



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

JONILSON ALVES DOS SANTOS

SIMULAÇÃO DO SISTEMA DE PRÉ-RESFRIAMENTO DE UMA PLANTA DE
FRACIONAMENTO DE AR UTILIZANDO OS SIMULADORES
DWSIM E CHEMSEP

VITÓRIA
2015

JONILSON ALVES DOS SANTOS

**SIMULAÇÃO DO SISTEMA DE PRÉ-RESFRIAMENTO DE UMA PLANTA DE
FRACIONAMENTO DE AR UTILIZANDO OS SIMULADORES
DWSIM E CHEMSEP**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica, Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para a obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Orientador: Profº. Dr. Márcio Ferreira Martins

Vitória -ES
2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

JONILSON ALVES DOS SANTOS

**SIMULAÇÃO DO SISTEMA DE PRÉ-RESFRIAMENTO DE UMA PLANTA DE
FRACIONAMENTO DE AR UTILIZANDO OS SIMULADORES
DWSIM E CHEMSEP**

Este Projeto de Graduação foi julgado adequado como parte dos requisitos para a obtenção do grau de engenheiro mecânico e aprovada pela banca examinadora em 10 de julho de 2015

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Marcio Ferreira Martins
Universidade Federal do Espírito Santo
(Orientador)

Prof. Dr. João Luiz Marcon Donatelli
Universidade Federal do Espírito Santo
(Examinador)

Engº. Dr. Rafael Sartim
ArcelorMittal Tubarão
(Examinador)

Engº. Luis Paulo Zanin Armacollo
ArcelorMittal Tubarão
(Examinador)

Vitória - ES, 10 de julho de 2015

*Dedico este trabalho àqueles que
acreditam que o sucesso é fruto de seguir
princípios nobres, de fazer o que está ao
seu alcance e da soberania de Deus!*

AGRADECIMENTOS

Ao Senhor, Deus da minha vida, a quem eu amo!

Aos meus pais, Antônio e Maria, que me ensinaram nunca desistir e lutar pautado em um caráter nobre.

Às minhas irmãs, Cintia e Mirela, pela união proporcionada à família.

Àqueles que entenderam que as Cotas Sociais é uma forma de dar oportunidade a pessoas que não tem recursos suficientes para alcança-la sozinho.

À minha esposa, Danielly, pela paciência e fé.

Aos irmãos e amigos, dos quais me privei muitas vezes para alcançar este objetivo.

Aos colegas de faculdade, pelo apoio nos momentos que os desafios pareciam intransponíveis.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Marcio Martins pelo incentivo e apoio.

RESUMO

Uma planta de fracionamento de ar trabalha a temperaturas de cerca de -196°C e o sistema de pré-resfriamento tem como principal objetivo promover o resfriamento inicial do ar, o que gera um ganho energético no trabalho total de resfriamento do ar até a sua liquefação, gerando aumento na produção de líquido da planta e também contribui para um melhor desempenho do sistema de purificação do ar.

Neste trabalho é apresentada a modelagem do sistema de pré-resfriamento de uma planta de fracionamento de ar por meio dos simuladores de processo DWSIM e ChemSep. É feita a validação estatística do modelo e por fim é confeccionada uma carta gráfica de fácil interpretação, que pode ser usada como guia para a equipe de operação ajustar com propriedade o sistema; para embasar decisões diante de necessidade de mudanças no processo; e também para orientar propostas de melhoria operacional no sistema.

Palavras-chave: Simulação, validação, modelagem, DWSIM e ChemSep.

ABSTRACT

An air separation plant Works at temperatures of about -196°C and the pre-cooling system aims to promote the initial cooling of the air, which generates an energy gain in total working of cooling of the air to its liquefaction, generating an increase in the plant's liquid production and also contributes to a better performance of the air purification system.

This paper presents the modeling of the pre-cooling system of an air separation plant through DWSIM and ChemSep simulators. After the statistical validation of the model, it is done a graphic letter of easy interpretation, which will be used as a guide for operation staff properly adjust the system, to be the base of operational decisions on the need for changes in the process, and also to guide improvement proposals in the system.

Keywords: Simulation, validation, modeling, DWSIM and ChemSep.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1: Diagrama simplificado de uma planta de fracionamento.....	13
FIGURA 2: Fluxograma do sistema DCA – EVAP.....	15
FIGURA 3: Andar ou Estágio teórico	22
FIGURA 4: Estágio teórico típico do processo de umidificação.....	23
FIGURA 5: Estágio (ou andar) teórico da modelagem MESH.....	24
FIGURA 6: Modelo da validação do estudo de caso.....	30
FIGURA 7: Curva de vazão da bomba d’água fornecida pelo fabricante.....	34
FIGURA 8: Detalhe do processo para a estimativa da temperatura do N ₂ waste.....	35
FIGURA 9: Esquema do balanço de massa simplificado da planta.....	36
FIGURA 10: Perfil das variáveis do DCA e EVAP e abertura da válvula de purga.....	37
FIGURA 11: Ilustração do perfil da vazão de N ₂ waste para o EVAP e pontos de coleta de dados.....	38
FIGURA 12: Fluxograma esquemático da linha da bomba do EVAP para DCA.....	41
FIGURA 13: Fluxograma geral do sistema DCA - EVAP construído simulador DWSIM...	43
FIGURA 14: Comparação de Fluxograma real e simulado do EVAP.....	44
FIGURA 15: Comparação de Fluxograma real e simulado do DCA.....	45
FIGURA 16: Tela de Configuração dos modelos termodinâmicos para o cálculo das propriedades do DCA no ChemSep.....	47
FIGURA 17: Tela de Configuração da Operação do EVAP no ChemSep.....	47
FIGURA 18: Tela de Configuração do perfil térmico do PIPE2.....	49
FIGURA 19: Comparação entre valores reais e simulados dos principais pontos do sistema DCA-EVAP.....	50
FIGURA 20: Gráfico de regressão linear T _{DCA} Real x T _{DCA} simulado.....	52
FIGURA 21: Carta gráfica do sistema DCA-EVAP.....	54
FIGURA 22: Relação Vazão de N ₂ Waste x TDCA.....	55
FIGURA 23: Linhas de tendência das curvas do sistema DCA-EVAP.....	56
FIGURA 24: Ponto atual de operação do sistema DCA-EVAP.....	56

LISTA DE TABELAS

TABELA 1: Comparação dos valores reais e simulados.....	51
TABELA 2: Teste-t: duas amostras em par para médias.....	52
TABELA 3: Valores extremos das principais variáveis de entrada da simulação.....	53
TABELA 4: Valores das principais variáveis de entrada para confecção da carta gráfica.....	55
TABELA 5: Comparação entre os valores reais e simulados para os conjuntos de dados da validação estatística.....	63
TABELA 6: Dados de entrada da simulação.....	64
TABELA 7: Folha de Dados do Cálculo do EVAP no ChemSep	65
TABELA 8: Folha de dados do cálculo do DCA no ChemSep.....	66
TABELA 9: Folha de dados do fluxograma completo no DWSIM.....	67

