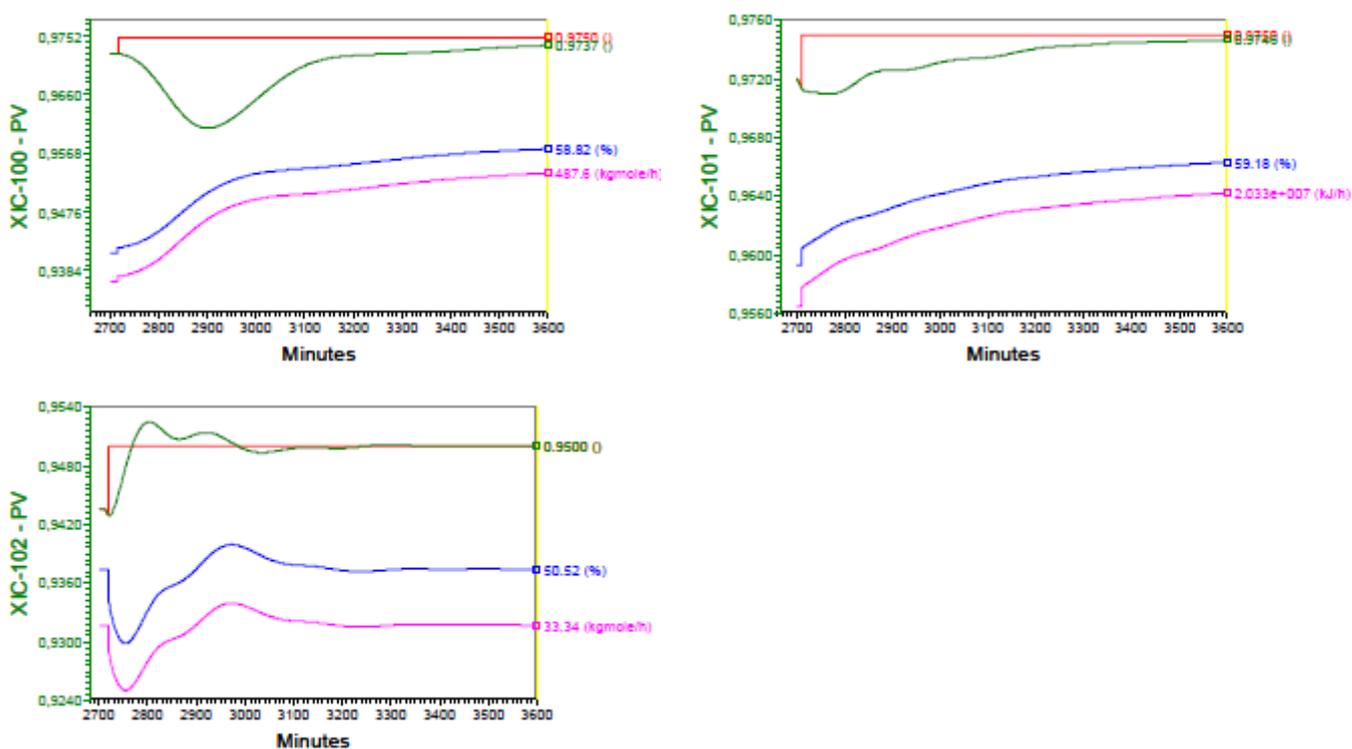


Figura 60 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC em modo automático

Para o caso do sistema FTCDC o afastamento do valor de especificação das variáveis de composição não se deve somente ao processo de sintonização, mas também ao facto de na inicialização da simulação em modo dinâmico, com apenas o controlo regulatório em modo automático, se verificar que, após estabilização, os valores das variáveis de composição se afastavam do especificado na simulação em modo de estado estacionário. Para efeitos de sintonização dos controladores não se considerou o desvio significativo, procedendo á mesma sem prévio ajuste das variáveis manipuladas das malhas de controlo de composição. Ao contrário do verificado para o sistema tradicional, apenas na malha XIC-102 no sistema FTCDC, respeitante ao controlo de composição do produto intermediário, a resposta da variável controlada apresenta o *overshoot* do seu *set-point*. Verifica-se ainda o efeito das respostas (alteração da variável manipulada) das outras malhas de controlo na malha de controlo XIC-100, resultante da interação entre estas¹².

Os resultados de simulação em modo dinâmico, apresentados na [tabela 55](#), dizem respeito aos valores obtidos após colocação das malhas de controlo de composição em modo automático com introdução dos respetivos *set-points* e decorridos 1800 minutos de tempo de simulação.

Tabela 55 – Resultados de simulação em MEE e em MD com controlo em modo automático do sistema FTCDC.

Variável	Modo de simulação	PIC-100	XIC-100	XIC-101	XIC-103
SP	MEE	2,00 atm	0,9750	0,9750	0,9500
	MD	2,00 atm	-	-	-
PV	MEE	2,00 atm	0,9750	0,9750	0,9500
	MD	2,00 atm	0,9749	0,9750	0,9500
MV	MEE	1,958E+7 kJ/h	469,9 kmol/h	1,963E+7 kJ/h	33,34 kmol/h
	MD	2,032E+7 kJ/h	489,4 kmol/h	2,039E+7 kJ/h	33,33 kmol/h
OP (%)	MEE	50,92	49,97	51,48	50,52
	MD	59,15	59,71	59,95	50,50

Conforme se pode verificar, existe uma significativa alteração dos valores das variáveis manipuladas para cumprimento das especificações de composição do processo entre os resultados de simulação em modo de estado estacionário e modo dinâmico. Estas diferenças estarão intrinsecamente associadas à forma de cálculo da perda de carga no sistema, que conduz com alteração significativa dos perfis de pressão. Na simulação do sistema FTCDC em modo de estado estacionário deve ser dada atenção á determinação da perda de carga, dada a sua influência de forma global no funcionamento do sistema, nos caudais internos e nos consumos de energia a este associado.

Ainda que não aplicado neste trabalho, a interação verificada entre as malhas de controlo pode ser atenuada, a título de exemplo, através de técnicas de desacoplamento de malhas de controlo que incluem reestruturação do emparelhamento de variáveis, dessintonização das malhas de controlo “ofensivas”, ressintonia dos controladores com as outras malhas de controlo em modo automático, entre outros.

¹² Os resultados com controlo em modo automático após sintonização das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC podem ser consultados nos seguintes ficheiros HYSYS:

- [FTCDC P9.1 ESTABILIZAÇÃO - CONTROLO EM MODO AUTOMÁTICO.HSC](#)
- [FTCDC P9.2 ESTABILIZAÇÃO - CONTROLO EM MODO AUTOMÁTICO.HSC](#)

6.2.3 RESPOSTA DOS SISTEMAS A PERTURBAÇÕES

A avaliação dos sistemas de controlo implementados, nomeadamente no que diz respeito ao controlo de composição, é conduzida através da introdução de alterações no caudal e da composição da alimentação.

Na [figura 61](#) apresentam-se as respostas das malhas de controlo de composição do sistema tradicional para a alteração do caudal de alimentação em 1% e na [figura 62](#) para a alteração da composição da alimentação em B em 1%.

O tempo de registo de respostas nos *stricharts* apresentados corresponde a 900 minutos de simulação¹³. Conforme se pode observar, para a coluna 1 (XIC-100 e XIC-101) e para ambas as alterações introduzidas, após um desvio inicial dos valores das variáveis do processo, estes recuperam a um valor próximo do seu valor de *set-point* com diminuição progressiva do erro até próximo de zero.

As oscilações verificadas na malha XIC-101 com a alteração do caudal de alimentação e na malha XIC-101 para alteração da composição de alimentação estão associadas á interação entre estas malhas de controlo.

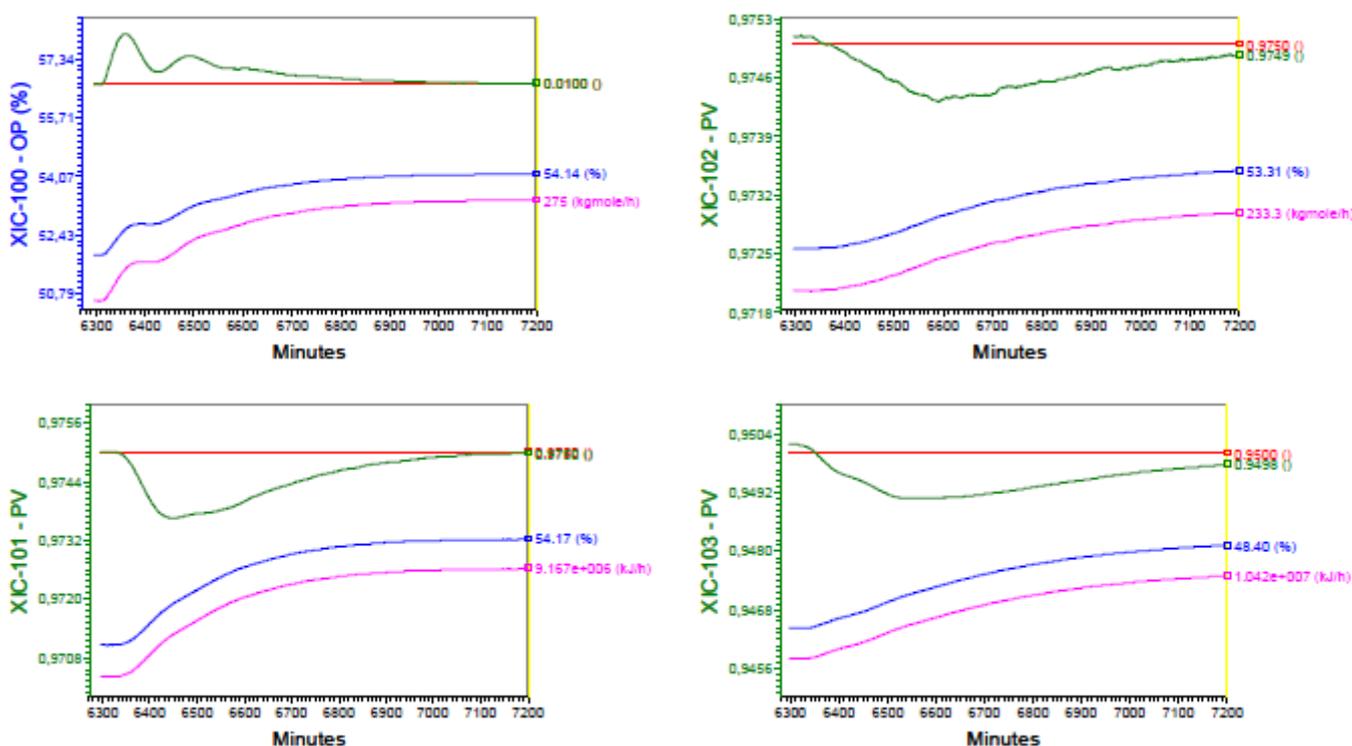


Figura 61 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema ST para uma variação de 1% no caudal de F

¹³ Os resultados das respostas às perturbações do sistema ST podem ser consultados nos seguintes ficheiros HYSYS:

- [ST P9.6.0 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTUBAÇÕES - CAUDAL DE ALIMENTAÇÃO \(1%\).HSC](#)
- [ST P9.6.1 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTUBAÇÕES - CAUDAL DE ALIMENTAÇÃO \(10%\).HSC](#)
- [ST P9.6.2 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTUBAÇÕES - COMPOSIÇÃO DA ALIMENTAÇÃO \(1%\).HSC](#)
- [ST P9.6.3 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTUBAÇÕES - COMPOSIÇÃO DA ALIMENTAÇÃO \(10%\).HSC](#)

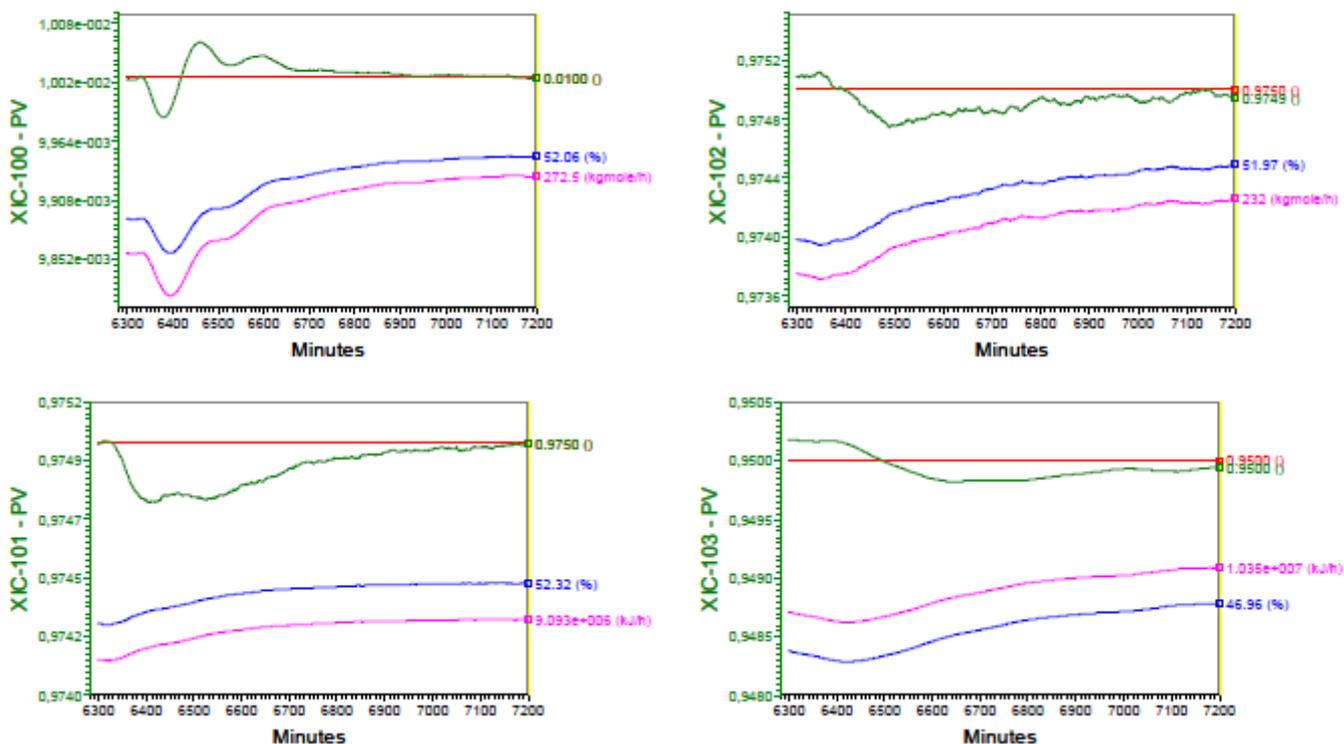


Figura 62 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema ST para uma variação de 1% na composição em B de F

As perturbações introduzidas na alimentação à coluna 1 refletem-se na coluna 2 pelas variações inerentes na corrente de produto de topo da coluna 1, resultante em primeira instância da variação de composição, a qual ao final de algum tempo retorna para valores próximos do seu *set-point*, mas também do seu caudal, resultado do ajuste associado ao controlo de níveis na coluna 1 (figura 63), que tem um carácter permanente após estabilização da operação no seu novo ponto de “estado estacionário”.

