

Simulação e otimização do processo de separação de uma mistura de metilciclohexano e tolueno em uma coluna de destilação extrativa

Simulation and optimization of the separation process of methylcyclohexane and toluene mixtures in an extractive distillation column

*Flávia Ferreira Dias da Silva; Fernanda Siqueira Souza
Janice Botelho Souza Hamm

Universidade La Salle, Canoas, RS, Brasil

*dias.f.flavia@gmail.com

Submetido em 26/07/2019; Versão revisada em 24/09/2019; Aceito em 25/09/2019

Resumo

A destilação é uma técnica comumente utilizada pela indústria química, sendo implementada em 90% a 95% dos processos de separações. Neste contexto, observa-se uma ampla oportunidade de otimização dos processos buscando, por exemplo, redução do consumo de energia. Considerando a ampla aplicação do metilciclohexano, bem como a possibilidade do seu uso em diferentes purezas, o objetivo deste artigo é avaliar o processo de destilação extrativa do metilciclohexano através da simulação de alternativas de otimização do processo utilizando o *software* iiSE. A otimização foi realizada a partir dos dados publicados por Tiverios e Van Brunt (2000). A metodologia desenvolvida procura reduzir o calor total do processo (Q_{TOTAL}) realizando diversas simulações alterando as diferentes variáveis até obter o ponto ótimo para a pureza requerida. A partir dos pontos analisados, os resultados deste estudo mostram uma economia de energia significativa em 82% de redução do consumo energético.

Palavras-chave: Destilação Extrativa. Otimização. Simulação. iiSE. Metilciclohexano.

Abstract

Distillation is a technique commonly used by the chemical industry, being implemented in 90% to 95% of the separation processes. In this context, there is an ample opportunity for optimization of the processes seeking, for example, reduction of energy consumption. Considering the wide application of methylcyclohexane as well as the possibility of its use in different purities, the objective of this article is to evaluate the extractive distillation process of methylcyclohexane by simulation of process optimization alternatives using iiSE software. The optimization was performed based on data published by Tiverios and Van Brunt (2000). The methodology developed seeks to reduce the total heat of the process (Q_{TOTAL}) by performing several simulations by changing the different variables until obtaining the optimum point for the required purity. From the analyzed points, the results of this study show significant energy savings in an 82% reduction in energy consumption.

Keywords: Extraction Distillation. Optimization. Simulation. iiSE. Methylcyclohexane.

INTRODUÇÃO

O setor industrial brasileiro consome um elevado volume de água e energia durante a realização de diferentes processos, tendo atingido no ano de 2017, o consumo de cerca de 38% da energia elétrica produzida no país (BRASIL, 2018), além de ter sido responsável por 85% da retirada de água (BRASIL, 2017). Particularmente os processos relacionados a purificação do produto e de coprodutos, como a destilação, são reconhecidos pela sua elevada demanda por energia e água (MATUGI, 2013).

A destilação tem sido empregada em diversos processos, como: produção de etanol anidro utilizando glicerina e soluções glicéridas como agentes desidratantes (MATUGI, 2013); separação de benzeno utilizando N-formilmorfolina (NFM) (BRONDANI, 2013) ou ainda na obtenção de etanol anidro, empregando líquidos iônicos (FIGUEROA, 2011). Esta técnica, comumente utilizada pela indústria química, é implementada de 90% a 95% dos processos de separações (MATUGI, 2013).

Neste contexto, observa-se ampla oportunidade de otimização dos processos buscando, por exemplo, redução do consumo de energia. Esta necessidade de aperfeiçoamento dos processos é reforçada também pelo aumento da utilização dos derivados de petróleo tanto como combustíveis quanto como matérias-primas em processos industriais. Sendo assim, além da necessidade de produzir produtos competitivos, as indústrias buscam otimizar os seus processos de forma a reduzirem o consumo de recursos resultando em redução de impactos ambientais bem como dos custos do processo.

Uma forma de analisar oportunidades de otimização de processos é através de simulações computacionais. Pereira (2016) avaliou os valores de Equilíbrio Líquido-Vapor (EVL) através do pacote termodinâmico do *software* iiSE em seu estudo de simulação de um reator de hidrogenação seletiva de nafta de pirólise. O iiSE é um simulador de processo de estado estacionário orientado para equações. Estão disponíveis nas bibliotecas do modelo iiSE algumas

das operações mais importantes presentes em indústrias químicas e petroquímicas bem como, processos de geração de energia e cogeração (VR TECH, 2015).