NOMENCLATURA

Letras Latinas

E_j	Relação de equilíbrio do estágio j
F_i	Fluxo de alimentação do estágio j
g	Aceleração da gravidade, m/s ²
G_f	Gravidade específica na temperatura do escoamento
h	Cota de altura manométrica, m
H	Entalpia específica, KJ/Kg
$\bar{I}$	Média das diferenças entre valores reais e simulados
K	K-value
L	Vazão molar de líquido, Kmol/s
n	Número de amostras
q	Troca de calor, KW
r_j^v	Razão de de purga de vapor do estágio j
r_j^L	Razão de de purga de líquido do estágio j
R	Coeficiente de correlação de Pearson
s_d	Desvio-padrão da amostra de diferenças entre valores reais e simulados
s_x	Desvio-padrão da média dos valores reais da amostra
s_y	Desvio-padrão da média dos valores reais da amostra
S_j^v	Somatório de composições de vapor dos estágios
S_j^L	Somatório de composições de líquido dos estágios
t	Estatística t do Teste-t de Student
T	Temperatura, °C
U_j	Purga de líquido do estágio j, Kmol/s
V	Vazão molar de vapor, Kmol/s
V'	Vazão molar de gás não condensável, Kmol/s
W_j	Purga de vapor do estágio j, Kmol/s
x_i	Dado real do processo na simulação i
x_{ij}	Fração de líquido no estágio j e iteração i
$\bar{X}$	Média dos valores reais da amostra
y_i	Dado real do processo na simulação i
y_{ij}	Fração de vapor no estágio j e iteração i
$\bar{Y}$	Média dos valores simulados da amostra
Z	Fator de compressibilidade

Letras Gregas

δ	Valor esperado para a média no Teste-t de Student
ρ	Densidade, Kg/m ³

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	VIII
LISTA DE TABELAS	IX
NOMENCLATURA	X
1 INTRODUÇÃO	13
1.1 O Processo de uma Planta de Fracionamento de Ar	13
1.2 O Sistema de Pré-Resfriamento de Ar	15
1.3 Justificativa do Trabalho	16
1.4 Objetivos e Contribuições do Trabalho	16
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
2.1 Estado da Arte	18
2.2 Os Simuladores de Processo DWSIM e ChemSep	20
2.3 Fundamentação Teórica	21
2.3.1 Modelagem teórica do DCA e do EVAP no simulador de processo	22
2.3.2 Equacionamento do estágio teórico	23
2.3.3 Os modelos de cálculo de propriedades termodinâmicas pelo simulador ChemSep	25
2.3.4 Determinação da quantidade de estágios e dos parâmetros de interação binária	28
2.4 Validação do Modelo	29
2.4.1 Verificação em módulos	29
2.4.2 Validação estatística	30
3 METODOLOGIA	33
3.1 Problemática Imposta pelo Estudo de Caso	33
3.1.1 Falta de instrumentação	33
3.1.2 Perfil dinâmico x Perfil estacionário	36
3.2 Cálculos e Simulações Preliminares	38
3.2.1 Cálculo da vazão de purga, de reposição do sistema DCA-EVAP e vazão da ramificação do N ₂ waste	38
3.2.2 Simulação da altura manométrica mínima da bomba de água	41
3.3 Elaboração do Fluxograma do Processo no Simulador	42
3.3.1 O fluxograma geral da simulação	42
3.3.2 Modelagem do EVAP e do DCA no ChemSep	46
3.3.3 Simplificações do modelo	48
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	50

4.1	Os Resultados do Modelo	50
4.2	Resultado da Validação Estatística.....	51
4.3	Carta Gráfica do Sistema DCA - EVAP	53
5	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	58
	BIBLIOGRAFIA.....	59
	APÊNDICE A – Diagramas de Processo e Instrumentação.....	61
	A.1. Diagrama de Processo e Instrumentação do DCA.....	61
	A.2. Diagrama de Processo e Instrumentação do EVAP.....	62
	APÊNDICE B – Dados de entrada da Simulação e Resultados do Balanço de Massa e Energia no Simulador	63
	B.1. Resultado das Simulações para Fins de Validação Estatística	63
	B.2. Conjuntos Aleatórios de Dados de Entrada da Simulação Utilizados na Validação Estatística e Determinação do nº de Estágio e dos Parâmetros de Interação Binária.....	64
	B.3. Balanço de Massa e Energia e Propriedades dos Fluxos no EVAP	65
	B.4. Balanço de Massa e Energia e Propriedades dos Fluxos no DCA.....	66
	B.5. Balanço de Massa e Energia e Propriedades das Correntes no Fluxograma Completo no DWSIM	67
	B.6. Dados de Cálculo das Tubulações e Bomba do Sistema DCA-EVAP	68

1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será feita uma apresentação do sistema que será modelado e os objetivos deste trabalho. Primeiramente será feita uma descrição sucinta da operação da planta de fracionamento de ar como um todo e posteriormente será dada uma visão mais detalhada do sistema de pré-resfriamento de ar. Depois desta contextualização serão apresentadas as justificativas e os objetivos e contribuições do trabalho.

1.1 O Processo de uma Planta de Fracionamento de Ar

A separação do ar por meio da destilação fracionada é um dos meios empregados para produção de gases do ar (O_2 , N_2 e Ar) na indústria atualmente. Em uma configuração típica desse processo o ar atmosférico é captado por um sistema de compressão e tem sua pressão elevada até a pressão de trabalho (cerca de 11 Bar). São componentes típicos do sistema de captação e compressão um filtro primário, compressores, booster, resfriadores interestágio e pós-resfriador. A temperatura do ar após este sistema é de cerca de 35°C sendo direcionado ao sistema de pré-resfriamento. Um fluxograma típico das principais unidades de uma planta de fracionamento está na Figura 1.

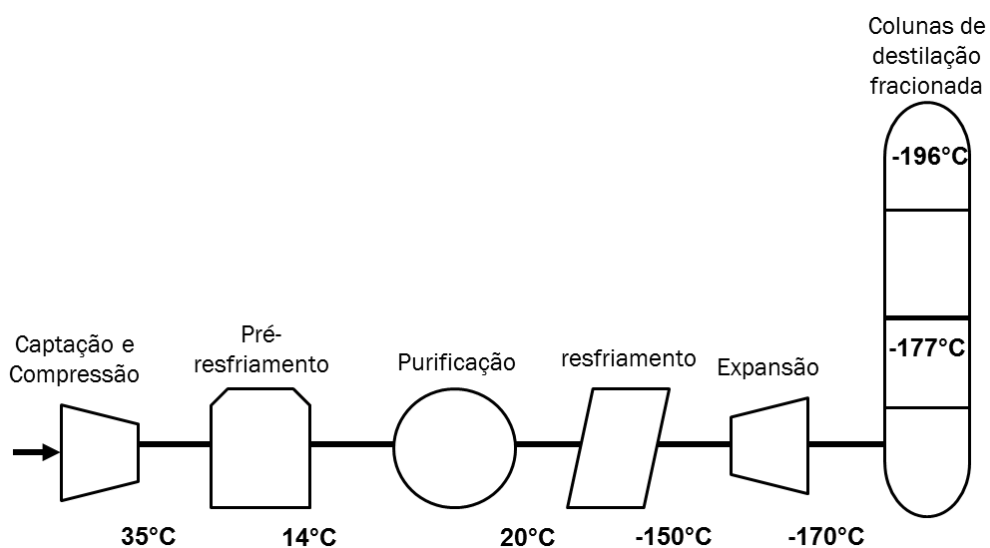


FIGURA 1: Diagrama simplificado de uma planta de fracionamento

No sistema de pré-resfriamento o ar troca calor em contato direto com água gelada (cerca de 12°C) e também é feita a lavagem do ar para remover amônia e partículas sólidas solúveis em água. Ao deixar o sistema de pré-resfriamento o ar tem sua temperatura reduzida para cerca de 14°C e segue para o sistema de purificação.