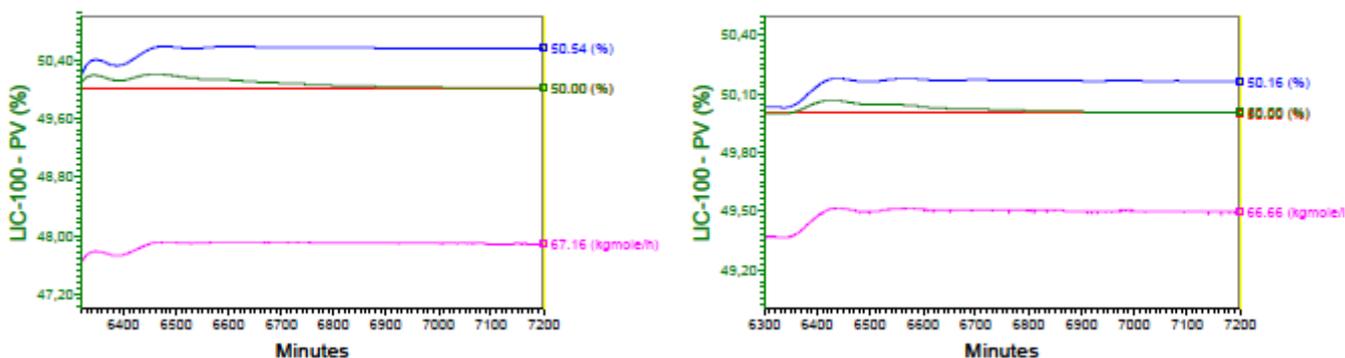


Figura 63 – Respostas da malha de controlo de nível no condensador da coluna 1 do sistema ST para uma variação de 1% na no caudal (esq.) e na composição em B (dir.) de F

Na figura 64 apresentam-se as respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC para a alteração do caudal de alimentação em 1% e na figura 65 para a alteração da composição da alimentação em B em 1%.

O tempo de registo de respostas nos *stricharts* apresentados corresponde a 900 minutos de simulação¹⁴.

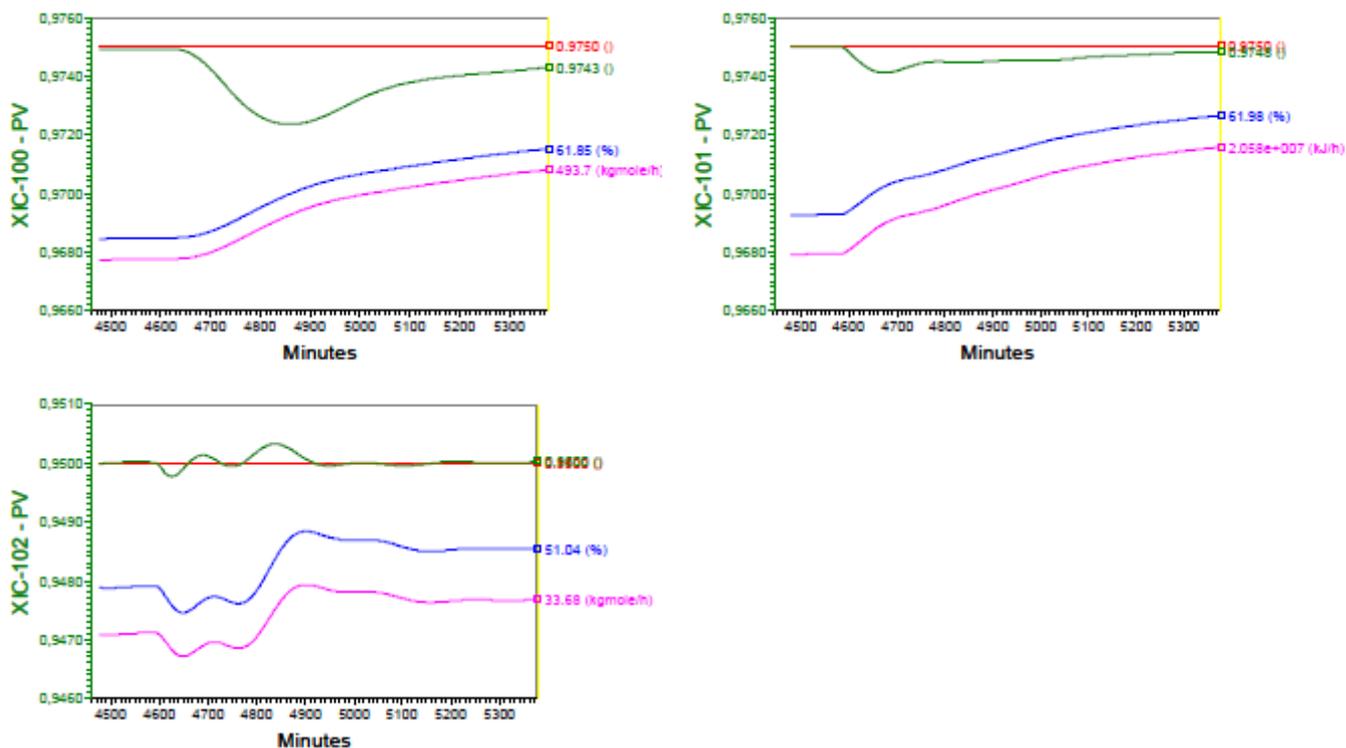


Figura 64 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC para uma variação de 1% no caudal de F

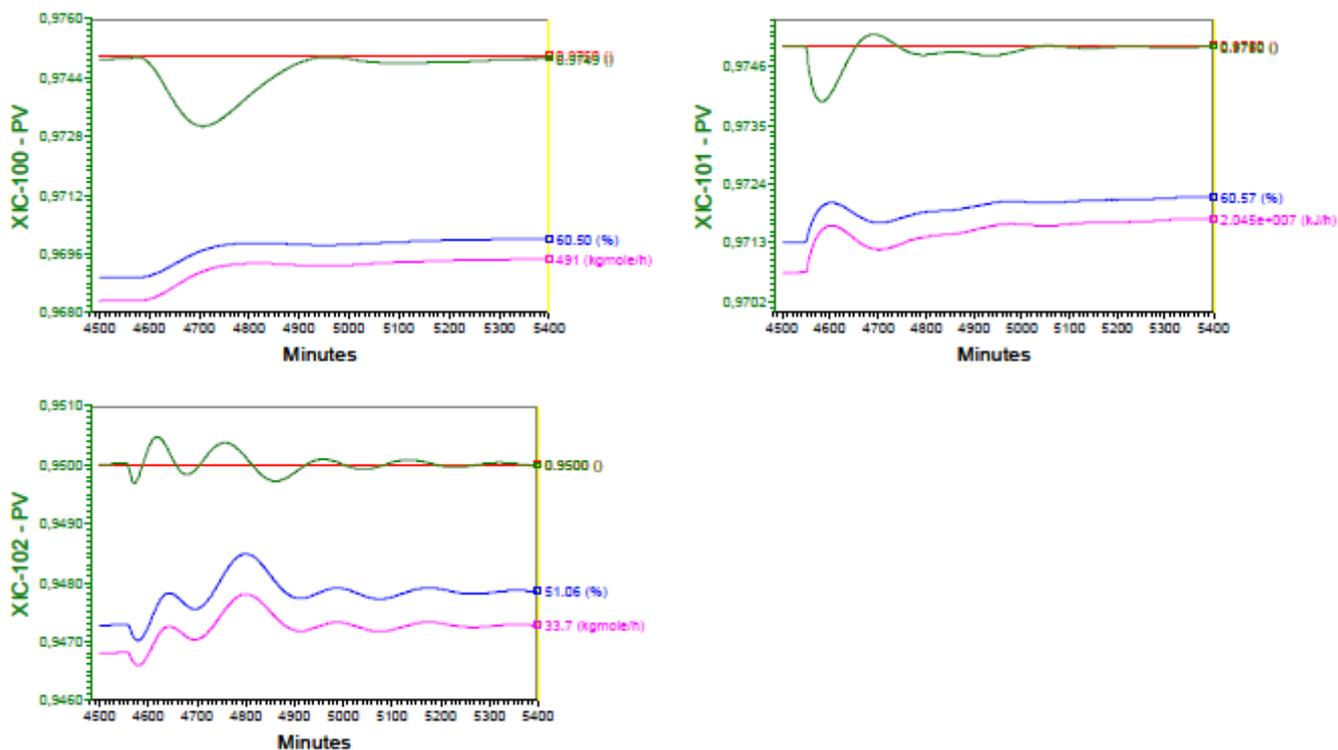


Figura 65 – Respostas das malhas de controlo de composição do sistema FTCDC para uma variação de 1% na composição em B de F

¹⁴ Os resultados das respostas às perturbações do sistema FTCDC podem ser consultados nos ficheiros HYSYS:

- [FTCDC P9.3.0 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTURBAÇÕES - CAUDAL DE ALIMENTAÇÃO \(1%\).HSC](#)
- [FTCDC P9.3.1.0 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTURBAÇÕES - CAUDAL DE ALIMENTAÇÃO \(10%\).HSC](#)
- [FTCDC P9.3.2 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTURBAÇÕES - COMPOSIÇÃO DA ALIMENTAÇÃO \(1%\).HSC](#)
- [FTCDC P9.3.3.0 RESPOSTA DO SISTEMA A PERTURBAÇÕES - COMPOSIÇÃO DA ALIMENTAÇÃO \(10%\).HSC](#)

Similarmente ao verificado ao sistema tradicional para ambas as alterações introduzidas, após desvio inicial ao valor de *set-point* as variáveis de processo recuperam para valores próximos de *set-point*, no entanto os desvios verificados têm maior amplitude e o tempo de estabilização do processo continua a ser superior.

Resultado das interações entre as malhas de controlo bem como da parametrização dos controladores verifica-se uma significativa oscilação das respostas da variável manipulada e controlada da malha de controlo XIC-102, correspondente ao controlo de composição do produto intermediário, ainda que com um menor desvio do valor da variável controlada ao seu valor de *set-point*.

Para ambos os sistemas, foi também simulada a alteração em 10% das perturbações consideradas (caudal e composição da alimentação), verificando-se que para além de um desvio inicial mais acentuado das variáveis controladas relativamente ao seu *set-point* e um maior tempo para recuperação a este, em termos de comportamento as respostas são similares às obtidas para a introdução da variação de 1%.

Considerando como objetivo último do trabalho desenvolvido uma comparação entre a operabilidade dos sistemas em estudo e não sendo pretensão uma aprofundada análise e um *design* otimizado dos sistemas de controlo implementados, consideram-se satisfatórias as respostas obtidas para as diferentes malhas de controlo.

6.2.3.1 ALTERAÇÃO DOS CAUDAIS DE INTERLIGAÇÃO

Uma importante vertente de investigação e desenvolvimento da atualidade relativamente ao controlo é a possibilidade de otimização dos processos através da *redesign* dos sistemas de controlo e otimização do funcionamento dos controladores de forma a aumentar a eficiência da operação.

No sistema tradicional com controlo dual de composição (especificação da composição de ambos os produtos) não dispomos de graus de liberdade extra para otimização do processo, no entanto no sistema FTCDC duas variáveis, os caudais das correntes de interligação que entram no prefracionador, as quais são controladas para assegurar uma operação “estável” do prefracionador, podem ser manipuladas de forma a otimizar a separação no prefracionador e por sua vez conduzir à redução do consumo de energia.

A título de exemplo apresentam-se na [figura 66](#) as respostas à variação do caudal de V3 de 265 kmol/h para 267kmol/h¹⁵.

Dos estudos efetuados verificou-se que para a configuração implementada seria necessário manter a malha de controlo de composição do produto lateral (XIC-102) em modo manual, devido às interações entre as malhas. Não obstante, mantendo o *set-point* de caudal desta mesma corrente, desfazendo o controlo em cascata implementado e mantendo apenas o controlo de caudal desta corrente em modo automático, é possível manter o valor de composição do produto intermédio próximo de especificação apenas com controlo dual de composição.

¹⁵ Os resultados das respostas à alteração do sistema FTCDC podem ser consultados no ficheiro HYSYS:

- [FTCDC P9.3.4 ALTERAÇÃO DOS CAUDAIS DE INTERLIGAÇÃO.HSC](#)

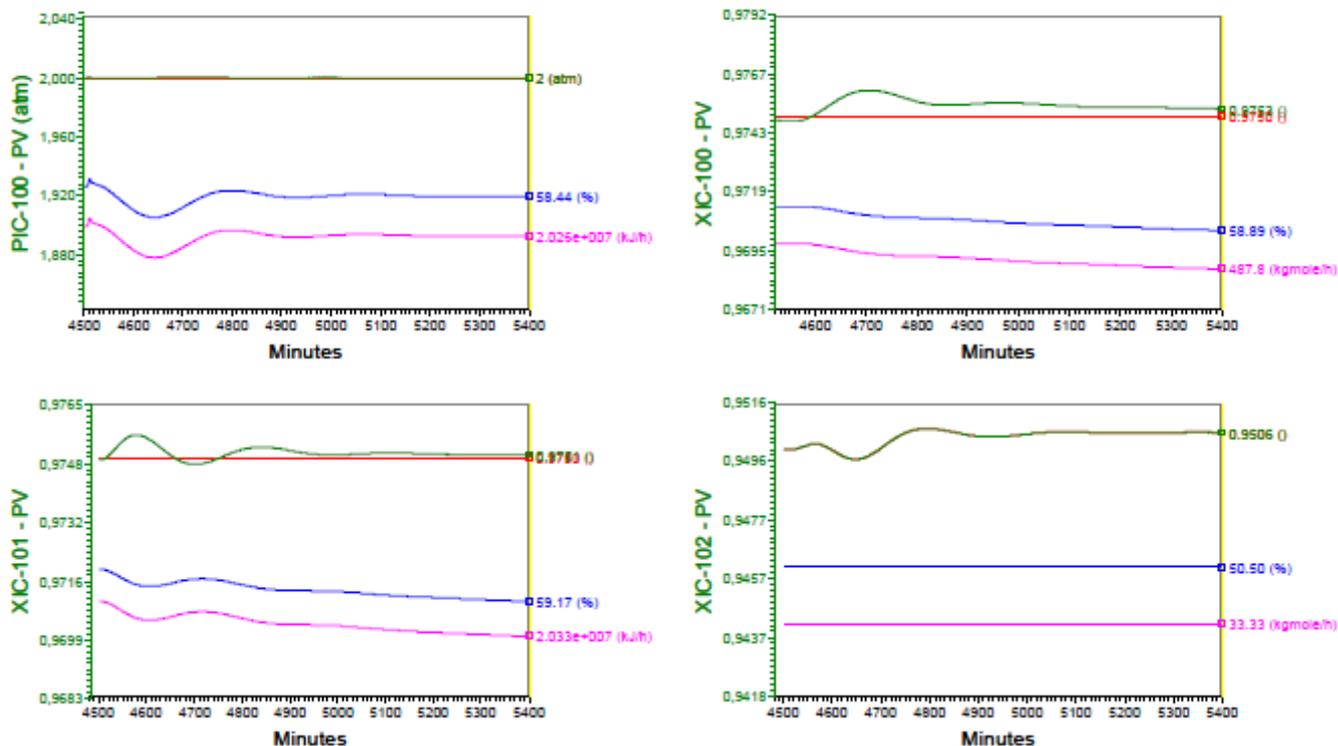


Figura 66 – Respostas das malhas de controlo de pressão e composição do sistema FTDCD para aumento de V3 em 2 kmol/h

Tabela 56 – Influência da variação de V3 no consumo energético do sistema FTDCD

	V3(kmol/h)	QC (kJ/h)	QR (kJ/h)	QT (kJ/h)
Sistema	265	2,032E+7	2,039E+7	4,071E+7
FTCDC	267	2,026E+7	2,033E+7	4,059E+7

Nas respostas obtidas, bem como no resumo dos consumos energéticos para ambos os caudais simulados, apresentado [tabela 56](#), é possível observar o impacto da variação do caudal nas malhas de controlo de composição, neste caso com redução do consumo de energia para a variação de caudal aleatoriamente imposta. Com tal pretende-se demonstrar a possibilidade de otimização do processo durante operação, considerando esta possibilidade particularmente útil quando ocorrem variações de carácter relativamente permanente nas características da alimentação.