Dentre os materiais que passam por processos de destilação extrativa pode ser citado o metilciclohexano. O metilciclohexano possui diversas aplicações como uso em borracha (32,3%), revestimento (29,19%), síntese orgânica (22,51%), análise cromatográfica (5%) e outras (11%) (GIR, 2019). Este material é encontrado no mercado em dois tipos de pureza: $\geq 99\%$ e 98-99%. Conforme *Global Info Research* (2019) o metilciclohexano pureza $\geq 99\%$ é o mais amplamente consumido, abrangendo 89,24% do mercado mundial do produto. A versão na pureza entre 98-99% é responsável por atender 10,76% restantes. Considerando a ampla aplicação do metilciclohexano e a possibilidade do seu uso em diferentes purezas, o objetivo deste artigo é avaliar o processo de destilação extrativa do metilciclohexano através da simulação de alternativas de otimização do processo utilizando o *software* iiSE, visando estudar possibilidades de otimização a partir dos dados publicados por Tiverios e Van Brunt (2000).

METODOLOGIA

Estudo de caso

Neste estudo simulou-se o processo de separação de uma mistura através do *software* de simulação de processo iiSE, no qual foi necessário separar uma mistura de metilciclohexano (MCH) e tolueno (T), utilizando destilação extrativa com fenol (P) como solvente. O processo envolveu duas colunas de destilação.

As informações estruturais e as condições de operação das colunas de destilação 1 e 2 estão detalhadas na Tabela 1, cada coluna incorpora um revedor e um condensador parcial. Na Tabela 2 verifica-se as variáveis de alimentação da coluna C-01.

Tabela 1 – Informações das colunas 1 e 2.

Coluna 1 (C-01)		Coluna 2 (C-02)	
Informações	Valor	Informações	Valor
Nº de estágios	40	Nº de estágios	20
Estágio Alimentação (P)	10	Estágio Alimentação Fundo C-01	12
Estágio Alimentação (MCH/T)	25	R	8
R	10	D	30 gmol/s
D	25 gmol/s	P	1 atm
P	1 atm		

Fonte: Dados extraídos do artigo: Extractive Distillation Solvent Characterization and Shortcut Design Procedure for Methylcyclohexane-Toluene Mixtures, (TIVERIOS, 2000)

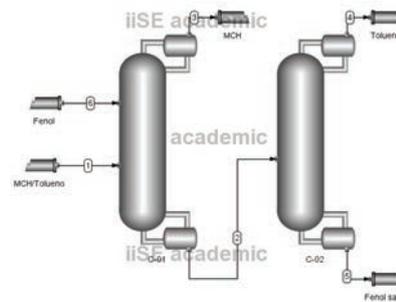


Figura 1 – Diagrama do processo de separação da mistura de metilciclohexano (MCH) e tolueno (T), utilizando destilação extrativa com fenol (P) como solvente. Fonte: iiSE, 2019.

Tabela 2 – Variáveis de entrada da coluna 1.

ENTRADA: C-01			
	Variáveis	Valor	Unidades
Alimentação	F	50	gmol/s
	P	1	Bar
	T	110,85	°C
	Z _{MCH}	0,5	
	Z _T	0,5	
	Z _P	0	
Solvente	F	90	gmol/s
	P	1	Bar
	T	99,85	°C
	Z _{MCH}	0	
	Z _T	0	
	Z _P	1	

Fonte: Dados extraídos do artigo: Extractive Distillation Solvent Characterization and Shortcut Design Procedure for Methylcyclohexane-Toluene Mixtures, (TIVERIOS, 2000)

Simulação

Após a obtenção dos dados iniciou-se o processo de simulação no *software* iiSE, no qual selecionou-se os compostos e as equações de estado envolvidos no processo de separação da mistura. Foi utilizado o modelo PR (Peng-Robinson) para equação de estado e vdW (van der Waals) para regra de mistura.

O simulador possui uma caixa de ferramentas que contém os principais equipamentos de uma indústria química, o que permitiu construir o diagrama do processo conforme apresentado na Figura 1.

