

title here

Felipe B. Pinto 61387 – MIEQB

21 de junho de 2024

Conteúdo

1	Introdução	2	1	NSTAGE	8
2	Planejamento das colunas . . .	3	2	FSTAGE	9
3	Planejamento das Simulações .	4	3	NREFLUX	10
II	Simulações	6	4	FSTAGE.2	11
			5	FSTAGE-2	13

1 Introdução

Pretende-se planejar um processo de destilação adaptado ao fluxo de uma mistura de Benzeno (C_6H_6), Tolueno (C_7H_8) e Cumeno (C_9H_{12}) em duas etapas.

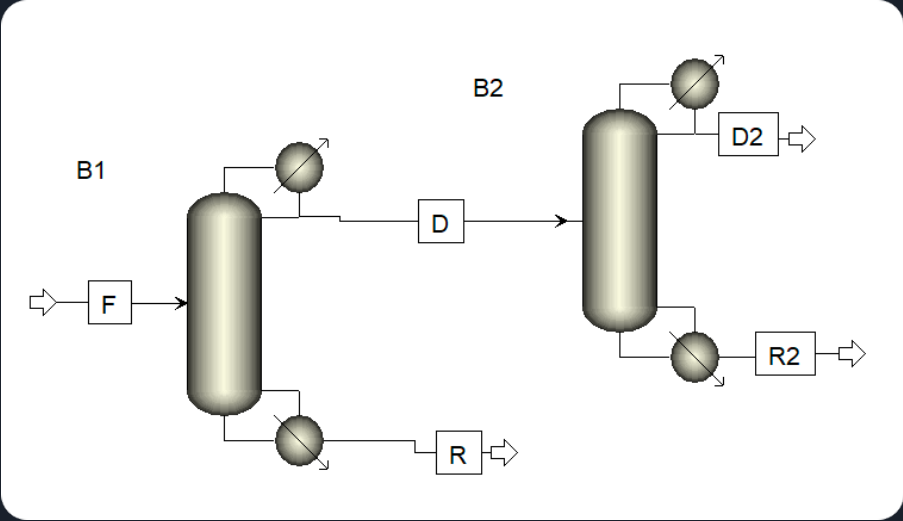


Figura 1: Flowsheet

Composição do Feed (F)

Composto	Fração molar
Benzeno	0.4
Tolueno	0.3
Cumeno	0.3

Tabela 1: Composição do Feed (F) em fração molar de cada composto

Objetivos

Composto	Stream	Reculperação
Cumeno	R	95%
Tolueno	D	95%
Tolueno	R2	99%
Benzeno	D2	99%

Tabela 2: Objetivos de reculperação de cada composto nos streams

Reculperação Mede a fração de fluxo molar de saída comparado com entrada da coluna, para D e R é F, para D2 e R2 é D

Os modelos devem **minimizar os gastos de construção e manutenção**, onde o primeiro esta relacionado com o **numero de colunas** e o segundo a energia gasta para manter a coluna funcionando, que por si se relaciona com o **numero de refluxo** da coluna.

Modelos encontrados

B1				B2			
Modelo	NSTAGES	FSTAGE	RR	Modelo	NSTAGES	FSTAGE	RR
1	8	6	3.299	1	17	8	2.623
2	9	7	2.069	2	18	9	2.251
3	10	7	1.634	3	19	9	2.019
4	11	8	1.432	4	20	10	1.833
5	12	8	1.317				

Tabela 3: Melhores modelos para resolução do problema

Qualquer combinação dos modelos B1 e B2 é uma resposta ao problema, mais a frente será estudado as combinações (1,1),(1,4),(5,1) e (5,4) para prever as características energéticas de todas as combinações possíveis.

NSTAGES Numero de Pratos

FSTAGE Prato de entrada

RR Numero de Refluxo

2 Planejamento das colunas

Composto	Temperatura (°C)
Benzeno	80.1
Tolueno	110.6
Cumeno	152

Tabela 4: Temperatura de ebulição dos compostos

Coluna B1

Nessa coluna pretende-se separar o Cumeno da mistura, por ser o composto menos volátil pela maior temperatura de ebulição, ele ira sair pelo reculperado (R) da primeira coluna (B1), dessa forma o caldal molar desse stream (R) **deve ser 30% do caldal de entrada (F)**, implicando que o caldal molar do **destilado (D) seja 70% do de entrada (F)**.