O sistema de purificação é constituído de dois vasos preenchidos com elementos adsorventes, que removem os contaminantes nocivos ao processo. Este dois vasos operam em revezamento - enquanto um operado o outro é regenerado – e possuem no seu interior sílica gel e peneira molecular¹ que removem os principais contaminantes do processo que são umidade, hidrocarbonetos e dióxido de carbono.

O Ar deixa o sistema de purificação a cerca de 20°C e é direcionado ao sistema de resfriamento principal da planta de onde sai a aproximadamente -150°C. O sistema de resfriamento principal é um trocador de calor de fluxo cruzado onde o ar troca calor em contato indireto com os gases que saem das colunas de destilação.

Em seguida o ar é expandido em uma turbina de expansão até uma pressão de 5 Bar, perdendo temperatura e gerando trabalho através de uma gerador acoplado à turbina. O fluxo de saída da turbina de expansão que está a cerca de -170°C entra na coluna de destilação fracionada onde o ar é fracionado em seus principais componentes (N₂, O₂ e Ar). Os fluxos que saem da planta são: oxigênio gasoso e líquido, nitrogênio gasoso produto, nitrogênio impuro e argônio líquido.

Os fluxos gasosos que saem das colunas de destilação passam todos pelo resfriador principal, onde trocam calor com o ar em contracorrente e saem com temperatura de cerca de 18°C. O oxigênio e o argônio líquido são enviados a tanques para armazenamento; o oxigênio e o nitrogênio gasoso são enviados a sistemas de compressão e distribuídos na usina; e o nitrogênio impuro é enviado em parte para regeneração no sistema de purificação e outra parcela para resfriar a água no sistema de pré-resfriamento.

¹As Peneiras moleculares são Zeolites sintéticas cristalinas na qual os átomos estão dispostos num padrão definido. Internamente, a estrutura tem muitas cavidades interligadas por pequenos poros de tamanho uniforme. Esses poros são apenas capazes de aceitar e passar para as cavidades de moléculas do mesmo tamanho ou menores, daí o nome da Peneira Molecular.

1.2 O Sistema de Pré-Resfriamento de Ar

O sistema de pré-resfriamento é composto de duas colunas e do sistema de água que as interliga: em uma coluna o ar é resfriado pela água gelada e na outra o nitrogênio impuro resfria a água. A coluna que resfria o ar é denominada de pós-resfriador de contato direto (doravante chamado por sua sigla em inglês – DCA, direct contact aftercooler), onde troca calor e massa em contato direto com água fria e sai a aproximadamente 14°C. No Apêndice A estão os diagramas de processo e instrumentação completos do EVAP e DCA.

A água fria utilizada para resfriar o ar no DCA é proveniente de um resfriador evaporativo (abreviado por EVAP doravante). Neste, uma fração de nitrogênio que sai da unidade de fracionamento à cerca de 18°C (denominada de Nitrogênio impuro por conter cerca 30 ppm de O₂), troca calor e massa em com a água quente proveniente do fundo do DCA. O nitrogênio impuro é descarregado na atmosfera e a água acumula-se no fundo do EVAP a uma temperatura de aproximadamente 12°C. A Figura 2 mostra um diagrama do sistema de pré-resfriamento.

A água que recircula no sistema DCA-EVAP pode ser considerada estar circuito fechado, porém o sistema possui uma purga periódica para desconcentrar contaminantes e uma reposição de água para compensar perdas do sistema. Como o EVAP opera praticamente à pressão atmosférica, uma bomba transfere água do fundo do EVAP para o topo do DCA. O sistema DCA-EVAP será o objeto de modelagem e simulação deste trabalho.

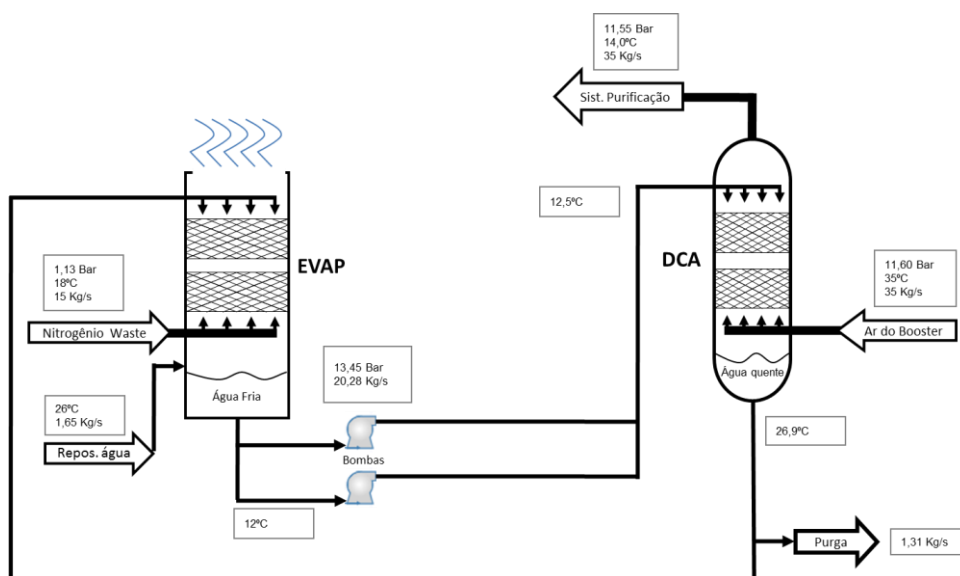


FIGURA 2: Fluxograma do sistema DCA - EVAP

1.3 Justificativa do Trabalho

Historicamente a planta de fracionamento de ar trabalha em condições diferentes daquelas especificadas no projeto. Para os diferentes modos de operação os parâmetros operacionais do sistema DCA-EVAP não são alterados pelas equipes de operação, pois os manuais do fabricante não abordam essa questão e também não se encontra artigos técnicos e científicos sobre o tema. Na ausência de informações, a prática é manter os parâmetros fixos.

Reduzir a temperatura de saída do ar do DCA (T_{DCA}) deve ser o principal objetivo de uma operação eficiente do sistema de pré-resfriamento, e a importância de reduzir T_{DCA} é justificada pelos seguintes motivos:

- A capacidade de retenção de contaminantes do sistema de purificação de ar depende da temperatura na qual o ar é enviado ao sistema de purificação. Quanto maior a temperatura do ar, menor a capacidade de retenção de contaminantes. Isso significa que mais contaminantes entram nas colunas de destilação, aumentando a possibilidade de obstruções e perda de eficiência em trocadores de calor. Outro fator, é que teoricamente, o ar sai do DCA saturado, e quanto maior a temperatura de saída, maior será a quantidade de água contida no ar, portanto maior trabalho para o sistema de purificação.
- Outra questão relevante é que reduzir T_{DCA} implica em menor gasto de energia para a liquefação do ar e, em última análise, aumenta-se a produção de líquido da planta de fracionamento.