Em seguida configurou-se os equipamentos de acordo com as informações detalhadas anteriormente nas Tabelas 1 e 2, e então iniciou-se a simulação do processo.

Otimização do processo de separação da mistura

Para realizar a otimização, visando reduzir o custo global do processo, precisou-se obter uma variável que é a soma dos calores das duas colunas. Está foi obtida através do bloco calculadora no *software* iiSE. Uma calculadora pode apresentar múltiplas variáveis neste caso teremos apenas uma variável que é o calor total do processo (Q_{TOTAL}). Para obter este calor foi realizada a soma dos calores de refulvimento (Q_{reb}) das duas colunas. Na Figura 2 é possível visualizar a calculadora e a equação para a obtenção do Q_{TOTAL} .

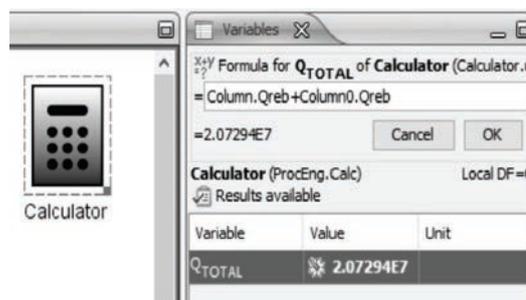


Figura 2 – Calculadora disponível no *software* iiSE para o cálculo do Q_{TOTAL} . Fonte: iiSE, 2019.

Para minimizar o calor total do processo utilizou-se a ferramenta de otimização do *software* (Figura 3). No qual selecionou-se o equipamento da função objetivo, que neste caso é a calculadora. Em seguida configurou-se as variáveis que o simulador pode modificar entre os parâmetros mínimo e máximo estipulados para obter o ponto ótimo da otimização (Tabela 3).

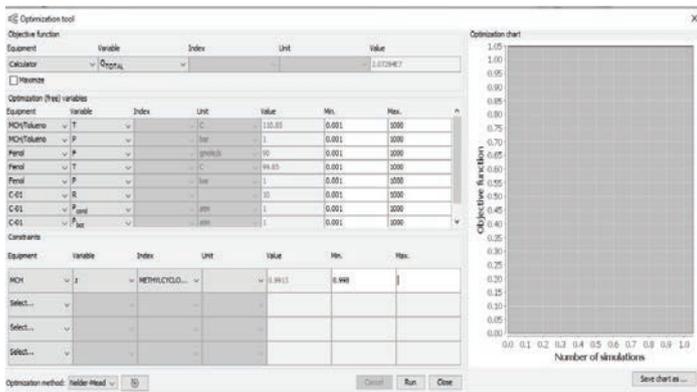


Figura 3 - Ferramenta de otimização do processo: variáveis utilizadas e restrição. Fonte: iiSE, 2019.

Tabela 3 – Variáveis de otimização dos equipamentos e os parâmetros mínimo e máximo estipulados

Equipamento	Variável	Mínimo	Máximo
MCH/TOLUENO	T	0.001	1000
MCH/TOLUENO	P	0.001	1000
FENOL	F	0.001	1000
FENOL	T	0.001	1000
FENOL	P	0.001	1000
C-01	R	0.001	1000
C-01	P _{COND}	0.001	1000
C-01	P _{TOP}	0.001	1000
C-01	P _{BOT}	0.001	1000
C-02	R	0.001	1000
C-02	D	0.001	1000
C-02	P _{COND}	0.001	1000
C-02	P _{TOP}	0.001	1000
C-02	P _{BOT}	0.001	1000

Fonte: Elaborado pelo autor.

Como restrição da otimização utilizou-se a fração molar do metilciclohexano referente ao equipamento MCH. Realizou-se onze otimizações variando a fração molar do metilciclohexano, conforme a Tabela 4, para obter o valor Q_{TOTAL} em diferentes frações molares do produto em estudo.

Tabela 4 – Frações molares do metilciclohexano variadas no processo de otimização.

Nº de otimizações	Fração molar do metilciclohexano
1	0,9800
2	0,9820
3	0,9840
4	0,9860
5	0,9880
6	0,9900
7	0,9913
8	0,9920
9	0,9940
10	0,9960
11	0,9980

Fonte: Elaborado pelo autor.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Simulação

Os resultados da simulação do processo obtidos a partir dos dados detalhados nas Tabelas 1 e 2, são apresentados nas Tabelas 5 e 6. Observa-se que no topo da coluna 1, a Tabela 5 fração molar alcançada do metilciclohexano foi 99,13 mol %, indicando um produto de alta pureza. O qual, conforme mencionado anteriormente, representa 90% das aplicações na indústria (GIR, 2019).