6.3 COMPARAÇÃO ENTRE OS SISTEMAS

Na passagem da simulação em modo de estado estacionário para modo dinâmico verificam-se maiores variações para o sistema FTCDC, apresentando este um maior tempo de estabilização da simulação comparativamente com o sistema tradicional devido à sua maior complexidade e também aos maiores desvios relativos aos resultados obtidos em modo de estado estacionário.

No sistema tradicional a falha do controlo de composição da corrente da primeira coluna, que alimenta a segunda coluna, pode traduzir-se na impossibilidade de cumprir as especificações de produto na segunda coluna. No entanto, o sistema FTCDC apresenta uma maior complexidade na implementação do sistema de

controlo devido aos graus de liberdade extra na sua operação, mas também devido á forte interação entre as malhas de controlo de composição das três correntes de produto que saem todas da mesma coluna. Adicionalmente os tempos de resposta do processo são significativamente superiores. Não obstante, o sistema FTCDC apresenta a vantagem de relativamente ao sistema tradicional de necessitar de menos uma malha de controlo de composição e ainda que a implementação de um sistema de controlo adequado possa representar uma tarefa complexa, verifica-se que a adaptação dos sistemas de controlo já comumente usados na colunas de destilação tradicional podem conduzir a resultados satisfatórios para o controlo no sistema FTCDC.

Relativamente aos consumos energéticos, motivo pelo qual a configuração FTCDC suscitou interesse, na [tabela 57](#) apresentam-se os resultados associados a cada um dos sistemas para o cumprimento das especificações de composição resultantes das simulações em modo de estado estacionário e das simulações em modo dinâmico, após estabilização da operação. Apesar das alterações das variáveis manipuladas no sistema FTCDC para cumprimento das especificações na sua simulação em modo dinâmico continua-se a observar uma maior rentabilidade energética relativamente ao sistema tradicional, apresentando o sistema FTCDC uma poupança energética de cerca de 6%.

Tabela 57 – Resultados de consumo energético com simulação em modo dinâmico dos sistemas ST e FTCDC

		Consumos de Energia					
		de	QC1 (kJ/h)	QR1 (kJ/h)	QC2 (kJ/h)	QR2 (kJ/h)	QT (kJ/h)
Sistema ST	Modo de simulação MEE		1,297E+7	9,080E+6	1,081E+7	1,033E+7	4,319E+7
	MD		1,296E+7	9,076E+6	1,081E+7	1,034E+7	4,319E+7
			QC (kJ/h)	QR (kJ/h)			
Sistema FTCDC	MEE		1,958E+7	1,963E+7			3,921E+7
	MD		2,032E+7	2,039E+7			4,071E+7

7 CONCLUSÕES

O impacto dos custos de investimento e operação da destilação nas indústrias, sendo este o processo mais comumente usado para a separação de misturas líquidas, tem motivado o desenvolvimento de sistemas de separação de elevada eficiência energética nos quais se incluem os sistemas de colunas com acoplamento térmico integral de correntes (FTCDC). Os estudos sobre o sistema FTCDC, inicialmente patenteado na década de 1940, têm sobretudo sido desenvolvidos no âmbito da sua eficiência termodinâmica e *design*, tendo sido demonstrado que este permite poupanças energéticas significativas relativamente ao sistema tradicional. No entanto, devido à sua complexidade de operação, o sistema FTCDC não tem encontrado uma ampla aplicação industrial e os estudos sobre a sua operabilidade continuam aquém do desejável.

Mediante aplicação da configuração FTCDC para a separação de uma mistura equimolar de isómeros de butanol foi efetuado o estudo da sua utilização na separação de misturas multicomponentes, o qual foi desenvolvido em três etapas distintas: *design*, otimização e operação e controlo. Os resultados, obtidos através de simulação com recurso ao *software* de simulação de processos HYSYS, foram comparados com os resultados obtidos para a mesma separação efetuada através do sistema tradicional.

Com base nos resultados de *design* obtidos por Kim [51] a partir de um procedimento de *design* rigoroso, baseado em balanços material e cálculos de equilíbrio por computação prato-a-prato, é apresentado um procedimento de implementação do sistema FTCDC para simulação rigorosa em HYSYS em modo de estado estacionário. Este consiste num procedimento dividido em duas etapas principais, consistindo a primeira na obtenção dos dados de inicialização para as correntes de interligação e a segunda na implementação para simulação rigorosa.

Para a otimização do *design* do sistema FTCDC foi apresentado um procedimento que, juntando as vantagens da aplicação de técnicas de desenho de experiências integradas com simulação em modo de estado estacionário, envolve técnicas de *design* fatorial fracionado e *design* fatorial completo, sendo os ciclos de simulações subsequentes baseados na análise ANOVA dos resultados obtidos. A utilização deste procedimento permitiu a redução significativa do número de simulações a executar bem como a identificação das principais variáveis de otimização para o caso em estudo e das principais interações entre as mesmas.

Finalmente foram apresentadas os diferentes passos de implementação para simulação em modo dinâmico utilizando o HYSYS para ambos os sistemas, tradicional e FTCDC, através da qual foi avaliada a operação e controlo do sistema FTCDC, baseado este último em técnicas de controlo tradicionais, já comumente usadas para o controlo de colunas convencionais de destilação.

Comparativamente com o sistema tradicional, composto por duas colunas de destilação convencionais, cujo *design* e otimização podem ser conduzidos de forma independente, após determinação a sequência de separação pretendida, o sistema FTCDC é significativamente mais complexo devido às correntes de interligação entre as duas colunas do sistema, ao superior número de variáveis envolvidas e às interações entre as mesmas, o que se reflete no seu procedimento de implementação e simulação, nomeadamente na

convergência das operações implementadas. Esta complexidade reflete-se igualmente na sua implementação para simulação em modo dinâmico e no *design* do seu sistema de controlo, dado o maior número de graus de liberdade e interação entre as malhas de controlo desenhadas.

Para a separação em estudo, o sistema FTCDC, após otimização do seu *design* estrutural e operacional, resultou no sistema mais favorável energeticamente, permitindo poupanças nos consumos energéticos na ordem dos 9% em relação ao sistema tradicional, ao contrário do obtido para os *designs* iniciais. No entanto, verificou-se que o sistema tradicional envolve menores custos. No processo de otimização do sistema FTCDC destacaram-se como principais variáveis de otimização os caudais de interligação e a relação entre eles e o *design* estrutural do prefracionador.

Dos resultados de simulação dinâmica, comparativamente com o sistema tradicional, o sistema FTCDC apresentou um elevado tempo de estabilização da operação e superiores tempos de resposta para as malhas de controlo de composição implementadas, verificando-se uma forte interação entre as mesmas. Não obstante, para o mesmo objetivo de controlo de qualidade, o sistema FTCDC permitiu a utilização de um menor número de malhas de controlo de composição, verificando-se ainda a possibilidade de que com o controlo de caudal da corrente de produto intermediária será possível cumprir a especificações de produto. Os dois graus de liberdade adicionais associados às correntes de interligação constituem uma possibilidade de otimização da operação do sistema FTCDC em termos de consumos energéticos.

Embora os resultados obtidos relativamente à avaliação económica conduzida para a separação em estudo sejam desfavoráveis, dado o potencial de poupança energética do sistema FTCDC e atendendo igualmente aos estudos preliminarmente efetuados, considero que este sistema constitui efetivamente uma importante alternativa às configurações tradicionais de separação por destilação, cuja adequação estará intrinsecamente ligada as propriedades da mistura.

Será fundamental em trabalhos futuros dar continuidade aos estudos sobre operabilidade e controlo do sistema FTCDC, com o fim de otimizar a estabilidade da operação e a resposta do sistema a alterações nas condições de operação. Neste âmbito, seria igualmente interessante considerar o controlo de otimização, dada à potencialidade de por manipulação dos caudais de interligação ser possível alterar o prefracionamento obtido e dessa forma a reduzir os consumos energéticos.

Os *softwares* de simulação de processo como HYSYS constituem uma ferramenta essencial no desenvolvimento e análise de processos, o que no presente trabalho se traduziu na obtenção dos necessários resultados para análise e avaliação dos sistemas estudados. Será importante no futuro explorar a aplicabilidade do HYSYS na tarefa de *design* deste tipo de sistemas e similares, com a utilização das ferramentas de que este já dispõe integradas, como sendo o *Short-cut Column*.

Considero igualmente importante o desenvolvimento da sua utilização no *design* dos sistemas de controlo associados, considerando a aplicação da simulação em modo de estado estacionário e modo dinâmico, bem como o uso integrado com os softwares de cálculo numérico como o MATLAB, que através da modelação de processos é comumente usado na análise de problemas de controlo associados.

8 BIBLIOGRAFIA

- [1] J. D. Seader and E. J. Henley, *Separation Process Principles*, 2nd ed. Wiley, 2006.
- [2] W. D. Seider, J. D. Seader, D. R. Lewin, and S. Widagdo, *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Design*, 3rd ed. Wiley, 2010.
- [3] R. Solar-Gonzalez, R. Monroy-Loperena, and A. Velasco-Perez, "Simulation and Control Configuration of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation Column," *International Journal of Computer Science and Information Technologies*, vol. 2, no. 2, pp. 847–852, 2011.
- [4] W. L. Luyben, *Distillation Design and Control using Aspen Simulation*, 1st ed. Wiley, 2006.
- [5] T. Trindade, J. M. Silva, V. Palmeira, and P. Anastácio, "Modelação e Simulação de Unidades Processuais: Introdução à Simulação de Processos (Módulo 1)." ISEL, Departamento de Engenharia Química, 2005.
- [6] G. Towler and R. Sinnott, *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*. Elsevier, 2008.
- [7] AspenTech, "Aspen HYSYS - Unit Operations Guide v7.2," *Aspen HYSYS*. Aspen Technology, 2010.
- [8] "Módulo VLE," *Portal Laboratórios Virtuais de Processos Químicos*, 2012. [Online]. Available: <http://labvirtual.eq.uc.pt/cgi-bin/vle#2>. [Accessed: 12-Mar-2012].
- [9] M. Doherty and M. Malone, *Conceptual Design of Distillation Systems*, 1st ed. McGraw-Hill, 2001.
- [10] J. G. Stichlmair and J.-R. Herguajuela, "Separation regions and processes of zeotropic and azeotropic ternary distillation," *AIChE Journal*, vol. 38, no. 10, pp. 1523–1535, 1992.
- [11] J. Stichlmair, J. Fair, and J. Bravo, "Separation of azeotropic mixtures via enhanced distillation," *Chemical Engineering Progress*, vol. 85, no. 1, pp. 63 – 69, 1989.
- [12] R. Agrawal, "A Method to Draw Fully Thermally Coupled Distillation Column Configurations for Multicomponent Distillation," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 78, no. 3, pp. 454-464, 2000.
- [13] E. Díez, P. Langston, G. Ovejero, and M. D. Romero, "Economic feasibility of heat pumps in distillation to reduce energy use," *Applied Thermal Engineering*, vol. 29, no. 5–6, pp. 1216-1223, 2009.
- [14] W. Y. Svrcek, D. P. Mahoney, and B. R. Young, *A Real-Time Approach to Process Control*, 2nd ed. Wiley, 2006.
- [15] D. E. Seborg, D. A. Mellichamp, and T. F. Edgar, *Process Dynamics and Control*, 3rd ed. Wiley, 2011.
- [16] P. S. Buckley, W. L. Luyben, and J. P. Shunta, *Design of Distillation Column Control Systems*, 1st ed. Butterworth-Heinemann, 1985.
- [17] V. Kaushik, "Dynamics and Control of Distillation using Aspen," National Institute of Technology Rourkela, 2011.

- [18] E. A. Wolf and S. Skogestad, "Operation of Integrated Three-Product (Petlyuk) Distillation Columns," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 34, no. 6, pp. 2094–2103, 1995.
- [19] E. A. Wolf and S. Skogestad, "Control Configuration Selection for Distillation Columns under Temperature Control," in *ECC' 93*, 1993.
- [20] S. Skogestad, "The Dos and Don'ts of Distillation Column Control," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 85, no. 1, pp. 13–23, 2007.
- [21] S. Skogestad, P. Lundström, and E. W. Jacobsen, "Selecting the best distillation control configuration," *AIChE Journal*, vol. 36, no. 5, pp. 753–764, 1990.
- [22] P. Lundström and S. Skogestad, "Opportunities and difficulties with 5×5 distillation control," *Journal of Process Control*, vol. 5, no. 4, pp. 249–261, 1995.
- [23] A. W. Sloley, "Effectively Control Column Pressure," *Chemical Engineering Progress*, vol. 97, no. 1, pp. 39–48, 2001.
- [24] S. Skogestad, "Dynamics and Control of Distillation Columns: A Tutorial Introduction," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 75, no. 6, pp. 539–562, 1997.
- [25] A. J. Brugma, "Process and device for fractional distillation of liquid mixtures, more particularly petroleum," U.S. Patent 2295256, 1942.
- [26] R. O. Wright, "Fractionation Apparatus," U.S. Patent 2471134, 1949.
- [27] Robert P. Cahn, Elizabeth Di Miceli, and Alphonso G. Di Miceli, "Separation of multicomponent mixture in single tower," U.S. Patent US3058893, 1962.
- [28] F. B. Petlyuk, V. M. Platonov, and D. M. Slavinsk, "Thermodynamically Optimal Method for Separating Multicomponent Mixtures," *International Chemical Engineering*, vol. 5, no. 3, p. 555, 1965.
- [29] V. M. Platonov, F. B. Petlyuk, and I. B. Zhvanetskiy, "Rectification Column," U.S. Patent 292339, 1970.
- [30] J. A. Caballero and I. E. Grossmann, "Structural Considerations and Modeling in the Synthesis of Heat-Integrated-Thermally Coupled Distillation Sequences," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 45, no. 25, pp. 8454–8474, 2006.
- [31] F. B. Petlyuk, "Distillation Trajectories in Infinite Complex Columns and Complexes," in *Distillation Theory and Its Application to Optimal Design of Separation Units*, 1^a ed., Cambridge University Press, 2004, pp. 170–217.
- [32] A. K. Jana, "Heat integrated distillation operation," *Applied Energy*, vol. 87, no. 5, pp. 1477–1494, 2010.
- [33] H. Rudd, "Thermal Coupling for Energy Efficiency," *Chemical Engineering*, vol. 27, Supple, 1992.
- [34] C. Triantafyllou and R. Smith, "The Design and Optimisation of Fully Thermally Coupled Distillation Columns," *Trans. IChemE*, vol. 70, no. 2, p. 118, 1992.
- [35] Z. T. Fidkowski and R. Agrawal, "Multicomponent thermally coupled systems of distillation columns at minimum reflux," *AIChE Journal*, vol. 47, no. 12, pp. 2713–2724, 2001.