Coluna B2

Pretendendo separar o Benzeno do tolueno, pelo benzendo ser mais volátil este sairá pelo destilado (D2) e o tolueno pelo resíduo (R2), dessa forma, comparando com o caldal de entrada, deve sair **40% no destilado (D2) e 30% no resíduo (R2)**

Stream	D	R	D2	R2
Fração de Fluxo molar	70%	30%	40%	30%

Tabela 5: Fração de fluxo molar de cada stream de saída das colunas comparado com o de entrada (F)

3 Planejamento das Simulações

Decidimos iniciar as simulações com algumas **condições iniciais**:

- Caldal feed (F): 100 kmol/h
- Feed de entrada B1 e B2: ao meio da coluna
- Numero de refluxo B1 e B2: 2
- Pressão da coluna: 1 bar
- Pressão do Feed: 1.1 bar

Procedimento Tomamos a seguinte **sequencia de simulações**.

1. NSTAGE: onde se processará a coluna B1 variando o numero de pratos, selecionando um range dos melhores.
2. FSTAGE: Variando o prato de entrada da coluna B1 e selecionando o melhor.
3. NREFLUX: se varia o numero de refluxo selecionando o melhor.
4. FSTAGE-2: Onde se varia novamente o prato de entrada para se confirmar com o numero de refluxo, selecionando o melhor.
5. NSTAGE-B2: Mesmo que NSTAGE para o B2
6. FSTAGE-B2: Mesmo que FSTAGE para o B2
7. NREFLUX-B2: Mesmo que NREFLUX para o B2
8. FFLOW: Onde se varia o caldal de entrada para estudar os gastos energéticos

Cada ponto **mantem os melhores parametros do ponto anterior**

Exemplo: em FSTAGE se simula para diferentes entradas as colunas com o numero de pratos encontrados em NSTAGE que é o ponto anterior

3.1 Erro

Ao decorrer das simulações **será avaliado os dados medindo o erro deles**, essa função é útil para poder avaliar modelos com multiplos parametros como para a coluna B1 precisamos otimizar a recuperação do tolueno e do cumeno para 95% no destilado (D) e resíduo (R) respectivamente, somando esses erros temos **um valor que mede o quanto bom é o modelo** englobando ambos os parâmetros.

Error mede em porcentagem a distancia do parametro do objetivo

$$\text{Error}(\text{Objetivo}, \text{Valor}) = \left| 1 - \frac{\text{Valor}}{\text{Objetivo}} \right|$$

$$\text{Error}(0.95, 0.958) \cong 8.421 \text{ E}^{-3}$$

II – Simulações

Coluna B1

1 NSTAGE

Se variou manualmente no Aspen a coluna B1 com diferentes numeros de pratos, a sequencia de uma forma lógica, começamos com 32, e fomos dividindo por 2 até encontrar valores mnores que o pedido, nesse caso foi em 8 pratos, então subiu de 2 em 2 até 16, isso foi feito para poder construir a curva onde se pode ver o vale com menores erros.

Simulação	NSTAGE	Reculperação		Error(.95)
		Tolueno	Cumeno	
1	32	100.00 %	100.00 %	1.192 E ⁻¹
2	16	99.26 %	99.26 %	1.554 E ⁻²
3	8	89.39 %	89.29 %	1.698 E ⁻²
4	10	94.27 %	94.25 %	7.362 E ⁻²
5	12	95.82 %	95.79 %	8.978 E ⁻²
6	14	98.50 %	98.50 %	1.052 E ⁻¹