Tabela 5 – Resultados da simulação na coluna 1.

SAÍDA: C-01			
Saída	Variáveis	Valor	Unidades
MCH (Topo)	F	25	gmol/s
	Z _T	0,87	mol %
	Z _{MCH}	99,13	mol %
	Z _P	1,52E-06	mol %
C-02 (Fundo)	F	115	gmol/s
	Z _T	21,55	mol %
	Z _{MCH}	0,19	mol %
	Z _P	78,26	mol %

Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir da Tabela 6 verifica-se que a pureza obtida do tolueno foi 82,61%, este valor é relativamente baixo em relação ao percentual alcançado de metilciclohexano, demonstrando que alguma das condições de operação do processo não foi eficiente. Desta forma, acredita-se que algumas variáveis devem ser estudadas combinadas, visando otimizar o sistema em relação também a pureza do tolueno.

Tabela 6 – Resultados da simulação na coluna 2.

SAÍDA: C-02			
Saída	Variáveis	Valor	Unidades
Tolueno (Topo)	F	30	gmol/s
	Z _T	82,61	mol %
	Z _{MCH}	0,72	mol %
	Z _P	16,67	mol %
C-02 (Fundo)	F	85	gmol/s
	Z _T	4,48E-07	mol %
	Z _{MCH}	2,22E-11	mol %
	Z _P	100	mol %

Fonte: Elaborado pelo autor.

Otimização do processo de separação da mistura

O equipamento calculadora, disponível no *software*, apresenta o calor total envolvido no processo, sendo este a soma dos calores de refervimento (Q_{reb}) das duas colunas, no qual obteve-se 20729 kW de consumo energético.

Com o intuito de reduzir os custos envolvidos no processo em relação ao consumo energético foram realizadas as otimizações, mantendo-se o valor inicial apenas das variáveis de alimentação da mistura e o destilado da coluna 1.

A Figura 4 apresenta a ferramenta de otimização do simulador iiSE depois de uma das otimizações realizadas, na qual verifica-se que após aproximadamente 800 simulações o *software* encontrou um ponto ótimo reduzindo consideravelmente o consumo de energia.

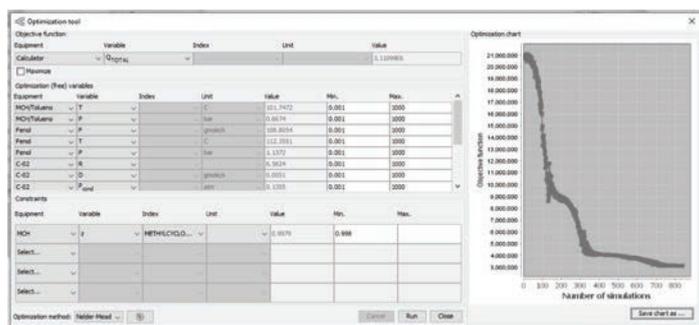


Figura 4 – Resultado da otimização na ferramenta de otimização do *software* iiSE. Fonte: iiSE, 2019.

A Figura 5 apresenta todas as otimizações realizadas, a qual, é possível observar uma redução considerável em comparação ao consumo energético obtido na simulação inicial, representando uma percentagem de redução de 82%. Este valor é muito expressivo tendo em vista que o processo de destilação é responsável por 60% do consumo de energia total de uma planta (FIGUEIRÊDO, 2009).

Neste contexto, verificou-se que é possível obter altas conversões de metilciclohexano, Tabela 7, com uma elevada economia do consumo de energia. As conversões variaram entre 0,980 a 0,998, a qual contempla 100% da faixa de pureza consumida no mercado mundial do produto (GIR, 2019). Ainda, foi possível observar, Figura 6, que o ponto ótimo dentro

do grau de pureza de maior consumo ($\geq 99\%$) ocorreu na Otimização número 10, a qual obteve-se uma economia de 85,9% de energia e formação de metilciclohexano com 0,996 de fração molar.