- [36] Z. T. Fidkowski and L. Krolikowski, "Thermally coupled system of distillation columns: optimization procedure," *AIChE Journal*, vol. 32, no. 4, pp. 537–546, 1986.
- [37] Z. T. Fidkowski and L. Krolikowski, "Minimum energy requirements of thermally coupled distillation systems," *AIChE Journal*, vol. 33, no. 4, pp. 643–653, 1987.
- [38] R. Agrawal and Z. T. Fidkowski, "Are Thermally Coupled Distillation Columns Always Thermodynamically More Efficient for Ternary Distillations?," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 37, no. 8, pp. 3444–3454, 1998.
- [39] O. Annakou and P. Mizsey, "Rigorous Comparative Study of Energy-Integrated Distillation Schemes," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 35, no. 6, pp. 1877–1885, 1996.
- [40] E. Rév, M. Emtir, Z. Szitkai, P. Mizsey, and Z. Fonyó, "Energy savings of integrated and coupled distillation systems," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 25, pp. 119–140, 2001.
- [41] K. S. Hwang, B. C. Kim, and Y. H. Kim, "Experimental evaluation of a modified fully thermally coupled distillation column," *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 27, no. 4, pp. 1056–1062, 2010.
- [42] Y. H. Kim, "Structural design and operation of a fully thermally coupled distillation column," *Chemical Engineering Journal*, vol. 85, no. 2–3, pp. 289–301, 2002.
- [43] M. Vaca, A. Jiménez-Gutiérrez, and R. Monroy-Loperena, "Design of Petlyuk Distillation Columns Aided with Collocation Techniques," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 46, no. 16, pp. 5365–5370, 2007.
- [44] S. Hernandez and A. Jimenez, "Design of optimal thermally-coupled distillation systems using a dynamic model," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 74, no. A3, pp. 357–362, 1996.
- [45] A. Jiménez, N. Ramírez, A. Castro, and S. Hernández, "Design and energy performance of alternative schemes to the petlyuk distillation system," *Trans. IChemE*, vol. 81, Part A, no. May, pp. 518–524, 2003.
- [46] G. Dünnebier and C. C. Pantelides, "Optimal Design of Thermally Coupled Distillation Columns," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 38, no. 1, pp. 162–176, 1999.
- [47] I. E. Grossmann, P. a. Aguirre, and M. Barttfeld, "Optimal synthesis of complex distillation columns using rigorous models," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 29, no. 6, pp. 1203–1215, 2005.
- [48] J. A. Caballero and I. E. Grossmann, "Design of distillation sequences: from conventional to fully thermally coupled distillation systems," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 28, no. 11, pp. 2307–2329, 2004.
- [49] K. A. Amminudin, R. Smith, D. Y.-C. Thong, and G. P. Towler, "Design and Optimization of Fully Thermally Coupled Distillation Columns: Part 1: Preliminary Design and Optimization Methodology," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 79, no. 7, pp. 701–715, 2001.
- [50] Y. H. Kim, "Design of a Fully Thermally Coupled Distillation Column Based on Dynamic Simulations," *Korean Journal of Chemical Engineering*, vol. 17, no. 5, pp. 570–573, 2000.
- [51] Y. H. Kim, "Structural design of fully thermally coupled distillation columns using a semi-rigorous model," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 29, no. 7, pp. 1555–1559, 2005.

- [52] Y. H. Kim, "Structural Design of Extended Fully Thermally Coupled Distillation Columns," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 40, no. 11, pp. 2460–2466, 2001.
- [53] M. A. Navarro, J. Javaloyes, J. A. Caballero, and I. E. Grossmann, "Strategies for the robust simulation of thermally coupled distillation sequences," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 36, no. 10, pp. 149–159, 2012.
- [54] K. S. Hwang, B. C. Kim, and Y. H. Kim, "Design and Control of a Fully Thermally Coupled Distillation Column Modified from a Conventional System," *Chemical Engineering & Technology*, vol. 34, no. 2, pp. 273–281, 2011.
- [55] I. J. Halvorsen and S. Skogestad, "Improved Analysis and Understanding of the Petlyuk Distillation Column," in *AIChE Annual Meeting - 4th Topical conference on Separations Science and Technology, Session T1005 - Distillation and Modeling and Process II*, 1999.
- [56] I. J. Halvorsen and S. Skogestad, "Optimal operation of Petlyuk distillation: steady-state behavior," *Journal of Process Control*, vol. 9, no. 5, pp. 407–424, 1999.
- [57] J. P. Rodríguez, E. Moreno, J. Gabriel, S. Hernández, A. Jiménez, and R. M. Yescas, "Control and Energy Savings of the Petlyuk Distillation Systems," *Preprints*, vol. 1, no. 6–8, pp. 195–200, 2007.
- [58] AspenTech, "Aspen HYSYS - Thermodynamics COM Interface Reference Guide v7.2," *Aspen HYSYS*. Aspen Technology, 2010.
- [59] J. G. Stichlmair and J. R. Fair, *Distillation: Principles and Practice*, 1^a ed. Wiley, 1998.
- [60] A. C. Christiansen and S. Skogestad, "Energy Savings in Complex Distillation Arrangements: Importance of Using the Preferred Separation," in *AIChE Annual Meeting*, 1997.
- [61] C. Gutiérrez-Antonio, A. Briones-Ramírez, and A. Jiménez-Gutiérrez, "Optimization of Petlyuk sequences using a multi objective genetic algorithm with constraints," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 35, no. 2, pp. 236–244, 2011.
- [62] S. Hernández and A. Jiménez, "Design of energy-efficient Petlyuk systems," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 23, pp. 1005–1010, 1999.
- [63] J. M. Silva and I. M. João, "Optimal configuration of thermally coupled distillation column: A combination of HYSYS plant process simulator and design of experiments," in *11th International Chemical and Biological Engineering Conference*, 2011, pp. 566–567.
- [64] D. C. Montgomery, *Introduction to Statistical Quality Control*, 6^a ed. Wiley, 2009.
- [65] D. R. Lewin, W. D. Seider, and J. D. Seader, "Using Process Simulators in Chemical Engineering: A Multimedia guide for the Core Curriculum." Wiley, 2003.
- [66] AspenTech, "Aspen HYSYS Dynamics - User Guide v7.2," *Aspen HYSYS Dynamics*. Aspen Technology, 2010.
- [67] K. J. Åström and T. Hägglund, "Automatic tuning of simple regulators with specifications on phase and amplitude margins," *Automatica*, vol. 20, no. 5, pp. 645–651, 1984.
- [68] C. C. Hang, K. J. Astrom, and Q. G. Wang, "Relay feedback auto-tuning of process controllers - A tutorial review," *Journal of Process Control*, vol. 12, no. 1, pp. 143–162, 2002.

9 ANEXOS

[Anexo 1](#) Aspen Split Analysis

[Anexo 2](#) Implementação do Sistema Tradicional

[Anexo 3](#) Comparação dos Estudos de Otimização do Sistema Tradicional

[Anexo 4](#) Estudos Preliminares de Otimização

[Anexo 5](#) Procedimento de análise para *designs* fatoriais

[Anexo 6](#) Algoritmo para determinação da pressão de operação

[Anexo 7](#) Estudos de Controlo

Anexo 1. ASPEN SPLIT ANALYSIS

Página e

1 de 1

ASPEN SPLIT ANALYSIS

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQUAC Valid Phase: VAP-LIQ-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 1 ATM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
C4H10-01	N-BUTANOL	Stable Node	117,75 C
C4H10-02	ISOBUTANOL	Saddle	107,68 C
C4H10-03	2-BUTANOL	Unstable Node	99,78 C

No Azeotropes Were Found

© 2010 Aspen Technology, Inc., 200 Wheeler Road, Burlington, Massachusetts 01803 USA Tel: + 1 888 996 7100

ASPEN SPLIT ANALYSIS

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQUAC Valid Phase: VAP-LIQ-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 3 ATM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
C4H10-01	N-BUTANOL	Saddle	152,67 C
C4H10-02	ISOBUTANOL	Saddle	141,46 C
C4H10-03	2-BUTANOL	Unstable Node	133,57 C

2 Azeotropes Sorted by Temperature

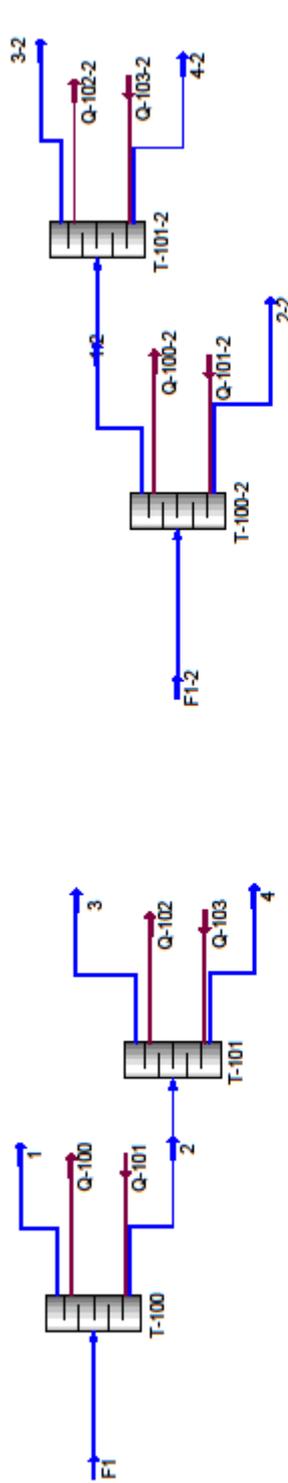
01	Number Of Components: 2		Temperature 156,43 C	
	Homogeneous		Classification: Saddle	
			MOLE BASIS	MASS BASIS
	C4H10-01		0,7303	0,7303
	C4H10-03		0,2697	0,2697

02	Number Of Components: 3		Temperature 157,22 C	
	Homogeneous		Classification: Stable Node	
			MOLE BASIS	MASS BASIS
	C4H10-01		0,6635	0,6635
	C4H10-02		0,0927	0,0927
	C4H10-03		0,2437	0,2437

© 2010 Aspen Technology, Inc., 200 Wheeler Road, Burlington, Massachusetts 01803 USA Tel: + 1 888 996 7100

Anexo 2. IMPLEMENTAÇÃO DO SISTEMA TRADICIONAL

1. Obtenção das variáveis de design estrutural (de colunas convencionais) e determinação da configuração energeticamente mais favorável através da operação *Short-cut Column*, onde se procede:
 - 1.1. Implementação e definição das condições e composição da alimentação (escolha prévia do pacote de propriedades para os componentes do processo);
 - 1.2. Nas propriedades de *Design* da operação em *Connections* definição da fase do produto de topo e associação da corrente de alimentação e criação das correntes de produto e de energia;
 - 1.3. Especificação da separação pretendida nas propriedades de *Design* da operação em *Parameters*: definição frações do componente-chave leve no produto de fundo e do componente-chave pesado no produto de topo.
 - a) Na destilação multicomponente a especificação da pureza das correntes de produto de uma coluna que alimentem colunas a jusante deve atender às especificações de pureza das correntes de produto dessas mesmas colunas, no sentido de que uma incorreta especificação de correntes de produto que constituam uma corrente de alimentação pode tornar impossível o cumprimento das especificações das correntes de produto das colunas que estas alimentam;
 - 1.4. Definição da pressão de funcionamento: pressão no condensador e no ebulidor
 - 1.5. Definição da razão de refluxo real a partir razão de refluxo mínima indicada pelo simulador,
 - a) Neste ponto pode-se atender às heurísticas de destilação que indicam que o valor de razão de refluxo real deve ser entre 1.2 e 1.5 vezes superior ao valor mínimo obtido consoante o grau de dificuldade de separação da mistura, determinado, por exemplo, a partir da volatilidade relativa dos componentes a separar.
2. Simulação rigorosa em estado estacionário através da implementação do sistema de destilação com implementação das colunas através da operação *Distillation Column*, definindo as propriedades de *Design* da operação relativos a *Connections*, atendendo aos dados estruturais obtidos do *short-cut design*:
 - 2.1. Número de pratos e prato de alimentação;
 - 2.2. Correntes de produtos e de energia
 - 2.3. Tipo de condensador;
 - 2.4. Pressão de funcionamento: pressão no condensador e no ebulidor;
 - a) É possível definir as temperaturas de funcionamento, razão de refluxo e caudais de produto de topo estimados, no entanto não é necessário para proceder à simulação do processo.
3. Definição das especificações da operação nas propriedades de *Design* da operação relativos a *Specs*, atendendo ao objetivo de separação e aos graus de liberdade do sistema (normalmente faz-se especificação de composição das correntes de produto e da fração de recuperação dos componentes).
4. Verificar convergência do sistema.



T-100	
Minimum Reflux	6,911
Minimum Trays	28,50
Actual Trays	58,76
Optimal Feed	25,92
Condenser Duty	-1,272e+007 kJ/h
Reboiler Duty	1,273e+007 kJ/h

T-101	
Minimum Reflux	4,280
Minimum Trays	19,86
Actual Trays	42,00
Optimal Feed	20,25
Condenser Duty	-8,614e+006 kJ/h
Reboiler Duty	8,619e+006 kJ/h

T-100-2	
Minimum Reflux	2,341
Minimum Trays	19,48
Actual Trays	42,66
Optimal Feed	23,84
Condenser Duty	-1,063e+007 kJ/h
Reboiler Duty	1,064e+007 kJ/h

T-101-2	
Minimum Reflux	5,375
Minimum Trays	23,84
Actual Trays	49,84
Optimal Feed	25,86
Condenser Duty	-1,009e+007 kJ/h
Reboiler Duty	1,009e+007 kJ/h

Consumos de energia totais	
C3: Energia total SD	4,268e+007 kJ/h
C6: Energia total SI	4,125e+007 kJ/h

Consumos de energia totais

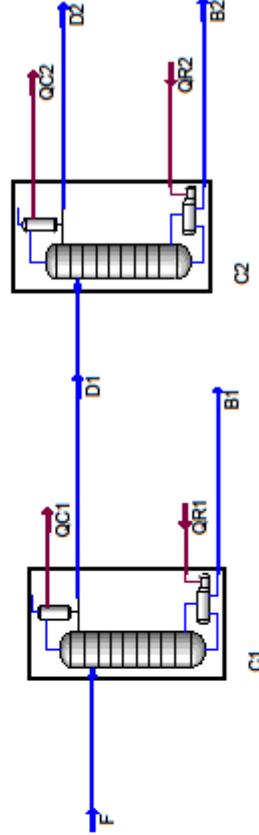


Tabela 58 – Resultados do “short-cut” design das sequências do sistema ST

Parâmetros	SD		SI	
	Coluna 1	Coluna 2	Coluna 1	Coluna 2
Razão de refluxo mínima	6,91	4,28	2,34	5,38
Número de pratos mínimos	28,50	19,86	19,48	23,94
Razão de refluxo externa	8,29	5,14	2,81	6,45
Número de prato atuais	58,78	42,00	42,66	49,94
Prato de alimentação ótimo	25,92	20,25	23,84	25,86
Consumo de energia no condensador (kJ/h)	-1,27E+07	-8,61E+06	-1,05E+07	-1,01E+07
Consumo de energia no ebulidor (kJ/h)	1,27E+07	8,62E+06	1,05E+07	1,01E+07
Consumo de energia total (kJ/h)/sequência		4,27E+07		4,13E+07