Tabela 6: Variação do numero de pratos da coluna B1

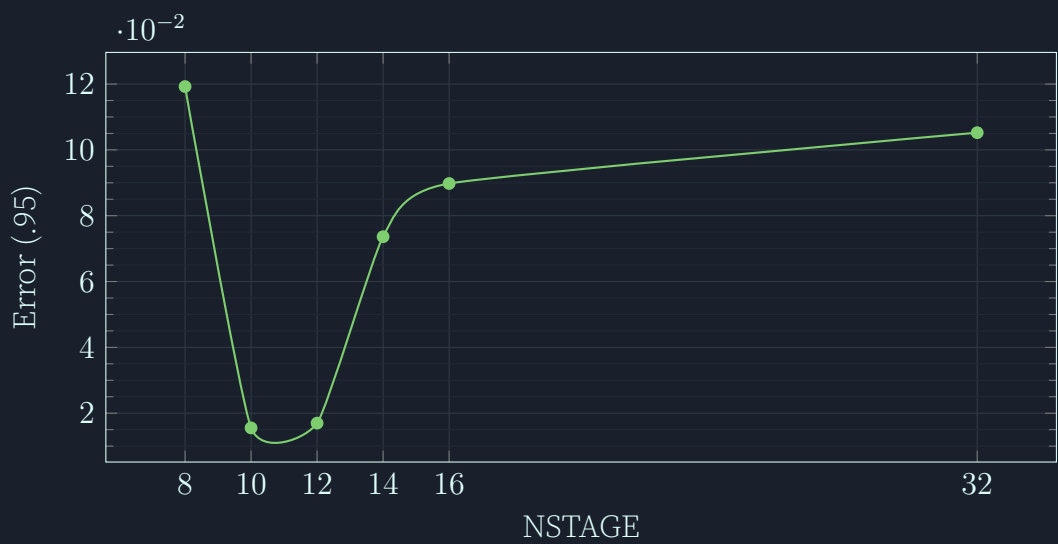


Figura 2: Variação do numero de pratos da coluna B1

Foram selecionados de 8 → 12 (incluindo valores impares) como o numero de pratos para continuar o estudo, valores menores foram selecionados para considerar quantidades menores de pratos.

Algo a se notar é que os valores escolhidos são altamente dependentes do numero de refluxo inicial utilizado, perchance teriamos usado 1 ou 5 como numero de refluxo, teriamos visto o vale orbitando ao redor de 14 → 16 ou 4 → 5 respectivamente, como decidimos 2 como um valor proximo do esperado, continuamos as simulações de acordo.

2 FSTAGE

Usando a análise de sensibilidade S1-FSTAGE, se variou a entrada do feed do meio da coluna até o prato anterior ao ultimo.

Aqui o erro medimos em referencia a 1 por querermos a melhor configuração possível, o ajuste para 95% será feito no passo seguinte.

FSTAGE	Error(1)				
	8	9	10	11	12
4	2.132 E ⁻¹	1.982 E ⁻¹	1.899 E ⁻¹	1.855 E ⁻¹	1.834 E ⁻¹
5	1.556 E ⁻¹	1.308 E ⁻¹	1.148 E ⁻¹	1.049 E ⁻¹	9.929 E ⁻²
6	1.377 E ⁻¹	1.056 E ⁻¹	8.387 E ⁻²	6.929 E ⁻²	5.979 E ⁻²
7	1.445 E ⁻¹	1.018 E ⁻¹	7.421 E ⁻²	5.589 E ⁻²	4.359 E ⁻²
8		1.177 E ⁻¹	7.831 E ⁻²	5.415 E ⁻²	3.872 E ⁻²
9			1.009 E ⁻¹	6.323 E ⁻²	4.130 E ⁻²
10				9.111 E ⁻²	5.391 E ⁻²
11					8.578 E ⁻²

Tabela 7: Variação do prato de entrada da coluna B1 para diferentes numeros de pratos

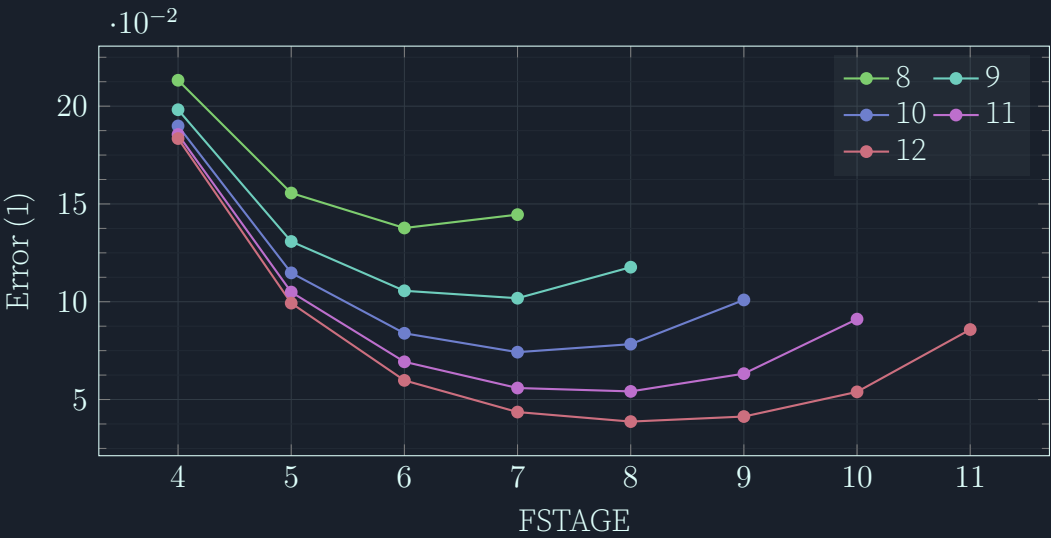


Figura 3: Variação do prato de entrada da coluna B1 para diferentes numeros de pratos