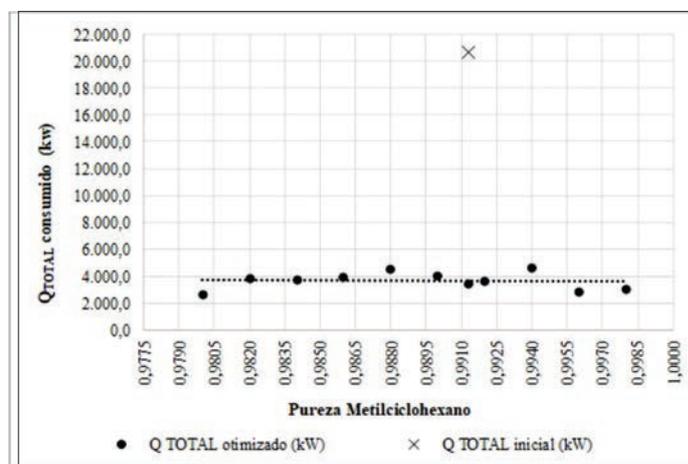


Figura 5 – Gráfico comparativo Q_{TOTAL} inicial x Q_{TOTAL} otimizado. Fonte: Elaborado pelo autor.

Tabela 7 – Resultados das otimizações

Otimizações	x_{MCH}	Q_{TOTAL} (kW)	ECONOMIA
1	0,9800	2683,6	87,1%
2	0,9820	3869,66	81,3%
3	0,9840	3762,51	81,8%
4	0,9860	3962,47	80,9%
5	0,9880	4549,19	78,1%
6	0,9900	4054,61	80,4%
7	0,9913	3460,07	83,3%
8	0,9920	3712,32	82,1%
9	0,9940	4673,96	77,5%
10	0,9960	2913,29	85,9%
11	0,9980	3110,99	85,0%

Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir da Figura 6 verifica-se que cinco otimizações estão dentro do teor de pureza $\geq 99\%$ que obtém 89,24% de participação de mercado enquanto seis otimizações representam os demais, 10,76% possuindo grau de pureza entre 98-99%.

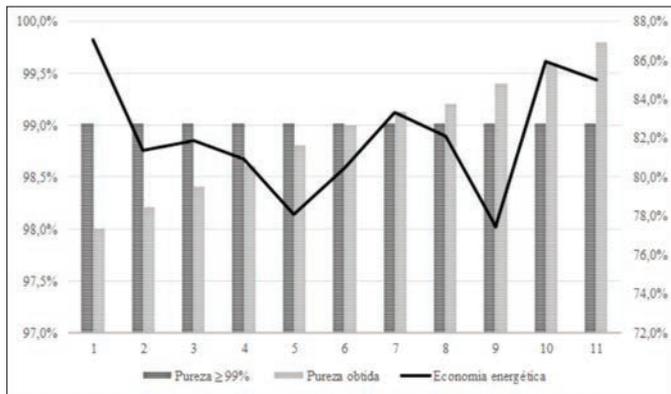


Figura 6 – Gráfico comparativo entre as purezas obtidas e a pureza de maior consumo mundial com a variação de economia energética. Fonte: Elaborado pelo autor.

Os parâmetros de otimização desta simulação que apresentaram o melhor resultado foram obtidos com o teor de 99,6% de metilciclohexano, enquanto que os parâmetros de pior resultado foram com 99,4%. A Tabela 8 apresenta as variáveis de otimização com o ponto ótimo alcançado pelo *software* para obter o grau de pureza requerido. Na qual verifica-se ao comparar os parâmetros que para obter um elevado grau de pureza e com maior economia energética foi necessário reduzir em aproximadamente um terço as razões de reciclo de ambas as colunas em relação ao valor inicial. Ainda, foi possível observar que a corrente do solvente (fenol) não deve ser reduzida, pois será necessário um gasto maior de energia para obter um alto teor de metilciclohexano.