Anexo 3. COMPARAÇÃO DOS ESTUDOS DE OTIMIZAÇÃO DO SISTEMA TRADICIONAL

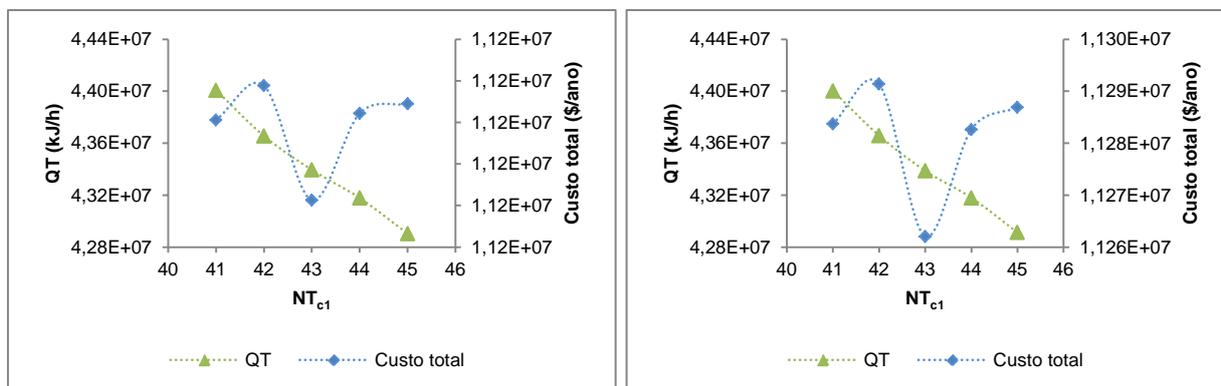


Figura 16.1 – Consumo de energia e custo total em função do número de pratos total da coluna 1 (1º e 2º estudo)

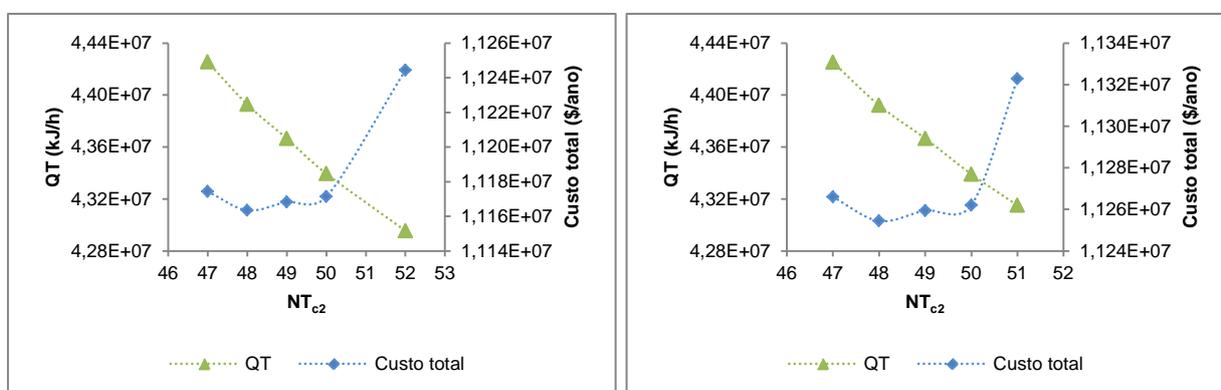


Figura 17.1 – Consumo de energia e custo total em função do número de pratos total da coluna 2 (1º e 2º estudo)

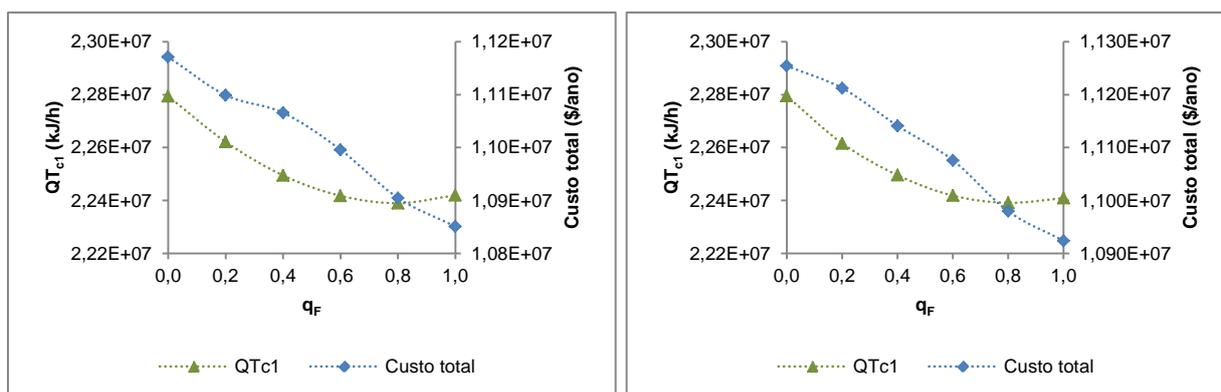


Figura 18.1 – Consumo de energia e custo total em função da condição térmica da alimentação à coluna 1 (1º e 2º estudo)

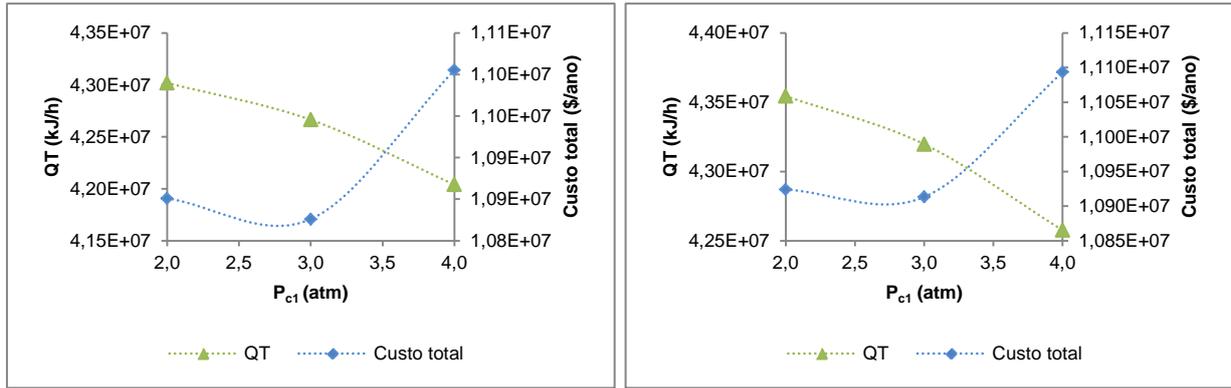


Figura 19.1 – Consumo de energia e custo total em função da pressão de topo da coluna 1 (1º e 2º estudo)

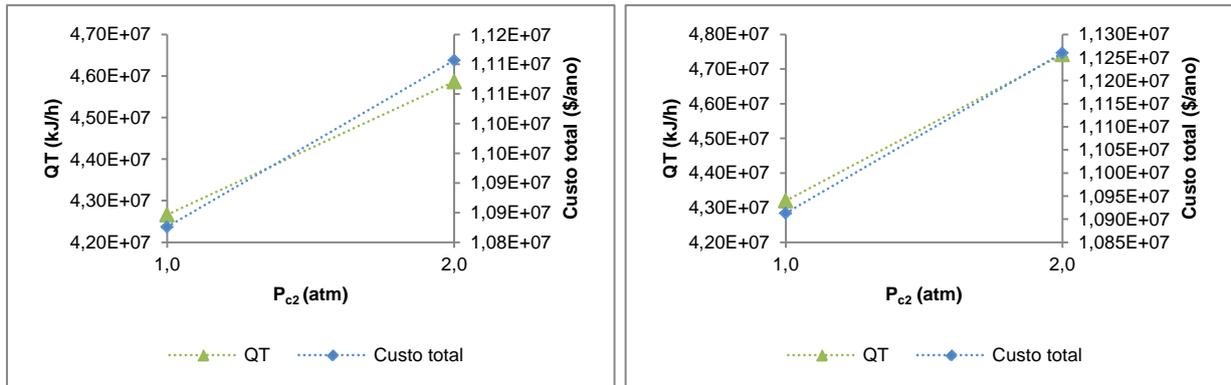


Figura 20.1 – Consumo de energia e custo total em função da pressão de topo da coluna 2 (1º e 2º estudo)

Anexo 4. ESTUDOS PRELIMINARES DE OTIMIZAÇÃO

Para a realização dos presentes estudos atendeu-se aos resultados obtidos por Kim[51] para a separação de uma mistura equimolar de isómeros de butanol, cujas especificações de produto são fração molar do componente mais leve de 0,975 no produto de topo, do componente intermediário de 0.95 no produto lateral e de 0,975 de componente pesado no produto de fundo, para a estrutura do sistema FTCDC, cujos dados se apresentam na [tabela 4](#).

Tabela 4 – Dados e Resultados de design do sistema FTCDC (Fonte: Computers & Chemical Engineering, 29(7), 1555-1559)

Estrutura		Operação	
Número total de pratos da coluna principal	74	Caudal de refluxo (kmol/h)	4.63
Número total de pratos do prefracionador	19	Caudal de vapor de ebulição (kmol/h)	4.71
Posição da corrente de interligação superior	15	Caudal da corrente de interligação superior (kmol/h)	1.57
Posição da corrente de produto lateral	42	Caudal da corrente de interligação inferior (kmol/h)	2.04
Posição da corrente de interligação inferior	66	Pressão de funcionamento do sistema (atm)	1
Posição da alimentação ao prefracionador	8	Caudal de alimentação ao prefracionador (kmol/h)	1
Dimensões das secções da coluna principal		Secção superior da coluna principal	15
		Secção intermédia da coluna principal	51
		Secção inferior da coluna principal	8

Para efeitos de dimensionamento foi efetuada a alteração do caudal molar da alimentação em ambos os sistemas para 100kmol/h (10 vezes superior) e de forma equivalente os caudais de interligação no sistema FTCDC para um valor 10 vezes superior aos resultados de *design* reportados no artigo base.

Os estudos de otimização foram realizados com base no consumo energético, segundo os seguintes pressupostos:

1. O número de pratos totais do prefracionador e da coluna principal não são considerados para efeitos de otimização, mantendo a mesma altura de ambas as colunas em todos os estudos;
2. Para efeitos de comparação com o sistema tradicional, estabelece-se o número total de pratos deste sistema igual ao número total de pratos no sistema FTCDC (93);
3. Para o sistema FTCDC consideram-se como variáveis de otimização o valor dos caudais das correntes de interligação L1 e V3, e a posição dos pratos de alimentação e extração das correntes do sistema, N_F , N_{L1} ($=N_{V1}$), N_{V3} ($=N_{L3}$) e N_{SD} . É adotado um procedimento de otimização paramétrico compostos por três ciclos de otimização, dadas as reportadas interações entre as variáveis de otimização, seguindo os seguintes passos:
 - a) Estabelecido V3 e L1, determinação de $N_{L1} \rightarrow N_{V3} \rightarrow N_{SD} \rightarrow N_F$ ótimas (amplitude de variação de 1 prato);
 - b) Determinação de V3 e L1 ótimos:
 - i) No 1º ciclo - variação inicial de L1 em função de V3 estabelecendo V3-L1 entre 50 e 100 kmol/h, com amplitude de variação de 5 kmol/h, determinando ótimo um intervalo ótimo para os valores de V3 e L1 e respetiva relação entre estes;
 - ii) Determinação dos valores ótimos de V3 e L1 com amplitude de variação de 1 kmol/h de V3 e da relação entre V3 e L1;

- c) Realização do 2º e 3º ciclo (se necessário) de otimização com verificação da otimalidade dos resultados.
4. Para o sistema tradicional consideram-se como variáveis de otimização o número de pratos total por coluna, mantendo o número total de pratos do sistema, e a posição do prato de alimentação em cada coluna. É adotado um procedimento de otimização paramétrico composto por um ciclo de otimização:
 - a) Análise da variação de consumo de energia com a variação do número de pratos de cada coluna para determinação da altura aproximada de cada coluna, respeitando o número total de pratos previamente estabelecidos;
 - b) Determinação da altura ótima para cada coluna (com variação de amplitude de um prato), respeitando o número total de pratos previamente estabelecidos;
 - c) Determinação da posição do prato de alimentação ótima de cada coluna (com variação de amplitude de um prato).
5. Determinação da sequência do sistema tradicional mais favorável após otimização energética de ambas as sequências possíveis (direta e indireta).
6. Após otimização energética procede-se à avaliação económica dos sistemas através da ferramenta “*Economic evaluation*” mantendo a sua parametrização de origem, sendo esta precedida pelo dimensionamento das colunas de ambos sistemas através da utilidade “*Tray Sizing*”, escolhendo como enchimento das diferentes colunas pratos perfurados (“*sieve*”) e introduzindo os equipamentos de ajuste de pressão necessários para que as pressões das correntes de alimentação sejam superiores ou iguais às pressões calculadas para os respetivos pratos de alimentação.

Os estudos incluem a otimização do sistema para os casos 1, 2, 3 e 4, nos quais se varia a composição da alimentação de acordo com o apresentado na [tabela 59](#). Para os casos 1.1, 1.2, 1.3 e 1.4 avalia-se a influência de uma ligeira variação da alimentação nos consumos energéticos e custos totais dos sistemas otimizados para o caso 1. Adicionalmente, otimizada a estrutura dos sistemas para o caso 1, é analisada a variação significativa da composição da alimentação, de acordo com especificado para os casos 2, 3 e 4 procedendo apenas à otimização das variáveis de operação L1 e V3.

Tabela 59 – Estudos preliminares de otimização: composições da alimentação F simuladas

	Caso 1	Caso 1.1	Caso 1.2	Caso 1.3	Caso 2	Caso 3	Caso 4
2-Butanol	0,3333	0,3167	0,3667	0,3167	0,2500	0,2500	0,5000
i-Butanol	0,3333	0,3167	0,3167	0,3667	0,2500	0,5000	0,2500
1-Butanol	0,3333	0,3667	0,3167	0,3167	0,5000	0,2500	0,2500

Resultados relativos à otimização estrutural e de operação considerada – comparação dos consumos energéticos e custos totais associados a cada sistema e caso em estudo

Na [tabela 60](#) e [tabela 61](#) apresentam-se os valores otimizados das variáveis consideradas para efeito de otimização energética.

Tabela 60 – Estudos preliminares de otimização: valores das variáveis otimizadas do sistema ST¹⁶

	NT _{c1}	N _F	NT _{c2}	N _{D1 ou B1}
Caso 1	45	22	48	25
Caso 2	44	23	49	27
Caso 3	46	21	47	23
Caso 4	59	36	34	18

Tabela 61 – Estudos preliminares de otimização: valores das variáveis otimizadas do sistema FTCDC¹⁷

	L1 (kmol/h)	V3 (kmol/h)	NT _{s1}	N _{L1}	NT _{s2}	N _{V3}	NT _{s3}	N _{SD}	N _F	NT _c	NT _p
Caso 1	184	272	16	58	48	10	10	32	11	74	19
Caso 2	213	286	13	61	50	11	11	34	10	74	19
Caso 3	164	251	19	55	39	16	16	33	12	74	19
Caso 4	164	263	15	59	52	7	7	30	12	74	19

Relativamente ao sistema tradicional:

- Para os casos 1, 2 e 3, a melhor sequência em termos de consumos energéticos é a sequência indireta;
- Para o caso 4, a sequência otimizada que apresenta o menor consumo energético é a sequência direta, o que se coaduna com a heurística que indica que se deve primeiramente proceder à separação do produto cujo componente se encontre em maior quantidade na alimentação, tendo que para o caso 4 o componente em maior fração na alimentação é o componente leve;

O aumento da composição da alimentação em componente leve resulta também no acréscimo significativo do número de pratos na coluna 1 ao passo que a variação para os restantes casos não é tão significativa.