3 NREFLUX

Aqui realizamos a análise de sensibilidade **S2-NREFLUX variando o numero de refluxo de $0.5 \rightarrow 5.0$ em intervalos de 0.1** para cada configuração encontrada até agora.

Em seguida realizamos a análise do *design specks DS-1* tentando otimizar porem percebemos alguma **inconsistencia nos valores** e decidimos realizar uma segunda análise de sensibilidade com uma precisão maior para encontrar os melhores valores.

A **segunda análise** de sensibilidade, continua usando o S2-NREFLUX porem variando com a **precisão de 0.001 indo do menor valor econtrado na análise de sensibilidade anterior ± 0.05** caso o melhor resultado esteja em alguma dessas extremidades realizar para os numeros de refluxo até o próximo valor ja simulado.

Exemplo: Melhor valor encontrado foi 2.000, varia $1.95 \rightarrow 2.05$ variando 0.001 se melhor valor for em 2.05, simular $2.051 \rightarrow 2.099$

NSTAGES	RR	Reculperação		Error
		Tolueno	Cumeno	
Design Specs DS-1				
8	3.222	95.051 %	94.936 %	1.211 E ⁻³
9	2.010	95.026 %	94.847 %	1.884 E ⁻³
10	1.629	95.067 %	94.972 %	1.001 E ⁻³
11	1.426	95.070 %	94.952 %	1.244 E ⁻³
12	1.314	95.028 %	94.967 %	6.425 E ⁻⁴
Best values				
8	3.299	95.109 %	94.997 %	1.177 E ⁻³
9	2.069	95.168 %	94.998 %	1.786 E ⁻³
10	1.634	95.091 %	94.996 %	9.925 E ⁻⁴
11	1.432	95.112 %	94.995 %	1.228 E ⁻³
12	1.317	95.054 %	94.993 %	6.379 E ⁻⁴