Portanto, a necessidade de produzir informações sobre o comportamento do sistema DCA-EVAP com vistas a melhoria no seu desempenho operacional é a principal justificativa para este trabalho

1.4 Objetivos e Contribuições do Trabalho

Este trabalho visa preencher necessidades da equipe de operação da planta de fracionamento de ar por um conhecimento técnico do sistema DCA-EVAP, com vistas a buscar um ponto

adequado de operação do sistema, que reduza T_{DCA} e embase decisões sobre modos operacionais da planta e propostas de melhorias no processo.

São objetivos principais deste trabalho:

- Desenvolver e validar um modelo que represente o sistema DCA-EVAP; e
- Construir uma carta gráfica do DCA de fácil utilização para as equipes de operação ajustar o sistema.

São objetivos específicos deste trabalho:

- Avaliar a aplicabilidade e precisão dos simuladores de código aberto DWSIM e ChemSep na modelagem do sistema; e
- Baseado nos resultados encontrados, listar possíveis melhorias no sistema para serem avaliadas em futuros trabalhos.

A vazão de nitrogênio impuro (doravante chamado de N_2 waste) e a vazão de água da bomba são os únicos parâmetros possíveis de serem alterados pela equipe de operação, portanto estas serão as variáveis de interesse na modelagem e na construção da carta gráfica.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo serão apresentados os conceitos fundamentais teóricos relacionados ao sistema em estudo. Adicionalmente serão apresentadas informações sobre a utilização e aplicabilidade dos simuladores de processo atualmente e uma descrição dos simuladores escolhidos para modelar o sistema DCA-EVAP.

2.1 Estado da Arte

Com o desenvolvimento dos softwares de simulação no início dos anos 80 a modelagem e a simulação de processo se tornaram mais rápidas e mais fáceis (Valderrama, 2012). Isto se deve à forma interativa na qual os componentes do processo pré-construídos são interconectados passo a passo para formar o modelo do processo sem necessidade de uma modelagem matemática complexa pelo usuário.

A utilização de simuladores de processo para modelar plantas industriais tem se mostrado uma ferramenta capaz de gerar ganhos financeiros expressivos. Além do benefício da própria modelagem dos processos com vistas a projeto e desenvolvimento de novas técnicas e tecnologias, as ferramentas de análise de sensibilidade de variáveis, análise econômica e otimização podem ser um diferencial em operação de plantas industriais.

Simulação do processo pode ser descrita como um modelo lógico para um processo químico, que pode ser usado para avaliar a resposta do processo para um determinado conjunto de entradas. Em um processo típico de engenharia, a simulação do processo fornece a capacidade para o projetista compreender as consequências de um novo detalhe antes da implantação real do processo. Isso minimiza muito os riscos associados com a implantação de projetos menos que ótimos. As simulações também permitem predição de respostas do processo às mudanças e propostas de melhoria nos parâmetros do processo. (Berrouk e Ochieng, 2014)

Diversos simuladores de processo comerciais estão disponíveis tais como Aspen Plus, SimSci, Hysys, Unisim, ProMax, gPROMS, CHEMCAD, Modelica, ProSim, IndissPlus, etc.

e outros de código aberto tais como COFE, ChemSep, EMSO, DWSIM, etc. Alguns atendem áreas específicas e outros são mais abrangentes; portanto, a escolha do simulador adequado depende do processo a modelar e o nível de complexidade e responsabilidade das respostas requeridas.

Segundo Alobaid et al. (2015, p.707), a simulação dos modelos permitem uma acurada previsão das características de uma planta, suas capacidades e limitações. Alobaid construiu um modelo de uma planta de geração de potência de ciclo combinado para avaliar seu comportamento durante partida da unidade e concluiu que os modelos de simulação podem prover uma efetiva ferramenta para avaliar novos projetos, melhorar estruturas de controles, promover mais rápidas alterações de carga da planta e melhorar procedimentos de partida. Neste estudo de caso foi feita modelagem em dois softwares diferentes e os resultados foram comparados entre eles para fins de validação.

Valderrama et al. (2012) conduziu uma modelagem da destilação alcoólica de bebidas como o Whisky, Vinho, Conhaque e Neutral Spirit e enfatizou que “a principal conclusão do estudo é que os simuladores podem desempenhar um papel importante na compreensão dos processos de destilação alcoólica, na otimização de recursos e fazer a destilação de vinho e mosto mais eficientes”. A utilização de uma ferramenta do simulador que permite criar componentes químicos hipotéticos foi essencial para o desenvolvimento desta simulação. Esta ferramenta já está disponível em simuladores de código aberto como o DWSIM.

A produção de novas tecnologias também pode ser avaliada pelos simuladores de processo. O processamento de H_2S para gerar enxofre foi estudado por Adewale et al. (2015) e foi desenvolvido e simulado um modelo que além do enxofre produziu também hidrogênio. No estudo de caso, o modelo do processo foi validado através da construção de uma planta-piloto. O custo estimado para a implantação do processo na planta de recuperação de enxofre de Abu Dhabi foi considerado compensador. Custos de supervisão, os custos do trabalho operacional e custos de manutenção foram obtidos a partir de cálculos feitos no próprio simulador de processo.

Técnicas de otimização através de ferramentas de um simulador de processo aplicadas a uma planta de processamento (liquefação) de gás natural foram discutidas por Berrouk e Ochieng (2014). O simulador foi utilizado para efetuar um estudo paramétrico, cujo resultado proveu um guia para novas condições operacionais que poderiam melhorar o desempenho da planta. Simulações do modelo variando parâmetros-chave da planta geraram dados de uma região de

melhor operação da planta, e oportunidades de melhoria no desempenho do processo foram enumeradas.

Simuladores de processo de código aberto também têm sido utilizados para modelagem de processos complexos tais como plantas de fracionamento de ar, porém, devido a questões comerciais, apenas com fins didáticos. Artigos sobre separação de Metanol/acetona (Luyben et al. Ind.Eng.Chem.Res. (2008) 47 pp. 2696-2707.) e a separação do butanol/água (Luyben et al. Energy Fuels (2008) 22 pp. 4249-4258.) tiveram sua modelagem reproduzidas usando o ChemSep. O site www.ChemSep.org tem diversos exemplos de aplicação desse simulador em pesquisas e problemas tratados em diversos artigos científicos.

Uma questão importante na utilização de simuladores é atestar ou avaliar a precisão do modelo. Kleijnen (1995) descreve métodos de Verificação e Validação de modelos de simulação (V&V é uma terminologia bastante comum nesta área). A Verificação e Validação pode/deve se tornar um processo sofisticado, dependendo do estudo de caso, sendo dividido em várias fases, cada uma com técnicas específicas descritas por este autor. Procedimentos práticos, computacionais e estatísticos são abordados, e a sua aplicabilidade discutida.

Estudos sobre operação de sistema DCA-EVAP não estão muito difundidos na literatura científica. Intensas buscas nos principais sites de compartilhamento de artigos científicos revelou uma escassez de materiais específicos. Os manuais disponibilizados pelos fabricantes da planta focam apenas o lado operacional e não exploram a questão da tecnologia e melhoria do desempenho da operação do sistema; portanto, os valores de projeto neles referenciados podem se tornar inadequados face às mudanças de processo ocorridas ao longo do tempo.