Relativamente ao sistema FTCDC:

- O aumento da composição em componente pesado (caso 2) resulta numa mais significativa variação dos caudais das correntes de interligação ao passo que apenas se verifica uma ligeira variação na posição dos pratos alimentação/extração;
- O aumento da composição no componente intermediário (caso 3) tem um significativo impacto na secção intermédia, cuja altura diminui significativamente, e sendo esta definida pelas posições dos pratos de alimentação/extração das correntes de interligação, promove um aumento de diferentes proporção das secções inferior e superior;
- O aumento da composição em componente leve (caso 4) conduz ao aumento da altura da secção intermédia com subsequente diminuição da altura das secções inferior e superior, sendo esta diminuição mais significativa na secção inferior;
- Quer no caso 3, quer no caso 4, verifica-se ainda uma ligeira diminuição dos caudais destas correntes relativamente ao caso da composição equimolar da alimentação (caso 1).

¹⁶ Pratos numerados a partir da base da coluna

¹⁷ Pratos numerados a partir da base da coluna

Na [figura 67](#), [figura 68](#) e [figura 69](#) apresentam-se os *flowsheets* relativos à simulação de cada um dos sistemas, tradicional sequência direta e indireta e FTCDC, após dimensionamento.

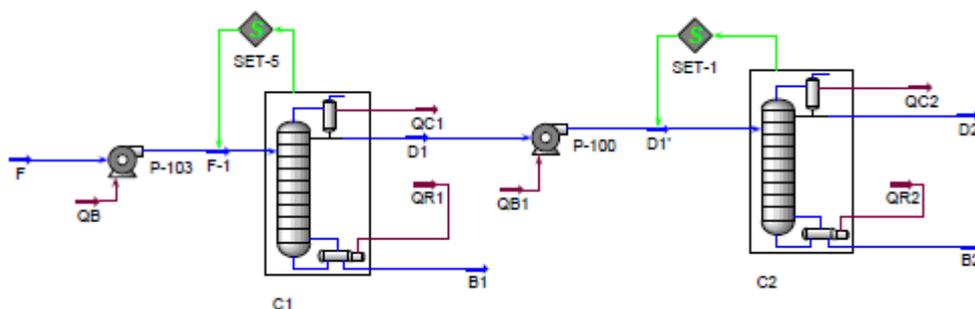


Figura 67 – Estudos preliminares de otimização: *flowsheet*, sequência indireta, dimensionado

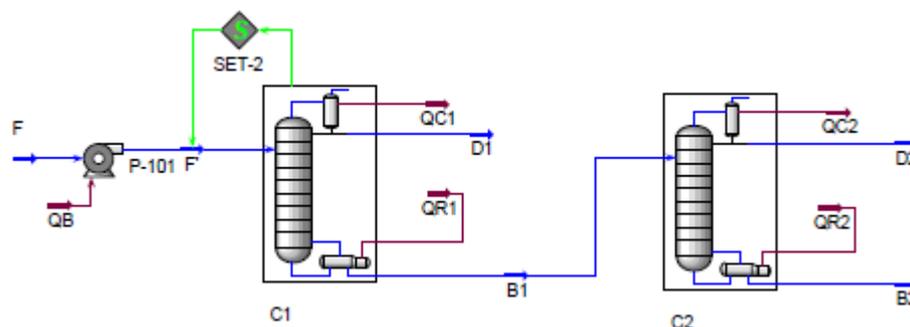


Figura 68 – Estudos preliminares de otimização: *flowsheet*, sequência direta, dimensionado

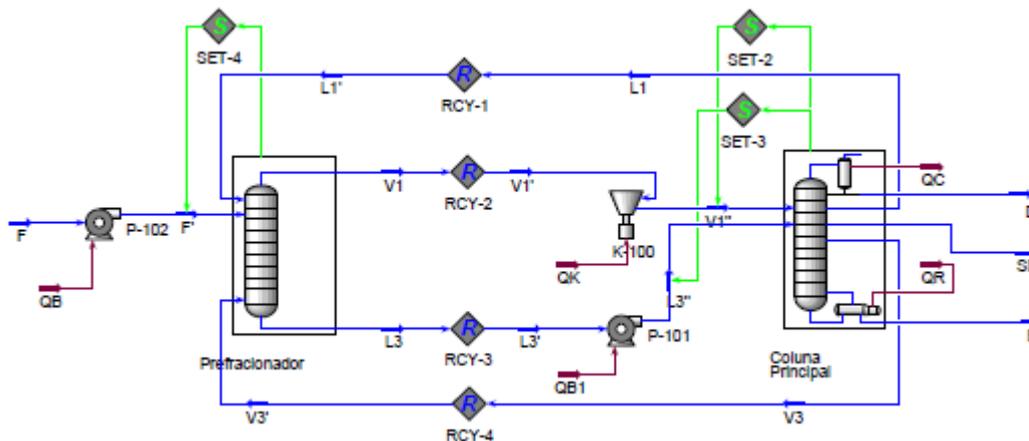


Figura 69 – Estudos preliminares de otimização: *flowsheet* sistema FTCDC dimensionado

Na [tabela 62](#), [tabela 63](#) e [tabela 64](#) é analisado o efeito nas respostas de otimização (consumo energético) e nos custos, de uma ligeira variação de composição (casos 1.1, 1.2 e 1.3) sem alteração dos valores das variáveis de otimização obtidos para o caso 1.

Tabela 62 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados – caso 1

	QT _{ST} (kJ/h)	Variação QT _{ST} (%)	QT _{FTCDC} (kJ/h)	Variação QT _{FTCDC} (%)	Diferença de QT (%) relativo ao ST
Caso 1	4,27E+07		3,82E+07		-10,49%
Caso 1.1	4,15E+07	-2,72%	3,85E+07	0,70%	-7,33%
Caso 1.2	4,28E+07	0,19%	3,85E+07	0,69%	-10,04%
Caso 1.3	4,37E+07	2,44%	3,82E+07	0,09%	-12,54%

De acordo com os resultados obtidos, verifica-se que:

- Quando a composição da alimentação é mais rica no componente pesado (caso 1.1) enquanto no sistema tradicional se observa um menor consumo energético, o sistema FTCDC apresenta o maior incremento de consumo.
- Para a alimentação mais rica em componente intermediário (caso 1.3) conduz ao maior acréscimo de consumo energético no sistema tradicional ao passo que no sistema FTCDC ainda que se verifique um ligeiro acréscimo este não é tão significativo comparativamente com o sistema tradicional;
- Globalmente o sistema FTCDC é mais favorável energeticamente, conduzindo a poupanças energéticas de cerca de 10%. No entanto, após o dimensionamento, com a introdução da perda de carga em ambos os sistemas esta poupança diminui bastante conforme se verifica pelos resultados apresentados na [tabela 63](#).

Tabela 63 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados após dimensionamento – caso 1

	QT _{ST} (kJ/h)	Variação QT _{ST} (%)	QT _{FTCDC} (kJ/h)	Variação QT _{FTCDC} (%)	Diferença de QT (%) relativo ao ST
Caso 1	4,35E+07		4,13E+07		-5,18%
Caso 1.1	4,23E+07	-2,82%	4,19E+07	1,50%	-0,97%
Caso 1.2	4,36E+07	0,21%	4,06E+07	-1,70%	-7,00%
Caso 1.3	4,46E+07	2,57%	4,16E+07	0,73%	-6,88%

Ainda que o sistema FTCDC se apresente como o sistema mais favorável energeticamente, em termos de custos totais o mesmo não se verifica, tendo que o seu custo para todos os casos em análise resulta superior ao apresentado pelo sistema tradicional.

Tabela 64 – Estudos preliminares de otimização: custo total dos sistemas ST e FTCDC otimizados – caso 1

	Custo total ST (\$/ano)	Variação do custo total ST (\$/ano)	Custo total FTCDC (\$/ano)	Variação do custo total FTCDC (\$/ano)	Diferença do custo total (\$/ano) relativo ao ST
Caso 1	1,16E+07		1,20E+07		3,70%
Caso 1.1	1,16E+07	-0,52%	1,21E+07	0,66%	4,94%
Caso 1.2	1,17E+07	0,49%	1,20E+07	-0,50%	2,68%
Caso 1.3	1,18E+07	1,24%	1,20E+07	-0,08%	2,35%

Na [tabela 66](#), [tabela 67](#) e [tabela 68](#) apresentam-se os resultados de avaliação do efeito da variação de composição (casos 2, 3 e 4) nas respostas de otimização (consumo energético) e nos custos, após otimização estrutural e dos caudais das correntes de interligação no sistema FTCDC, cujos valores das variáveis em

otimização se apresentaram na [tabela 64](#) e [tabela 65](#), para cada um dos casos em análise. Partindo do design estrutural obtido para o caso 1, os casos identificados como 2.1, 3.1 e 4.1 dizem respeito aos resultados obtidos otimizando apenas os caudais das correntes de interligação no sistema FTCDC para a variação da composição da alimentação estabelecida para os casos 2, 3 e 4, respetivamente.

Tabela 65 – Estudos preliminares de otimização: valores de L1 e V3 otimizadas do sistema FTCDC – casos 2.1, 3.1 e 4.1

	L1 (kmol/h)	V3 (kmol/h)
Caso 1	184	272
Caso 2.1	223	298
Caso 3.1	140	231
Caso 4.1	180	279

Tabela 66 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados

	QT _{ST} (kJ/h)	Variação QT _{ST} (%)	QT _{FTCDC} (kJ/h)	Variação QT _{FTCDC} (%)	Diferença de QT (%) relativo ao ST
Caso 1	4,27E+07		3,82E+07		-10,49%
Caso 2	3,69E+07	-13,47%	3,66E+07	-4,30%	-1,01%
Caso 2.1	3,70E+07	-13,23%	3,77E+07	-1,25%	1,86%
Caso 3	4,74E+07	10,96%	3,63E+07	-5,05%	-23,40%
Caso 3.1	4,77E+07	11,70%	3,78E+07	-1,16%	-20,79%
Caso 4	3,89E+07	-8,82%	3,73E+07	-2,33%	-4,12%
Caso 4.1	4,28E+07	0,35%	3,93E+07	2,77%	-8,32%

Relativamente aos casos 2, 3 e 4:

- À semelhança do verificado anteriormente, a variação da composição com aumento da fração do componente intermediário (caso 3) conduz a um acréscimo significativo em termos de consumo energético no sistema tradicional, não obstante da otimização do sistema, ao contrário do que ocorre no sistema FTCDC, tendo que para este se verifica a diminuição do consumo energético para todos os casos, relativamente ao caso 1.
- Verifica-se ainda que para o caso 4 (mistura rica no componente leve), ao contrário do que ocorreu nos estudos anteriormente apresentados, com otimização do sistema tradicional para esta composição, tendo que tal implica a utilização de uma distinta sequência de separação, resulta num significativo decréscimo do consumo energético, ainda que o menor consumo se verifique no caso 2 (mistura rica no componente pesado).
- Globalmente o sistema FTCDC é o mais favorável, no entanto, a mais significativa poupança energética apresenta-se com uma alimentação rica em componente intermediário.

Relativamente aos casos 2.1, 3.1 e 4.1, sem otimização estrutural de ambos os sistemas, verifica-se que:

- Relativamente ao sistema tradicional, com a variação de composição imposta no caso 4.1, a variação de consumo de energia relativamente ao caso 1 não é significativa, ao contrário do que sucede com os casos

2.1 e 3.1, cuja variação é similar à obtida com a otimização estrutural do sistema. Comparando os resultados dos casos 4.1 e 4, verifica-se um acréscimo significativo do consumo energético;

- Relativamente ao sistema FTCDC, a variação de energia relativamente ao caso 1 é menos significativa comparativamente com a obtida com a otimização estrutural, verificando-se globalmente um acréscimo relativo do consumo de energia.

Enquanto com a otimização estrutural o sistema FTCDC é o mais favorável energeticamente para todos os casos, sem esta verifica-se a inversão deste resultado para o caso 2.1, tornando o sistema tradicional mais favorável. No entanto o menor consumo de energia do sistema FTCDC relativamente ao sistema tradicional verificado no caso 4 acresce no caso 4.1. Tal reflete-se nos resultados obtidos após dimensionamento dos sistemas ([tabela 67](#))

- Com o dimensionamento dos sistemas, a diferença de consumo energético inicialmente verificada diminui, tendo que apenas para os casos 1 e 3 o sistema FTCDC continua a ser o mais favorável. Sem a otimização estrutural o sistema FTCDC é também mais favorável relativamente ao caso 4.1.

Tabela 67 – Estudos preliminares de otimização: consumo energético total dos sistemas ST e FTCDC otimizados após dimensionamento

	QT _{ST} (kJ/h)	Variação QT _{ST} (%)	QT _{FTCDC} (kJ/h)	Variação QT _{FTCDC} (%)	Diferença de QT (%) relativo ao ST
Caso 1	4,35E+07		4,13E+07		-5,18%
Caso 2	3,76E+07	-13,65%	3,92E+07	-4,93%	4,39%
Caso 2.1	3,77E+07	-13,48%	4,12E+07	-0,05%	9,53%
Caso 3	4,83E+07	10,98%	3,78E+07	-8,47%	-21,80%
Caso 3.1	4,88E+07	12,01%	4,01E+07	-2,84%	-17,75%
Caso 4	3,97E+07	-8,85%	4,11E+07	-0,34%	3,66%
Caso 4.1	4,37E+07	0,40%	4,23E+07	2,58%	-3,13%

Relativamente aos custos totais dos sistemas ([tabela 68](#)):

- O sistema FTCDC apenas é mais favorável para o caso 3, o que se deverá à significativa diferença de consumo energético verificada.

Tabela 68 – Estudos preliminares de otimização: custo total dos sistemas ST e FTCDC otimizados

	Custo total ST (\$/ano)	Variação do custo total ST (\$/ano)	Custo total FTCDC (\$/ano)	Variação do custo total FTCDC (\$/ano)	Diferença do custo total (\$/ano) relativo ao ST
Caso 1	1,16E+07		1,20E+07		3,70%
Caso 2	1,10E+07	-5,23%	1,19E+07	-1,39%	7,90%
Caso 2.1	1,10E+07	-5,08%	1,21E+07	0,54%	9,35%
Caso 3	1,21E+07	3,98%	1,17E+07	-2,92%	-3,19%
Caso 3.1	1,21E+07	4,31%	1,18E+07	-1,22%	-2,23%
Caso 4	1,13E+07	-2,81%	1,20E+07	-0,48%	6,19%
Caso 4.1	1,16E+07	0,09%	1,23E+07	2,96%	6,20%

Os resultados obtidos denotam que ainda que o sistema FTCDC seja mais favorável em termos energéticos, tal pode não se refletir nos custos uma vez que, ainda que se esteja a comparar sistemas com o mesmo

número total de pratos, com os superiores caudais internos do sistema FTCDC registados, tal reflete-se nos diâmetros das colunas, com o associado acréscimo de custos.

Adicionalmente, consequência da introdução de perdas de cargas nas colunas, foi introduzida no sistema FTCDC, para além de bombas nas correntes líquidas com pressão inferior à do respetivo prato de alimentação, um compressor para assegurar o fluxo de vapor entre as colunas, ao passo que no sistema tradicional apenas foi necessária na introdução de bombas.

Relativo ao procedimento otimização adotado para estes estudos preliminares, comparativamente, o número de simulação necessárias para otimização do sistema FTCDC é significativamente mais elevado, sendo igualmente de maior complexidade, tornando o processo de otimização muito dispendioso em termos de tempo.