Tabela 8: Melhores numeros de refluxo seguindo DS-1 e S2-NREFLUX para coluna B1

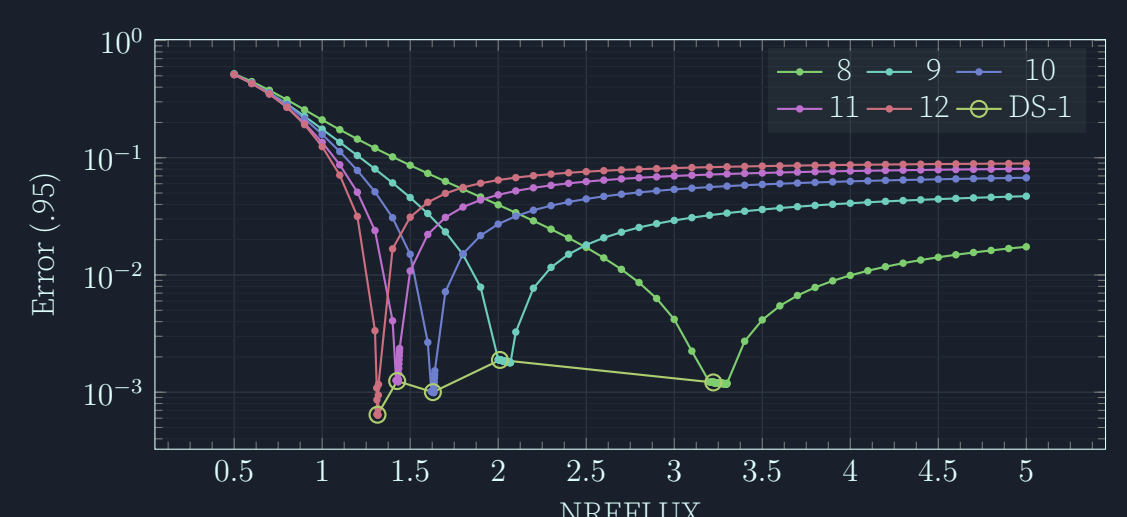


Figura 4: Melhores numeros de refluxo seguindo DS-1 e S2-NREFLUX para coluna B1

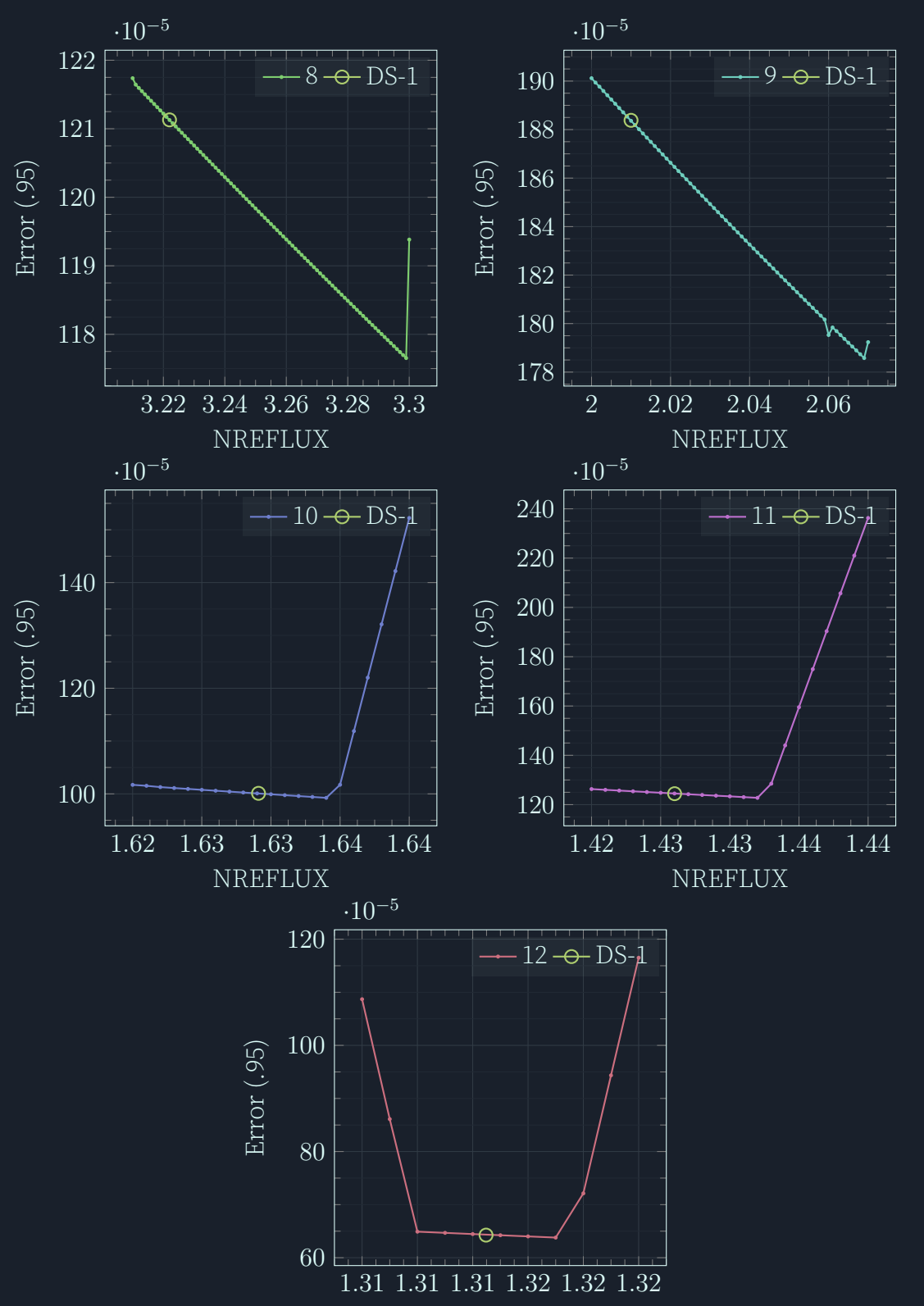


Figura 5: (Ampliado) Melhores numeros de refluxo seguindo DS-1 e S2-NREFLUX para coluna B1

Uma relação interessante que podemos perceber é como o numero de refluxo está indiretamente proporcional a altura da coluna, o que faz sentido uma vez que para que todos tenham o mesmo desempenho as maiores precisarão de menos refluxo para separar e vice-versa.