Tabela 8 – Parâmetros de operação do processo em comparação aos parâmetros de melhor e pior economia de energia obtidos

Equipamento	Variável	Valor Inicial	Valores dos parâmetros obtidos		Unidade
			Pureza 99,4%	Pureza 99,6%	
MCH/TOLUENO	T	110,85	133,88	121,10	°C
MCH/TOLUENO	P	1	0,91	0,74	bar
FENOL	F	90	58,20	92,78	gmol/s
FENOL	T	99,85	54,14	64,09	°C
FENOL	P	1	0,18	0,41	bar
C-01	R	10	6,89	3,39	-
C-01	P _{COND}	1	0,63	0,13	atm
C-01	P _{TOP}	1	0,42	0,13	atm
C-01	P _{BOT}	1	0,36	0,04	atm
C-02	R	8	0,19	2,54	-
C-02	D	30	4,01	0,01	gmol/s
C-02	P _{COND}	1	0,01	0,19	atm
C-02	P _{TOP}	1	0,22	0,62	atm
C-02	P _{BOT}	1	0,37	0,63	atm

Fonte: Elaborado pelo autor.

CONCLUSÃO

Através do uso do *software* iiSE foi possível otimizar processos, reduzir o custo de produção e ainda, otimizar os recursos disponíveis. A redução média do consumo energético obtido foi 82%. Percebe-se ainda, que é possível verificar diversas variáveis para buscar a melhor configuração do processo, caso seja necessário modificar as características do produto final. O grau de pureza do metilciclohexano que apresentou maior economia de energia dentro da faixa que é mais amplamente consumido foi de 99,6%, enquanto que, o teor de pureza com menor economia apresentado foi de 99,4%.

Além da otimização direcionada a redução do consumo energético, há outros aspectos que podem ser simulados no *software* em projetos futuros como por exemplo, avaliar o solvente utilizado, buscando solventes que atendem aos princípios da química verde.

REFERÊNCIAS

- BRASIL. Balanço Energético Nacional 2018: Ano base 2017/Empresa de Pesquisa Energética. – Rio de Janeiro: EPE, 2018.
- BRASIL. Agência Nacional de Águas (Brasil). Água na indústria: uso e coeficientes técnicos /Agência Nacional de Águas. -- Brasília: ANA, 2017. Disponível em: <https://drive.google.com/file/d/0B3aE-dABPLJ8QmQyeTlnNnhxNDQ/view>
- BRONDANI, L. B. **Modelagem e simulação de destilação extrativa para recuperação de benzeno**. Porto Alegre, 2013. Dissertação (mestrado em engenharia química). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- FIGUEROA, J. E. **Análise e otimização do processo de obtenção de etanol anidro, empregando líquidos iônicos**. 2011. 199 p. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de

Engenharia Química, Campinas, SP.

FIGUEIRÊDO, M. F. **Obtenção de etanol anidro via destilação extrativa: simulação e otimização.**

Paraíba, 2009. Dissertação (mestrado em engenharia química) – Universidade Federal de Campina Grande.

GIR, Global Info Research. Global Methylcyclohexane Market 2019 by Manufacturers, Regions, Type and Application, Forecast to 2024. 2019.

LEI, Z.; LI, C.; CHEN, B. **Extractive Distillation: A Review. Separation and purification reviews**, v.32, n.2, p.121-213, 2003.

MATUGI, K. **Produção de etanol anidro por destilação extrativa utilizando soluções salinas e glicerol.** São Carlos, 2013. Dissertação (mestrado em engenharia química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - Universidade Federal de São Carlos.

PARENTE, et al. **Destilação extrativa: aplicação de agentes de separação não-voláteis.** Revista eletrônica de energia, Universidade Salvador, 2013.

PEREIRA, M.V. **Modelagem e Simulação de um Reator Trifásico de Hidrogenação Seletiva de**

Gasolina de Pirólise. Porto Alegre, 2016. Dissertação (mestrado em engenharia química) Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

PINHEIRO, C. A. M.; SOUZA, A. C. Z. **Introdução a modelagem, análise e simulação.** 1. ed. Interciência, 2008.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J. **Separation Process Principles**, John Wiley & Sons, Inc. –Second Edition, 2006.

SILVA, M. G. **Modelagem e simulação de uma coluna de destilação para separação dos componentes reacionais do biodiesel em matlab.** Natal, 2015.

TIVERIOS, P.G.; BRUNT V. V. **Extractive distillation solvent characterization and shortcut design procedure for methylcyclohexane-toluene mixtures.** Industrial and Engineering Chemistry Research, vol. 39, no 6, pp. 1614-1623, 2000.

VR TECH. **iiSE Industrial Integrated Simulation Environment - User Guide.** 2015.