Anexo 5. PROCEDIMENTO DE ANÁLISE PARA *DESIGNS* FATORIAIS

O procedimento aplicado na análise dos resultados obtidos por design fatorial encontra-se descrito em *Introduction to Statistical Quality Control* [64], no qual se enuncia os seguintes passos como procedimento de análise:

1. Estimativa do efeito dos fatores;
2. Formação do modelo preliminar;
3. Teste da significância dos efeitos dos fatores;
4. Análise dos resíduos;
5. Refinação do modelo se necessário;
6. Interpretação dos resultados

Definidos os fatores de otimização i , o efeito de cada um destes e o efeito da interação entre si, é definido como a mudança de resposta produzida pela alteração do nível de cada fator entre cada simulação/combinacão j , o qual é determinado mediante a aplicacão da [equacão 10](#) e [equacão 11](#).

Para designs fatoriais do tipo 2^k , com k igual ao número total de fatores considerados para *design*, cada fator é variado entre dos níveis, baixo e alto, aos quais se associa o *senal* (-) e (+), respetivamente.

O parâmetro n apresentado na [equacão 10](#) diz respeito ao número de réplicas para cada combinacão de níveis e p ao número de fatores definidos pela combinacão dos fatores cujo nível é estabelecido de forma independente, quando na aplicacão de *design fatorial fracionado*. Através desta técnica efetua-se apenas uma fracão das possíveis combinacões, tendo que p corresponde ao número de fatores definidos por geradores (combinacão dos fatores independentes do design, a qual no presente trabalho foi efetuada segundo o estabelecido em *Introduction to Statistical Quality Control* [64]), e cujos níveis dependem dos níveis estabelecidos para os fatores associados a cada gerador.

$$Efeito_i = \frac{Contraste_i}{n2^{(k-p)-1}} \quad \text{Equacão 10}$$

$$Contraste_i = \sum_i \left(\prod_j (senal_{ij}) \cdot resposta_j \right) \quad \text{Equacão 11}$$

A importância dos fatores e da interação entre estes sobre a resposta medida é avaliada, e uma determinacão preliminar dos principais efeitos é efetuada através da análise da representacão gráfica de probabilidade normal dos efeitos determinados.

Para aplicacão da análise da variância é obtida a soma dos quadrados (SS_i) e o desvio quadrático médio (DQM_i) para cada fator i e interação entre estes, mediante a aplicacão da [equacão 12](#) e [equacão 13](#), respetivamente. O número de graus de liberdade associado a cada fator e interação é de um grau de liberdade.

$$SS_i = \frac{Contraste_i^2}{n2^{(k-p)}} \quad \text{Equação 12}$$

$$DQM_i = \frac{SS_i}{g.l.i} \quad \text{Equação 13}$$

Para réplicas singulares o erro é determinado atendendo à análise prévia dos efeitos, de acordo com a [equação 14](#). O desvio quadrático médio do erro (DQM_{erro}) é calculado de acordo com [equação 13](#), tendo que o número de graus de liberdade corresponde ao número total de fatores e interações determinadas como não significativas.

$$Erro = \sum_{i_{\text{não significativo}}} SS_i \quad \text{Equação 14}$$

$$F_0 = \frac{DQM_i}{DQM_{Erro}} \quad \text{Equação 15}$$

O teste de F sobre o desvio quadrático médio (DQM) permite avaliar/confirmar a significância, determinada pela falta de ajuste, dos efeitos dos fatores e interações considerados previamente como significativos através da comparação do valor de F_0 com o valor obtido para o inverso da distribuição de F para um grau de confiança de 95%.

Quando na aplicação do *design* fatorial fracionado atende-se adicionalmente aos efeitos confundidos, os quais para um design fatorial do tipo 2^{8-4} se apresentam na [tabela 69](#). De forma simplificada deve-se considerar que:

- Atendendo a que geralmente não se verificam efeitos significativos para interações de elevada ordem, quando um fator está confundido com uma interação o efeito significativo está associado ao fator e não à interação;
- Para interações confundidas deve-se atender o efeito dos fatores da interação, tendo que o efeito significativo estará normalmente associado à interação entre fatores cujo efeito seja igualmente significativo.

A formação preliminar do modelo é feita por ajuste da resposta em função dos fatores e interações significativos e essencialmente remove o efeito de localização dos efeitos, tendo que no presente trabalho este ajuste é feito a um modelo de 1ª ordem de acordo com a seguinte expressão:

$$\hat{y} = \beta_0 + \sum_i \beta_i x_i \quad \text{Equação 16}$$

Considerando que β_0 corresponde ao valor médio das respostas obtidas, β_i um meio do efeito do fator i e/ou interação e x_i o nível atribuído ao fator i , atendendo a que para as interações corresponde ao produto

(combinação) dos níveis atribuídos aos fatores que a compõe. A presente expressão só é válida para *designs* fatoriais a dois níveis.

Os resíduos, definidos pela diferença entre o resultado obtido pelo modelo de regressão e o valor de simulação, segundo a [equação 17](#), calculados para todas as possíveis combinações entre os dois níveis simulados para cada fator considerado na regressão, contêm informação sobre inexplicável variabilidade [64] e respetiva validade do modelo obtido.

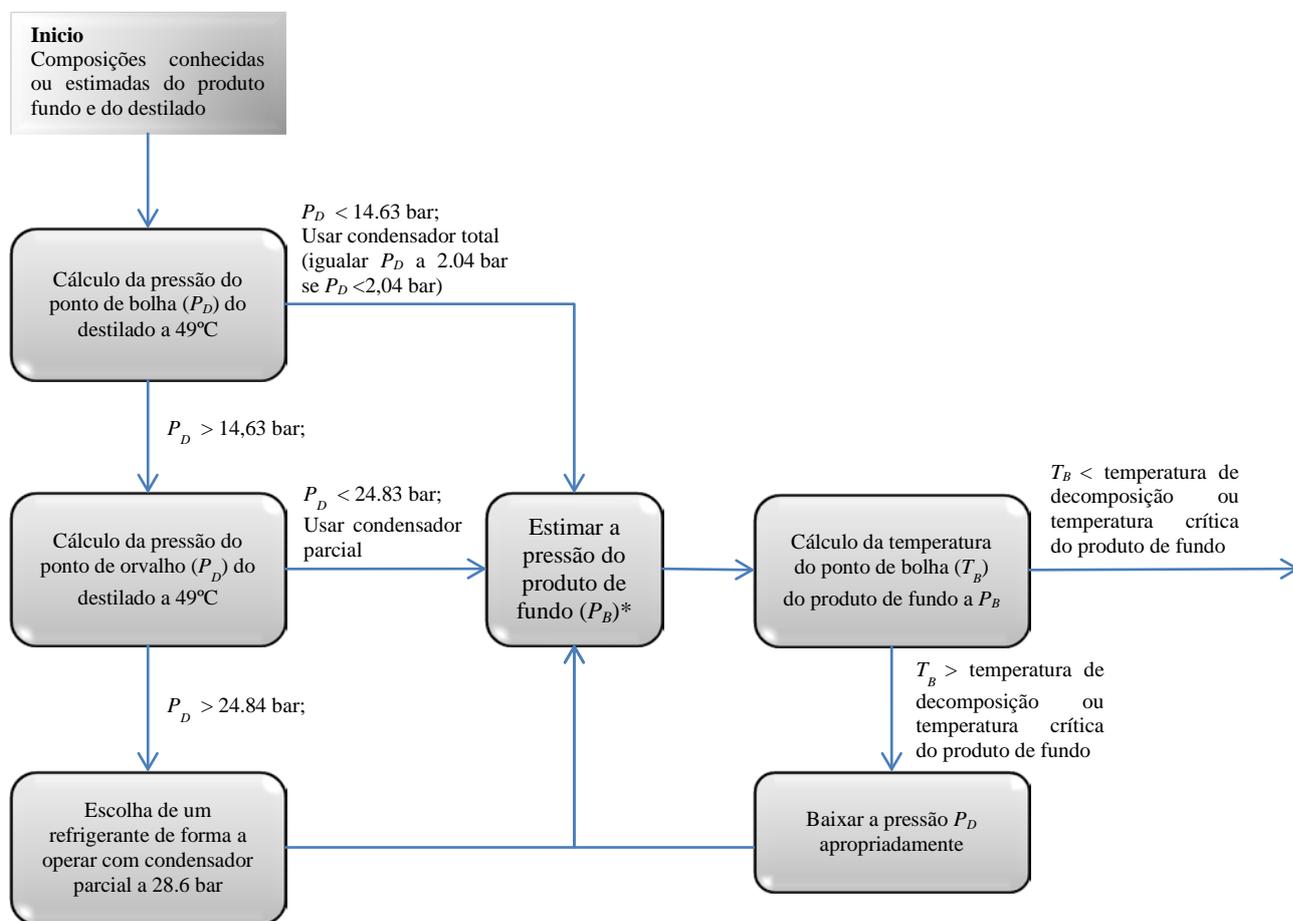
$$e = y - \hat{y} \tag{Equação 17}$$

Uma relação aproximadamente linear entre os resíduos na representação gráfica da probabilidade normal destes bem como a não ocorrência de valores discrepantes indica a inexistência de anomalias nos dados e a adequação do modelo obtido relativo à resposta real.

Tabela 69 – Tabela de efeitos confundidos para um design fatorial fracionado 2⁸⁻⁴

Combinações	1	2	3	4	12	13	14	23	24	34	123	124	234	134	1234
I	BCDE	ACDF	ABCG	ABDH	ABEF	ADEG	ACEH	BDFG	BCFH	CDGH	CEFG	DEFH	AFGH	BEGH	EFGH
A	ABCDE	CDF	BCG	BDH	BEF	DEG	CEH	ABDFG	ABCFH	ACDGH	ACEFG	ADEFH	FGH	ABEGH	AIEFGH
B	CDE	ABCDF	ACG	ADH	AEF	ABDEG	ABCEH	DFG	CFH	BCDGH	BCEFG	BDEFH	ABFGH	EGH	BEFGH
AB	ACDE	BCDF	CG	DH	EF	BDEG	ABCEH	ADFG	ACFH	ABCDGH	ABCEFG	ABDEFH	BFGH	AEGH	ABIEFGH
C	BDE	ADF	ABG	ABCDH	ABCEF	ACDEG	AEH	BCDFG	BFH	DGH	EFG	CDEFH	ACFGH	BCEGH	CEFGH
AC	ABDE	DF	BG	BCDH	BCEF	CDEG	EH	ABCDFG	ABFH	ADGH	AEFG	ACDEFH	CFGH	ABCEGH	ACEFGH
BC	DE	ABDF	AG	ACDH	ACEF	ABCDEG	ABEH	CDFG	FH	BDGH	BEFG	BCDEFH	ABCFGH	CEGH	BCEFGH
ABC	ADE	BDF	G	CDH	CEF	BCDEG	BEH	ACDFG	AFH	ABDGH	ABIEFG	ABCDEFH	BCFGH	ACEGH	ABCEFGH
D	BCE	ACF	ABCDG	ABH	ABDEF	AEG	ACDEH	BFG	BCDFH	CGH	CDEFG	EFH	ADFGH	BDEGH	DEFGH
AD	ABCE	CF	BCDG	BH	BDEF	EG	CDEH	ABFG	ABCDFH	ACGH	ACIEFG	AEFH	DFGH	ABDEGH	AIEFGH
BD	CE	ABCF	ACDG	AH	ADEF	ABEG	ABCDEH	FG	CDFH	BCGH	BCIEFG	BEFH	ABDFGH	DEGH	BIEFGH
ABD	ACE	BCF	CDG	H	DEF	BEG	BCDEH	AFG	ACDFH	ABCGH	ABCIEFG	ABEFH	BDFGH	AIEGH	ABIEFGH
CD	BE	AF	ABDG	ABCH	ABCDEF	ACEG	ADEH	BCFG	BDFH	GH	DEFG	CEFH	ACDFGH	BCIEGH	CIEFGH
ACD	ABE	F	BDG	BCH	BCDEF	CEG	DEH	ABCFG	ABDFH	AGH	AIEFG	ACEFH	CDFGH	ABCIEGH	ACIEFGH
BCD	E	ABF	ADG	ACH	ACDEF	ABCEG	ABIEH	CFG	DFH	BGH	BIEFG	BCEFH	BCDAFGH	CIEGH	BCIEFGH
ABCD	AE	BF	DG	CH	CDEF	BCEG	BIEH	ACFG	ADFH	ABGH	ABIEFG	ABCEFH	BCDFGH	ACIEGH	ABCIEFGH

Anexo 6. ALGORITMO PARA DETERMINAÇÃO DA PRESSÃO DE OPERAÇÃO



*atender á queda de pressão ao longo da coluna

Figura 70 – Algoritmo para estabelecer a pressão da coluna de destilação e do tipo de condensador

(Adaptado de: Seider et al., “Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Design”, 2010)

Anexo 7. ESTUDOS DE CONTROLO

a. AVALIAÇÃO RGA

O cálculo da matriz de ganhos relativos (RGA – *Relative Gain Array*) é baseado no procedimento por experimentação apresentado por Svrcek et. al em “A Real-Time Approach to Process Control”[14].

Relativamente às propriedades da RGA e respetiva avaliação deve-se atender ao seguinte:

1. A soma dos elementos da RGA de qualquer linha ou qualquer coluna é igual a 1

$$\sum_{i=1}^n \lambda_{ij} = \sum_{j=1}^n \lambda_{ij} = 1$$

Equação 18

Pelo que no caso de sistemas 2X2 apenas 1 elemento de ganho relativo necessita de ser calculado;

2. λ_{ij} é adimensional e não afetado pela escala;
3. Se $\lambda_{ij}=0$ então a variável manipulada m_j não tem qualquer efeito na variável controlada y_i ;
4. Se $\lambda_{ij}=1$ implica que m_j afeta y_i sem interação de qualquer outra malha de controlo, o seu ganho é igual quando todas as outras malhas de controlo estão abertas ou fechadas;
5. Se $\lambda_{ij}<0$ significa que o sistema é potencialmente instável quando m_j é emparelhado com y_i ou responderá inicialmente de forma oposta ao que realmente está acontecer. A interação das outras malhas é mais dominante que a interação do emparelhamento;
6. Se $0 < \lambda_{ij} < 1$ significa que outras malhas de controlo estão a interagir com a malha de controlo ($m_j - y_i$). Se $\lambda_{ij}=0,5$ então o efeito do par de controlo é igual ao efeito retaliatório das outras malhas. $\lambda_{ij}<0,5$ indica que outras malhas de controlo tem maior influência no par de controlo que ele mesmo. Com $\lambda_{ij}>0,5$ o par de controlo ($m_j - y_i$) tem maior efeito que as outras malhas.
7. Se $\lambda_{ij}>1$ o ganho em malha aberta do par ($m_j - y_i$) é maior que o seu ganho quando todas as outras malhas estão fechadas. Isto indica que as outras malhas estão a influenciar o par na direção oposta. No entanto o ganho relativo é ainda superior a zero e então o par ($m_j - y_i$) é dominante. De notar que quanto maior o valor de λ_{ij} maior o efeito retaliatório das outras malhas de controlo e tal pode resultar na instabilidade do par de controlo quando as outras malhas estão abertas.

A escolha do passo nas variáveis manipuladas atende à não linearidade das colunas, apresentando-se os resultados para alterações na ordem do 0,1%. As matrizes de ganhos relativos obtidas para a coluna 1 e 2 do sistema tradicional dizem respeito ao sistema controlo de composição 2X2, com [R, QR1] para [x_D , x_B], enquanto a RGA obtida para o sistema FTCDC diz respeito ao sistema controlo de composição 3X3, com [R, SD, QR1] para [x_D , x_{SD} , x_B].