O DCA e o EVAP têm semelhanças com uma torre de resfriamento convencional, mas no exemplo em questão a água resfria o ar no DCA e o nitrogênio resfria a água no EVAP. Este trabalho, portanto, traz uma visão desbravadora da operação de tal sistema.

2.2 Os Simuladores de Processo DWSIM e ChemSep

Os simuladores de processo utilizados foram o DWSIM e o ChemSep, que são de código aberto, intercomunicáveis e compatíveis com os padrões CAPE-OPEN. Os padrões CAPE-

OPEN são normas uniformes para a interface de componentes de software de modelagem de processos desenvolvidos especificamente para o projeto e operação de processos químicos. Estes padrões são abertos, multiplataforma, uniforme e disponível gratuitamente¹.

O projeto CAPE-OPEN, financiado pela União Europeia, comprometeu-se da tarefa de definir uma estrutura de aplicação comum para Processos de Engenharia Assistidos por Computador (CAPE do inglês). O projeto fornece um padrão de interconexão de modelos de simulação para processos químicos, que se baseia na estrutura CAPE-OPEN para criar uma biblioteca de dados que pode ser usada para desenvolver Componentes de Modelagem de Processos (PMCs) que podem ser utilizados em qualquer pacote de simulação signatário da CAPE-OPEN – inclusive os melhores simuladores comerciais¹.

O DWSIM é um simulador de processo desenvolvido pelo brasileiro Daniel Medeiros e possui uma interface gráfica de fácil utilização com muitos dos recursos disponíveis em simuladores comerciais. Possuindo uma interface gráfica rica, este simulador permite que estudantes e profissionais de engenharia química entendam melhor o comportamento dos seus processos químicos através da utilização de modelos termodinâmicos rigorosos e de operações unitárias, sem nenhum tipo de custo².

O ChemSep é um simulador desenvolvido por Harry Kooijman e é especializado em processos de colunas de separação tais como colunas de absorção, destilação e extração³. Neste trabalho o DWSIM foi utilizado como a plataforma base e unidades do ChemSep foram adicionadas ao fluxograma para completar a modelagem.

2.3 Fundamentação Teórica

Nesta seção serão apresentados os princípios da modelagem teórica das colunas de destilação que representam o DCA e o EAVP no simulador, as equações que governam o modelo e os modelos de cálculo de propriedade utilizados.

¹ DWSIM Wiki. Em: <<http://dwsim.inforside.com.br>>. Acesso em 15 jun. 2015.

² CAPE OPEN: **Standards e Supporting Documents**. <<http://www.colan.org>>. Acesso em 01 maio 2015.

³ ChemSep: Downloads. <<http://www.chemsep.org>>. Acesso em 15 jun. 2015.

2.3.1 Modelagem teórica do DCA e do EVAP no simulador de processo

O processo que ocorre no DCA e EVAP pode ser considerado como uma operação unitária, na qual os componentes trocam calor e massa através de estágios teóricos. Tal processo pode ser considerado como uma operação unitária de umidificação, segundo classificação de Foust e Clump (1982, p.4), que define operação unitária como a “filosofia de que uma sequência amplamente variável de etapas podem ser reduzidas a operações simples, ou a reações, que são idênticas independentemente do material que está sendo processado”.

Uma das formas mais comuns de modelagem matemática de operações unitárias tal como a umidificação é a definição de um estágio de equilíbrio, ilustrado na Figura 3. Desta forma, “o estudo de equipamentos como um todo é mais bem feito focando a atenção nos fluxos passando entre os estágios individuais” (McCabe et al. 1993, p.505).



FIGURA 3: Andar ou Estágio teórico (adaptado de The ChemSep Book, 2006, p.191)

Neste estágio de equilíbrio as propriedades de dois ou mais fluxos são intercomunicadas, de forma que ao sair do estágio os fluxos estão em equilíbrio. No caso em questão, o Ar ou N_2 ao deixar o estágio são considerados estar em equilíbrio com a água. Por equilíbrio entende-se como a condição na qual a taxa de troca das grandezas termodinâmicas entre duas fases é nula (Foust e Clump, 1982, p.2). Um processo geral de umidificação é visto na Figura 4.



FIGURA 4: Estágio teórico típico do processo de umidificação

(adaptado de Foust e Clump, 1982, p.376)

Neste processo os índices 1 e 2 referem-se à base e ao topo da coluna respectivamente; os índices **L** e **V** referem-se às fases líquido e vapor, respectivamente, e são as vazões molares; **V'** é a vazão do gás não condensável no sistema, no caso o AR ou o N₂; e **q** é a troca de calor do estágio com o ambiente externo.

2.3.2 Equacionamento do estágio teórico

Segundo The ChemSep Book (2006), as equações que modelam os estágios de equilíbrio no simulador são chamadas de MESH. O “M” significa balanço de material; o “E” as relações de equilíbrio líquido-vapor; o “S” somatório das frações molares igual a 1; e “H” o balanço de entalpia. A solução dessas equações resulta nas frações molares de vapor e de líquido, assim como temperatura e vazões de líquido e vapor de cada estágio. Na Figura 5 está um estágio típico para exemplificar essa modelagem.

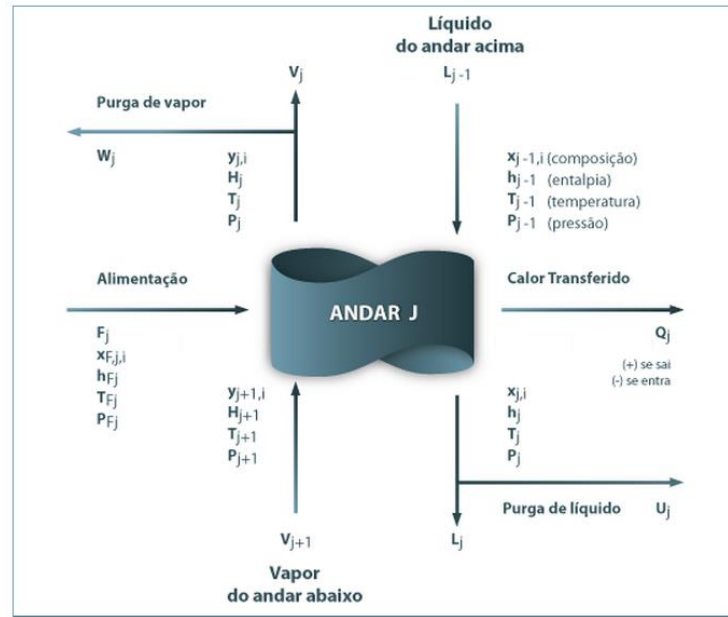


FIGURA 5: Estágio (ou andar) teórico da modelagem MESH
(Fonte: <http://labvirtual.eq.uc.pt/>)

As equações MESH são definidas no The ChemSep Book (2006) como segue:

M:

$$M_j \equiv (1 + r_j^V)V_j + (1 + r_j^L)L_j - V_{j+1} - L_{j-1} - F_j = 0 \quad (1)$$

Onde:

$$r_j^V = W_j/V_j \quad \text{e} \quad r_j^L = U_j/L_j \quad (2)$$

E:

$$E_{ij} \equiv K_{ij}x_{ij} - y_{ij} = 0 \quad (3)$$

Onde: K_{ij} é o K-value da espécie i no estágio j.