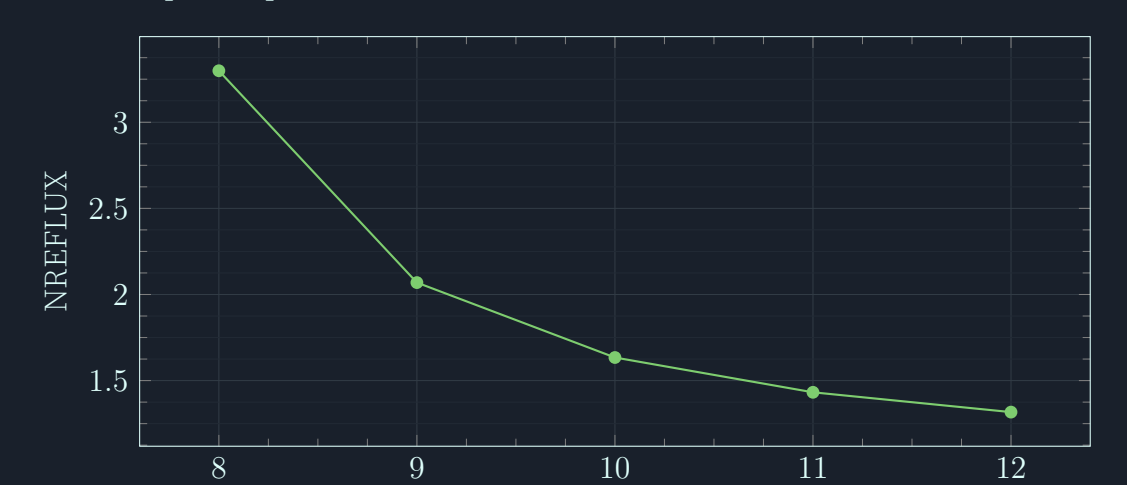


Figura 6: Relação inversa entre numero de pratos e refluxo

Se pode tirar uma sequencia mais otimizada para análise de dados que infelizmente não foi utilizada nesse estudo:

1. Simular $0.5 \rightarrow 5.0$ em variação de 0.1
2. Simular intervalo melhor valor ± 0.1 em variação de 0.01
3. Simular próximo intervalo de melhor valor anterior ± 0.01 em variação de 0.001

Esse processo gera o menor numero de dados para atingir mesmo objetivo e pode ser repetido para atingir maiores precisões. Comparando com o processo anterior, esse gera 10 dados cada etapa a partir da segunda, enquanto o processo anterior gera de 100 a 200, porem exige uma etapa a mais de simulação.

Pela inconsistencia do DS-1 decidimos abandonar esses dados para futuras simulações, usando a análise de sensibilidade como o método mais confiável.

4 FSTAGE.2

Conferindo a melhor entrada do feed a análise de sensibilidade foi rodada novamente agora com os valores optimos de refluxo

FSTAGE	Error(1)				
	8	9	10	11	12
4	1.376 E ⁻¹	1.906 E ⁻¹	2.454 E ⁻¹	2.869 E ⁻¹	3.175 E ⁻¹
5	1.070 E ⁻¹	1.257 E ⁻¹	1.557 E ⁻¹	1.858 E ⁻¹	2.120 E ⁻¹
6	9.894 E ⁻²	1.018 E ⁻¹	1.138 E ⁻¹	1.303 E ⁻¹	1.486 E ⁻¹
7	1.039 E ⁻¹	9.835 E ⁻²	9.913 E ⁻²	1.044 E ⁻¹	1.136 E ⁻¹
8	1.298 E ⁻¹	1.137 E ⁻¹	1.035 E ⁻¹	9.893 E ⁻²	9.954 E ⁻²
9			1.309 E ⁻¹	1.119 E ⁻¹	1.025 E ⁻¹
10				1.491 E ⁻¹	1.231 E ⁻¹
11					1.661 E ⁻¹

Tabela 9: Variação do prato de entrada da coluna B1 para diferentes numeros de pratos com numero de refluxo óptimo