Os elementos das matrizes foram obtidos mediante simulação considerando a [equação 19](#).

$$\lambda_{ij} = \frac{g_{ij}}{g_{ij}^*}$$

Equação 19

Onde g_{ij} corresponde ao ganho em estado estacionário entre variável controlada (y_i) e a variável manipulada (m_j), com todas as malhas abertas, ou seja especificando o valor das outras variáveis manipuladas e g^*_{ij} corresponde ao ganho y_i e m_j , com todas as malhas fechadas e em ‘perfeito controlo’ excepto malha de m_j , ou seja especificando o valor das outras variáveis controladas ([equação 20](#) e [equação 21](#))

$$g_{ij} = \left(\frac{\partial y_i}{\partial m_j} \right)_m = \frac{\Delta y_i}{\Delta m_j} \quad \text{Equação 20}$$

$$g^*_{ij} = \left(\frac{\partial y_i}{\partial m_j} \right)_y = \frac{\Delta y_i}{\Delta m_j} \quad \text{Equação 21}$$

Conforme se pode observar na [tabela 70](#) e [tabela 71](#), todos os elementos de cada RGA para o sistema tradicional, coluna 1 e coluna 2 respetivamente, foram determinados mediante simulação, obtendo-se a seguintes matrizes:

$$A(c1) = \begin{bmatrix} 11,69 & -13,26 \\ -13,36 & 12,60 \end{bmatrix} \quad \text{Equação 22}$$

$$A(c2) = \begin{bmatrix} 19,04 & -21,31 \\ -16,48 & 14,95 \end{bmatrix} \quad \text{Equação 23}$$

Devido á não linearidade do sistema, mesmo para a baixa variação imposta nas variáveis manipuladas, verifica-se que a soma dos elementos em cada linha e coluna é diferente de 1 para ambas as matrizes determinadas. Usando λ_{11} para determinação da RGA de cada coluna obtêm-se as seguintes matrizes:

$$RGA(c1) = \begin{bmatrix} 11,69 & -10,69 \\ -10,69 & 11,69 \end{bmatrix} \quad \text{Equação 24}$$

$$RGA(c2) = \begin{bmatrix} 19,04 & -18,04 \\ -18,04 & 19,04 \end{bmatrix} \quad \text{Equação 25}$$

Comparando com os elementos efetivamente determinados ([equação 22](#) e [equação 23](#)), ainda que a diferença seja notória, a avaliação da razão entre os ganhos relativos em malha aberta e em malha fechada respeitante a cada um dos elementos conduz às mesmas conclusões relativamente ao emparelhamento das variáveis para este sistema. Atendendo a estes resultados conclui-se que sendo este emparelhamento possível é expectável uma elevada interação entre as malhas de controlo de composição estabelecidas.

No sistema FTCDC, relativamente á propriedade unitária da soma dos elementos de cada linha e coluna desta matriz, o seu incumprimento devido à não linearidade deste sistema é ainda mais notório, comparativamente com o sistema tradicional. De forma similar ao sistema tradicional, todos os elementos da RGA foram obtidos por simulação ([tabela 72](#)). Considerando todos os elementos λ_{ij} efetivamente determinados obtêm-se seguinte matriz:

$$A(c) = \begin{bmatrix} 19,20 & -8,40 & -36,21 \\ -0,11 & 0,59 & 0,51 \\ -18,10 & -14,45 & 16,93 \end{bmatrix} \quad \text{Equação 26}$$

Da qual se conclui que o emparelhamento x_B -SD não deve ser efetuado, uma vez que o ganho relativo associado ao mesmo é inferior a zero.

À semelhança do verificado para o sistema tradicional, a soma dos elementos em cada linha e coluna é diferente de 1. Usando apenas λ_{11} , λ_{12} , λ_{21} e λ_{22} para determinar a RGA obtém-se:

$$RGA(c) = \begin{bmatrix} 19,20 & -8,40 & -9,80 \\ -0,11 & 0,59 & 0,52 \\ -18,10 & 8,82 & 10,28 \end{bmatrix} \quad \text{Equação 27}$$

Da qual se concluiria que o emparelhamento entre x_{SD} seria possível quer com SD quer com QR, tal como x_B poderia ser emparelhado com qualquer uma destas variáveis manipuladas.

Tabela 70 – Avaliação RGA da configuração-LV para a coluna 1 do sistema ST

	Caso base	Novos valores		g_{11}	g^*_{11}	λ_{11}
x_{D1}	1,003E-02	8,88E-03	9,927E-03	-4,22E-03	-3,61E-04	11,69
x_{B1}	0,9750		0,9750			
R1	272,5056	272,77810459	272,7781			
QR1	9,0848E+06	9,0848E+06				
				g_{12}	g^*_{12}	λ_{12}
x_{D1}	1,003E-02	1,12E-02	9,937E-03	1,31E-07	-9,78E-09	-13,36
x_{B1}	0,9750		0,9750			
R1	272,5056	272,5056				
QR1	9,0848E+06	9,0939E+06	9,0939E+06			
				g_{21}	g^*_{21}	λ_{21}
x_{D1}	1,003E-02		1,003E-02	-1,61E-02	1,22E-03	-13,26
x_{B1}	0,9750	0,9706	0,9753			
R1	272,5056	272,7781	272,7781			
QR1	9,0848E+06	9,0848E+06				
				g_{22}	g^*_{22}	λ_{22}
x_{D1}	1,003E-02		1,003E-02	3,79E-07	3,01E-08	12,60
x_{B1}	0,9750	0,9784	0,9753			
R1	272,5056	272,5056				
QR1	9,0848E+06	9,0939E+06	9,0939E+06			

Tabela 71 – Avaliação RGA da configuração-LV para a coluna 2 do sistema ST

	Caso base	Novos valores		g_{11}	g^*_{11}	λ_{11}
x_{D2}	0,9750	0,9786	0,9752	1,58E-02	8,27E-04	19,04
x_{B2}	0,9500		0,9500			
R2	231,3743	231,6057	231,6057			
QR2	1,0331E+07	1,0331E+07				
				g_{12}	g^*_{12}	λ_{12}
x_{D2}	0,9750	0,9724	0,9752	-2,50E-07	1,52E-08	-16,48
x_{B2}	0,9500		0,9500			
R2	231,3743	231,3743				
QR2	1,0331E+07	1,0341E+07	1,0341E+07			
				g_{21}	g^*_{21}	λ_{21}
x_{D2}	0,9750		0,9750	-1,63E-02	7,65E-04	-21,31
x_{B2}	0,9500	0,9462	0,9502			
R2	231,3743	231,6057	231,6057			
QR2	1,0331E+07	1,0331E+07				
				g_{22}	g^*_{22}	λ_{22}
x_{D2}	0,9750		0,9750	2,00E-07	1,34E-08	14,95
x_{B2}	0,9500	0,9521	0,9501			
R2	231,3743	231,3743				
QR2	1,0331E+07	1,0341E+07	1,0341E+07			

Tabela 72 – Avaliação RGA da configuração-LV para o sistema FTDC

	Caso base	Novos valores		g_{11}	g^*_{11}	λ_{11}
x_D	0,9750	0,9910	0,9771	3,41E-03	4,54E-04	7,52
x_{SD}	0,9500		0,9500			
x_B	0,9750		0,9750			
R	469,9560	474,6555	474,6555			
SD	33,34133	33,3413				
QR	1,9621E+07	1,9621E+07				
				g_{12}	g^*_{12}	λ_{12}
x_D	0,9750	0,9750	0,9845	2,07E-05	2,85E-02	0,00
x_{SD}	0,9500		0,9500			
x_B	0,9750		0,9750			
R	469,9560	469,9560				
SD	33,34133	33,6747	33,6747			
QR	1,9621E+07	1,9621E+07				
				g_{13}	g^*_{13}	λ_{13}
x_D	0,9750	0,8917	0,9773	-4,24E-07	1,19E-08	-35,76
x_{SD}	0,9500		0,9500			
x_B	0,9750		0,9750			
R	469,9560	474,6555				
SD	33,34133	33,3413				
QR	1,9621E+07	1,9818E+07	1,9818E+07			
				g_{21}	g^*_{21}	λ_{21}
x_D	0,9750		0,9750	-2,36E-02	4,47E-04	-52,86
x_{SD}	0,9500	0,8390	0,9521			
x_B	0,9750		0,9750			
R	469,9560	474,6555	474,6555			
SD	33,34133	33,3413				
QR	1,9621E+07	1,9621E+07				
				g_{22}	g^*_{22}	λ_{22}
x_D	0,9750		0,9750	-1,85E-02	-2,75E-02	0,67
x_{SD}	0,9500	0,9438	0,9408			
x_B	0,9750		0,9750			
R	469,9560	474,6555				
SD	33,34133	33,6747	33,67474193			
QR	1,9621E+07	1,9621E+07				
				g_{23}	g^*_{23}	λ_{23}
x_D	0,9750		0,9750	-4,33E-07	1,14E-08	-38,03
x_{SD}	0,9500	0,8649	0,9522			
x_B	0,9750		0,9750			
R	469,9560	474,6555				
SD	33,34133	33,3413				
QR	1,9621E+07	1,9818E+07	1,9818E+07			
				g_{31}	g^*_{31}	λ_{31}
x_D	0,9750		0,9750	-2,33E-02	3,40E-04	-68,49
x_{SD}	0,9500		0,9500			
x_B	0,9750	0,8657	0,9766			
R	469,9560	474,6555	474,6555			
SD	33,34133	33,3413				
QR	1,9621E+07	1,9621E+07				
				g_{32}	g^*_{32}	λ_{32}
x_D	0,9750		0,9750	-6,93E-06	-2,16E-05	0,32
x_{SD}	0,9500		0,9500			
x_B	0,9750	0,9780	0,9844			
R	469,9560	474,6555				
SD	33,34133	33,6747	33,6747			
QR	1,9621E+07	1,9621E+07				
				g_{33}	g^*_{33}	λ_{33}
x_D	0,9750		0,9750	3,55E-08	8,61E-09	4,12
x_{SD}	0,9500		0,9500			
x_B	0,9750	0,9820	0,9767			
R	469,9560	474,6555				
SD	33,34133	33,3413				
QR	1,9621E+07	1,9818E+07	1,9818E+07			

b. PERTURBAÇÕES

Tabela 73 – Efeito da alteração do caudal e composição da alimentação (1%) nas variáveis manipuladas para o sistema ST em modo de estado estacionário

	Variáveis	Caso base	Valores simulados	Variação relativa ao caso base	Valores simulados	Variação relativa ao caso base
Caudal da alimentação	F	100	101,00	1,00%	100,00	0,00%
Composição da alimentação	x_A	0,33	0,33	0,00%	0,3367	1,00%
	x_B	0,33	0,33	0,00%	0,3317	-0,50%
	x_C	0,33	0,33	0,00%	0,3317	-0,50%
Coluna 1						
Calor removido no condensador (kJ/h)	QC1	-1,30E+07	-1,31E+07	1,00%	-1,29E+07	-0,18%
Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	QR1	9,08E+06	9,18E+06	1,00%	9,06E+06	-0,25%
Caudal refluxo (kmol/h)	R1	272,50	275,24	1,00%	271,77	-0,27%
Caudal da corrente D1 (kmol/h)	D1	66,50	67,16	1,00%	66,66	0,25%
Caudal da corrente B1 (kmol/h)	B1	33,50	33,84	1,00%	33,34	-0,50%
Coluna 2						
Calor removido no condensador (kJ/h)	QC2	-1,08E+07	-1,09E+07	1,00%	-1,08E+07	0,23%
Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	QR2	1,03E+07	1,04E+07	1,00%	1,04E+07	0,23%
Caudal refluxo (kmol/h)	R2	231,40	233,72	1,00%	231,67	0,12%
Caudal da corrente D2 (kmol/h)	D2	33,15	36,46	10,00%	36,63	10,49%
Caudal da corrente B2 (kmol/h)	B2	33,35	36,68	10,00%	31,55	-5,40%
Caudal da alimentação	F	100	100,00	0,00%	100,00	0,00%
Composição da alimentação	x_A	0,33	0,3317	-0,50%	0,3317	-0,50%
	x_B	0,33	0,3367	1,00%	0,3317	-0,50%
	x_C	0,33	0,3317	-0,50%	0,3367	1,00%
Coluna 1						
Calor removido no condensador (kJ/h)	QC1	-1,30E+07	-1,30E+07	0,18%	-1,30E+07	-0,01%
Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	QR1	9,08E+06	9,11E+06	0,26%	9,08E+06	-0,01%
Caudal refluxo (kmol/h)	R1	272,50	272,92	0,15%	272,82	0,11%
Caudal da corrente D1 (kmol/h)	D1	66,50	66,66	0,25%	66,16	-0,50%
Caudal da corrente B1 (kmol/h)	B1	33,50	33,34	-0,50%	33,84	1,00%
Coluna 2						
Calor removido no condensador (kJ/h)	QC2	-1,08E+07	-1,08E+07	0,14%	-1,08E+07	-0,37%
Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	QR2	1,03E+07	1,03E+07	0,14%	1,03E+07	-0,37%
Caudal refluxo (kmol/h)	R2	231,40	231,98	0,25%	230,57	-0,36%
Caudal da corrente D2 (kmol/h)	D2	33,15	31,22	-5,81%	31,60	-4,68%
Caudal da corrente B2 (kmol/h)	B2	33,35	36,95	10,80%	31,55	-5,40%

Tabela 74 – Efeito da alteração do caudal e composição da alimentação (1%) nas variáveis manipuladas para o sistema FTDCD em modo de estado estacionário

	Variáveis	Caso base	Valores simulados	Variação relativa ao caso base	Valores simulados	Variação relativa ao caso base
Caudal da alimentação	F	100	101,00	1,00%	100,00	0,00%
Composição da alimentação	x _A	0,33	0,33	0,00%	0,3367	1,00%
	x _B	0,33	0,33	0,00%	0,3317	-0,50%
	x _C	0,33	0,33	0,00%	0,3317	-0,50%
Caudal R (kmol/h)	R	469,96	474,81	1,03%	469,69	-0,06%
Caudal D (kmol/h)	D	32,97	33,32	1,07%	33,32	1,08%
Caudal SD (kmol/h)	SD	33,34	33,68	1,00%	33,16	-0,54%
Caudal B (kmol/h)	B	33,69	34,01	0,93%	33,52	-0,52%
Calor removido no condensador (kJ/h)	Q _C	-1,96E+07	-1,98E+07	1,03%	-1,96E+07	0,02%
Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	Q _R	1,96E+07	1,98E+07	1,03%	1,96E+07	0,01%
Caudal da alimentação	F	100	100,00	0,00%	100,00	0,00%
Composição da alimentação	x _A	0,33	0,3317	-0,50%	0,3317	-0,50%
	x _B	0,33	0,3367	1,00%	0,3317	-0,50%
	x _C	0,33	0,3317	-0,50%	0,3367	1,00%
Caudal R (kmol/h)	R	469,96	471,36	0,30%	468,78	-0,25%
Caudal D (kmol/h)	D	32,97	32,78	-0,55%	32,79	-0,53%
Caudal SD (kmol/h)	SD	33,34	33,70	1,07%	33,16	-0,54%
Caudal B (kmol/h)	B	33,69	33,51	-0,53%	34,05	1,05%
Calor removido no condensador (kJ/h)	Q _C	-1,96E+07	-1,96E+07	0,24%	-1,95E+07	-0,27%
Calor fornecido no ebulidor (kJ/h)	Q _R	1,96E+07	1,97E+07	0,26%	1,96E+07	-0,27%