S:

$$S_j^V \equiv \sum_{i=1}^c y_{ij} - 1 = 0 \quad (4)$$

$$S_j^L \equiv \sum_{i=1}^c x_{ij} - 1 = 0 \quad (5)$$

H:

$$\begin{aligned} H_{ij} \equiv & (1 + r_j^V)V_j H_j^V + (1 + r_j^L)L_j H_j^L + Q_j - V_{j+1} H_{j+1}^V \\ & - L_{j-1} H_{j-1}^V - F_j H_j^F = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Há dezenas de métodos para resolver as equações MESH, que variam de acordo com natureza dos componentes, fase, range de pressão e temperatura. O ChemSep usa majoritariamente o método de Newton. Para uma visão mais detalhada deste e de outros métodos de solução das equações de balanço, ver The ChemSep Book, 2006.

2.3.3 Os modelos de cálculo de propriedades termodinâmicas pelo simulador ChemSep

De posse das equações de balanço dos estágios de equilíbrio, há a necessidade de calcular o valor das propriedades termodinâmicas a cada estágio. Para isso, há diversos métodos de cálculo no simulador e a seleção do mais adequado depende da experiência do usuário, da aplicação e de recomendações de especialista na utilização dos métodos (The ChemSep Book, 2006). As propriedades que dependem de seleção de método de cálculo são o K-value, o coeficiente de atividade, a pressão de vapor e a entalpia, que são definidos como segue:

- K-value: é a razão entre a quantidade de vapor e a quantidade de líquido no estado de equilíbrio;
- Coeficiente de atividade: representa a força motriz para interação entre duas espécies químicas em equilíbrio numa solução. A maioria dos métodos de cálculo desta propriedade do sistema recorre ao Coeficiente de Interação Binária, uma constante das equações de determinação do coeficiente de atividade que quantifica o nível de interação entre duas espécies químicas em contato. Esse coeficiente é calculado automaticamente pelo simulador, ou está disponível em livrarias do software ou pode ser obtido de dados experimentais.

- Pressão de vapor: é a pressão exercida pelo vapor sobre a superfície do líquido num sistema em equilíbrio.
- Entalpia: pode ser definida como o nível de energia do sistema termodinâmico ($h = u + pv$).

2.3.3.1 Modelo de Peng-Robinson

A equação de Peng-Robinson é uma equação de estado cúbica, cuja premissa é que o desvio da idealidade se deve às forças intermoleculares (repulsivas e atrativas), que exercem papel preponderante no comportamento PVT do fluido. Este modelo além de prever propriedades como pressão, temperatura e volume tem sido usado para calcular sistemas em equilíbrio líquido-vapor de maneira eficiente (Reid et al. 2001); e melhorias no método tem estendido sua aplicação a sistemas não ideais. O método de Peng-Robinson tem apresentado melhorias em relação à predição de densidade na fase líquida em relação a outras equações de estado cúbicas¹.

No equacionamento matemático há necessidade de dois parâmetros de interação binária, o que torna esse método adequado a tratar sistemas de comportamento desconhecido. Alguns softwares como o HYSYS geram automaticamente os parâmetros para componentes hipotéticos.

2.3.3.2 O modelo de Wilson

O modelo semi-empírico de Wilson foi proposto em 1964 e está fundamentado na teoria da composição local, na qual numa solução binária, a composição macroscópica não corresponde à composição microscópica, ou seja, as moléculas dos dois componentes não se distribuem uniformemente na mistura líquida, ocorrendo duas situações. A formulação matemática desse modelo usa dois parâmetros de interação binária para estimar o coeficiente de atividade de uma mistura multicomponente¹.

¹ RAZIFAR, Madhi. **Property Package Descriptions**. Em: <<http://www.razifar.com>> Acesso em 20 abr. 2015

O modelo de Wilson tem sido considerado um dos métodos mais acurados para prever relações de equilíbrio em misturas líquido-vapor, mas para sistemas líquido-líquido o modelo não apresenta bons resultados (The ChemSep Book, 2006). O Método de Wilson é usado principalmente para sistemas químicos de caráter não ideal (Reid et al. 2001), uma vez que as forças entre os componentes é muito alta.

2.3.3.3 O método DECHEMA

O método DECHEMA é utilizado na estimação do K-value e se baseia num modelo de coeficiente de atividade para calcular a fase líquida e numa equação de estado para calcular a fase vapor. É uma simplificação do modelo de Gamma-fhi, no qual o coeficiente de fugacidade fase de vapor e fator de correção Poynting são assumidos ser igual à unidade.

DECHEMA é a Rede competente para Engenharia Química e Biotecnologia na Alemanha. É uma organização sem fins lucrativos que mantém um banco de dados de propriedades termoquímicas, inclusive de misturas binárias.

2.3.3.4 A equação de Antoine

A formulação de Antoine é uma equação de pressão de vapor e descreve a relação entre a pressão de vapor e a temperatura para os componentes puros, onde cada componente é representado por constantes na equação. A aplicação desta equação é recomendada para trabalhar com o método DECHEMA, pois a fase vapor será tratada pela equação de Antoine (The ChemSep Book p.133, 2006).

A escolha dos métodos de calculo das propriedades do sistema DCA no simulador ChemSep levou em conta os seguintes fatores: o sistema AR-H₂O é considerado não ideal, uma vez que o Ar é uma substância apolar e a água é polar (Potons, 2015); a pressão de operação do DCA é 12 Bar abs (é considerada moderada. Caso fosse alta o método escolhido não seria aplicável). Assim, o K-value foi calculado pelo método DECHEMA; o coeficiente de atividade foi calculado pelo modelo de Wilson; a pressão de vapor por Antoine e a entalpia por Peng-Robinson 76. Esta seleção é adequada tratar sistemas não ideais (The ChemSep Book, 2006).

O EVAP também constitui um sistema não ideal devido a diferença de polaridade entre N_2 e H_2O . Para este sistema foi mais adequado utilizar Wilson para especificar tanto K-value quanto o coeficiente de atividade. Foi utilizado Antoine para calcular a pressão de vapor e Peng-Robinson 76 para o cálculo da entalpia.

A utilização do modelo de Wilson na estimativa do coeficiente de atividade e de Peng-Robinson 76 para estimar a entalpia se deve principalmente a possibilidade de ajuste dos parâmetros de interação binária, o que é essencial para o ajuste do modelo ao processo real. Esses parâmetros definem o nível de interação entre as espécies químicas.

2.3.4 Determinação da quantidade de estágios e dos parâmetros de interação binária

Uma restrição do simulador ChemSep de código aberto é não ser possível especificar o tipo de enchimento das colunas de separação nem características físicas internas tais como distribuidores de líquido e gás. Desta forma, é desnecessário modelar rigorosamente as colunas (DCA e EVAP) para calcular número de estágios teórico, definir eficiência dos estágios, etc. uma vez que não poderemos inserir esses dados no simulador.

Uma forma que contornar esse problema é utilizando um conceito básico da validação cruzada (Cross-validation), que é estimação de parâmetros de um modelo a partir de um conjunto de dados de um sistema real (Simon, 1999).