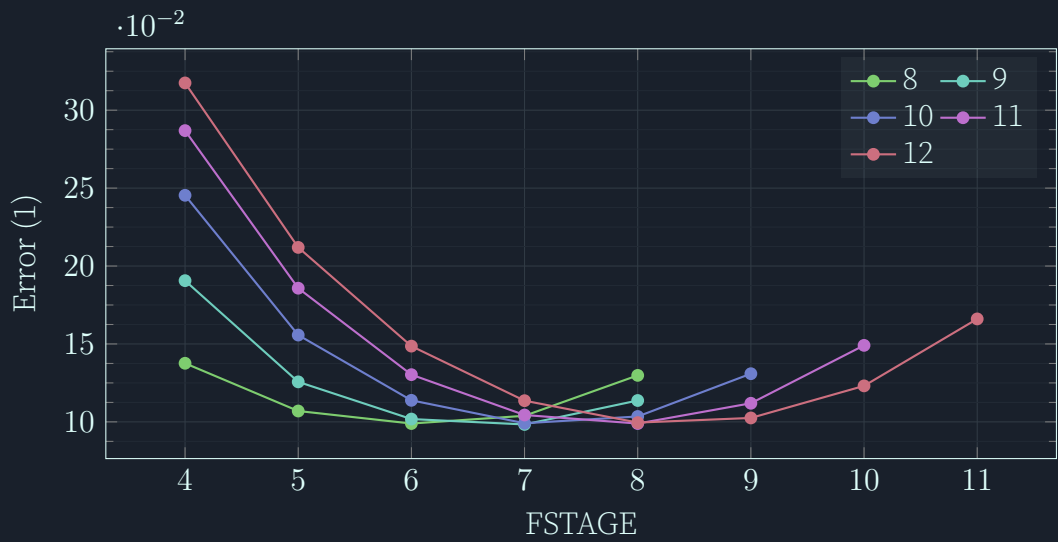


Figura 7: Variação do prato de entrada da coluna B1 para diferentes numeros de pratos com numero de refluxo óptimo

Coluna B2

5 NSTAGE-B2

Da mesma forma que a primeira coluna se variou manualmente o numero de pratos da coluna B2 com o numero de refluxo fixo em 2.

Simulação	NSTAGE	Reculperação		Error(.99)
		Tolueno	Cumeno	
1	32	99.812 %	99.993 %	1.823 E ⁻²
2	16	97.950 %	98.662 %	1.402 E ⁻²
3	20	99.201 %	99.556 %	7.644 E ⁻³
4	18	98.719 %	99.212 %	4.977 E ⁻³

Tabela 10: Variação do numero de pratos da coluna B2

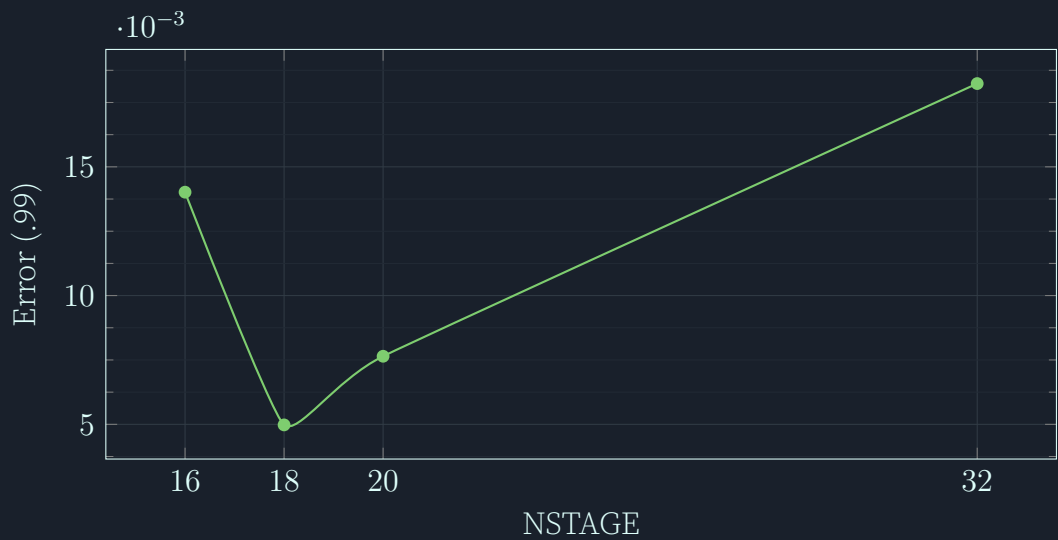


Figura 8: Variação do numero de pratos da coluna B2

Foram **selecionados de 17 → 20** como o numero de pratos a serem estudados para a coluna B2