A validação cruzada é uma técnica que visa avaliar a capacidade de um modelo em realizar predição quando alimentado com um novo conjunto de dados de entrada. O conceito básico das técnicas de validação cruzada é o particionamento do conjunto de dados em subconjuntos mutualmente exclusivos, e posteriormente, utiliza-se alguns destes subconjuntos para a estimação dos parâmetros do modelo (dados de treinamento) e o restante dos subconjuntos (dados de validação ou de teste) são empregados na validação do modelo (Kohavi, 1995).

A estimação dos parâmetros pode recorrer a técnicas e ferramentas de regressão ou ser feita por tentativa manualmente; contudo deve ser resguardada a aleatoriedade dos conjuntos de dados e da escolha de quais conjuntos serão para treinamento e para validação. O método da validação cruzada possuem diversos métodos de particionamento de dados e tem formulações matemática próprias para fins de validação dos modelos (Efron e Tibshirani, 1997).

No presente trabalho o conceito da validação cruzada foi utilizado apenas para gerar os parâmetros necessários ao modelo, nominalmente o número de estágios e os parâmetros de interação binária do modelo de Wilson e Peng-Robinson. A validação do modelo será feita por métodos estatísticos.

2.4 Validação do Modelo

O conceito de “validação está relacionado com determinar se o modelo conceitual simulado é uma representação do sistema em estudo” (Law and Kelton 1991, p.299 *Apud* Kleijnen 1995 p.1), O próprio Kleijnen (1995, p.1), nota que: “Validação, contudo, não pode ser assumida como possível de resultar em um modelo perfeito, uma vez que o modelo real é o próprio sistema (por definição, nenhum modelo é uma representação da realidade). O modelo deve ser ‘bom o bastante’ dependendo do seu proposito”. Como não se tem referências do sistema em estudo anteriores a este trabalho a validação será avaliada de forma prática pelo conhecimento do sistema e através de estatística que restrinjam os níveis de incerteza.

2.4.1 Verificação em módulos

A verificação em módulos é uma boa prática que consiste em dividir a simulação em partes independentes e verificar o correto funcionamento de cada uma delas antes de construir o fluxograma geral (Kleijnen, 1995 p.2). Esta prática é particularmente importante ao lidar com simuladores de código aberto, uma vez que a experiência mostra ser maior a ocorrência de erros (bugs) no funcionamento de componentes da simulação. Com isto espera-se diminuir a ocorrência de erros na confecção do modelo.

Neste trabalho, antes da construção do fluxograma completo no simulador, o DCA, o EVAP e periféricos como bomba, tubulações, etc. foram simulados individualmente. Devido maior praticidade, nesta fase foi feita a determinação do número de estágios e dos parâmetros de interação binária (AR-H₂O do DCA e do N₂-H₂O do EVAP). Devido as simples correlações

das variáveis foi feito ajuste manual dos parâmetros e não foi preciso recorrer a métodos formais ou ferramentas de regressão.

2.4.2 Validação estatística

Nesta seção o objetivo é mostrar os métodos utilizados para provar a correlação (concordância) estatística existente entre os valores simulados e os valores reais de processo para um mesmo conjunto de dados de entrada. Para este propósito será utilizado o coeficiente de correlação (R) e o Test-t de Student.

Define-se aqui conjunto de dados de entrada como o conjunto de todas as variáveis necessárias para a simulação ser processada corretamente (ex.: Temperaturas, vazões, pressões, composições, etc). Esse conjunto de dados será processado pela simulação e gerará resultados que serão comparados com a saída real do processo, conforme esquema da Figura 6.

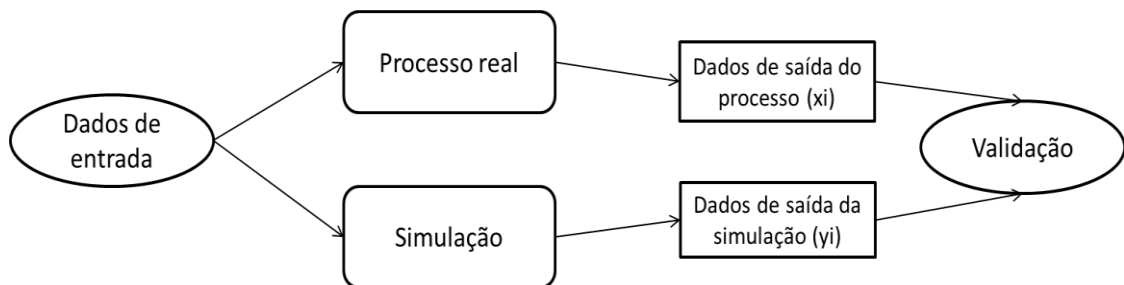


FIGURA 6: Modelo da validação do estudo de caso

2.4.2.1 Análise de Correlação

Para uma primeira visualização da comparação entre resultados reais e simulados costuma-se plotar os dados reais e simulados num gráfico cartesiano. Feito isto, caso haja algum grau de concordância entre os valores, será possível notar uma relação linear, ou formalmente

chamada de associação linear¹. A associação linear entre duas variáveis poder ser avaliada usando o Coeficiente de Correlação de Pearson (R), ou simplesmente Coeficiente de Correlação, que é uma medida da variância compartilhada entre duas variáveis (Brito e Alexandre, 2009), e é calculado como segue.

$$R = \frac{1}{n-1} \sum \left(\frac{x_i - X}{S_x} \right) \left(\frac{y_i - Y}{S_y} \right) \quad (7)$$

Onde:

n : número de amostras (x_i, y_i).

S_x : desvio padrão dos valores x_i ;

S_y : desvio padrão dos valores y_i ;

X : média dos valores x_i ;

Y : média dos valores y_i .

Quanto maior a correlação entre as variáveis o valor de R tenderá a |1|. Se o número encontrado for positivo a correlação é positiva e se negativo, então a correlação é negativa. Contudo deve-se notar que correlação é diferente de causalidade; e a causa da associação de duas variáveis observadas pode ser causada por outra variável não observada¹. A determinação do coeficiente de correlação neste trabalho foi feita usando o Microsoft Excel (função CORREL).

2.4.2.2 Análise de Significância

Além de verificar a correlação entre variáveis é necessário ainda verificar o nível de significância desta correlação. Para isto, foi utilizado o Teste-t de Student Emparelhado com hipótese nula, cuja finalidade é demonstrar que não existe diferença entre a média das

¹ RIBEIRO, Paulo Justiniano Jr. **Correlação**: <<http://leg.ufpr.br/~paulojus/CE003/ce003/>>. Acesso em 15 jun. 2015

diferenças entre valores reais e dos simulados e uma valor esperado da média, além de erros aleatórios (Bezerra 2004); ou, caso exista diferença, determinar seu nível de significância, que é a probabilidade de que o resultado encontrado tenha acontecido somente devido ao acaso. Outra interpretação do nível de significância é que ele é a probabilidade de cometermos um erro Tipo I: rejeitar a hipótese nula, sendo ela de fato verdadeira.

“O valor de t é comparado com o valor tabelado no nível de significância requerido, usando um teste bilateral e $(n-2)$ graus de liberdade. A hipótese nula nesse caso é a correlação entre x_i e y_i . Caso o valor calculado de t seja maior que o valor tabelado, a hipótese nula é rejeitada, se conclui que existe uma correlação significativa” (Bezerra, 2004)

Para realizar o Teste-t analiticamente ver Kleijnen (1995), segundo o qual a estatística t pode ser calculada como segue:

$$t_{n-1} = \frac{\bar{I} - \delta}{S_d / \sqrt{n}} \quad (8)$$

onde:

$\bar{I}$: é a média de $I_i = x_i - y_i$, onde x_i e y_i são o resultado do processo e da simulação para um conjunto de dados de entrada i .

δ : é o valor esperado de $\bar{I}$.

S_d : é o desvio padrão estimado de $\bar{I}$.

n : o número de pares na amostra (x_i, y_i)

A hipótese nula equivale a $\delta = 0$.

Caso $t_{n-1} > t_{\text{crítico}}$ o modelo simulado é rejeitado, pois a média entre valores reais e simulados se desviam significativamente da realidade; caso contrário, é aceito. Este procedimento de tomar dados aos pares e analisar a diferença entre medidas é conhecida como Teste-t emparelhado (Hines, 2006, p. 261).

Neste trabalho o calculo da estatística t emparelhada foi feito pelo Excel.

3 METODOLOGIA

Nesta seção serão abordados a problemática encontrada na modelagem do sistema, os cálculos e simulações preliminares para definição de algumas variáveis de entrada da simulação e serão apresentados detalhes da construção do fluxograma nos simuladores de processo e as simplificações adotadas no modelo.

3.1 Problemática Imposta pelo Estudo de Caso

Ao modelar o sistema DCA-EVAP foi necessário fazer simplificações e formular hipótese, uma vez que há falta de dados, falta de instrumentos e restrições dos simuladores. Este capítulo mostra as hipóteses e simplificações adotadas.

3.1.1 *Falta de instrumentação*

Diferente de um experimento no qual podemos planejar, especificar e escolher onde colocar a instrumentação, o sistema em questão apresenta falta de medição de variáveis importantes, como descrito abaixo:

- Vazão de água da bomba: não há um medidor de vazão da água que circula no sistema. A única referência é a curva de vazão da bomba fornecida pelo fabricante, reproduzida na Figura 7. Portanto, espera-se alto nível de incerteza no resultado final com relação da este parâmetro.

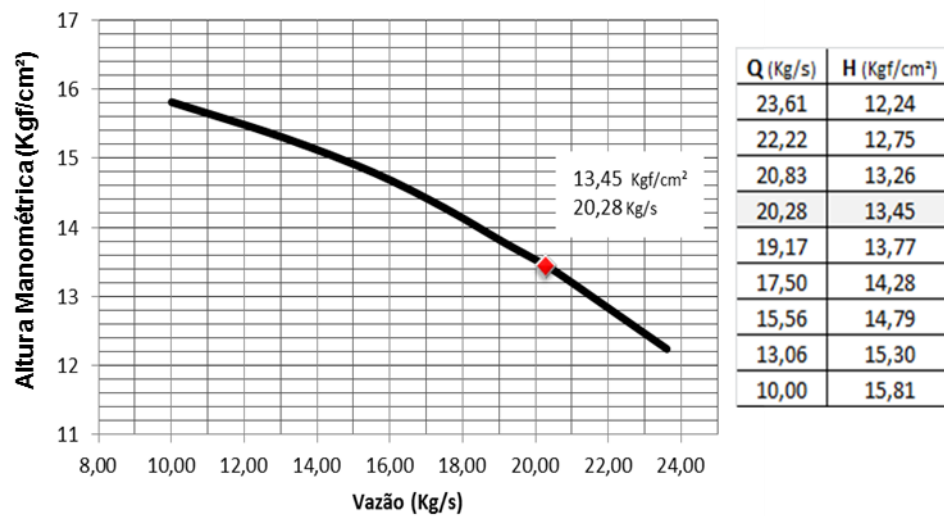


FIGURA 7: Curva de vazão da bomba d'água fornecida pelo fabricante

- Temperatura da água de reposição: não há medidor de temperatura e de vazão da água de reposição (água potável). A temperatura foi adotada como sendo a temperatura ambiente e a vazão foi calculada em função das perdas no DCA e EVAP e da vazão de purga. O fato de essa tubulação de água percorrer quilômetros debaixo da terra e através de galerias certamente induzirá erros na estimativa do valor da temperatura.
- Vazão de Purga: a válvula de purga (de 1 polegada) abre automaticamente a cada 35 minutos e permanece totalmente aberta por 5 minutos. A vazão através dessa válvula foi calculada em função do coeficiente de vazão (CV) e do delta de pressão, através de fórmulas de um fabricante tradicional de válvulas globo.
- Temperatura do nitrogênio waste: a temperatura do nitrogênio waste não é medida diretamente no fluxo que vai para o EVAP, foi necessário usar o simulador de processo para estimar a temperatura do fluxo de waste. Conforme a Figura 8 o sensor de temperatura cujo *tag* é TI-775 está numa ramificação da linha de nitrogênio waste, que vai para o sistema de purificação. Essa linha não possui isolamento térmico, enquanto a que vai para o EVAP possui. Na simulação foram considerados todos os elementos reais da linha, tais como curvas, válvulas e tipo de material. O valor resultante da simulação resultou em uma diferença de apenas 0,05°C a menor para a temperatura do waste, portanto o TI-775 foi tomado como a temperatura do N₂ waste para o EVAP.

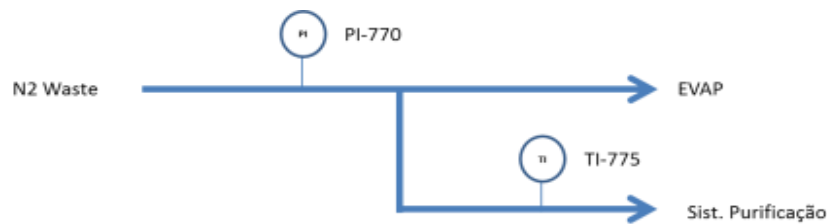


FIGURA 8: Detalhe do processo para a estimativa da temperatura do N₂ waste.

- Pressão do nitrogênio waste: conforme a Figura 8 o ponto do PI-770 não representaria bem a pressão de N₂ waste na entrada do EVAP; por isso, foi inserido nos componentes da simulação elementos para tratar da queda de pressão na linha, tais como válvulas, ramificações, expansões, reduções e curvas.
- Vazão de ar para o DCA e vazão de nitrogênio waste para o EVAP: a vazão de ar para o DCA é medida por 03 instrumentos diferentes (placas de orifício) e historicamente não há convergência entre os valores medidos. Para contornar esse problema foi feito um balanço de massa reverso com base na vazão de oxigênio que sai da planta em seus diversos fluxos (produto gasoso, produto liquido, argônio, N₂ waste e N₂ produto) que, historicamente, tem apresentado resultado mais realista da vazão de ar. Para isto foi tomada a media de 04 horas das respectivas vazões para cada conjunto de dados a serem simulados.
- Vazão de nitrogênio waste para o EVAP: para a vazão de nitrogênio waste não existe um medidor. Para contornar esse problema foi feito um balanço de massa conforme citado acima. Uma das questões a ser resolvida no balanço de massa é uma ramificação da linha de waste, que deixaria duas variáveis desconhecidas no balanço de massa. Como esta ramificação (Figura 9) possui uma válvula globo que trabalha totalmente aberta, seu calculo será feito teoricamente através do CV e delta de pressão.

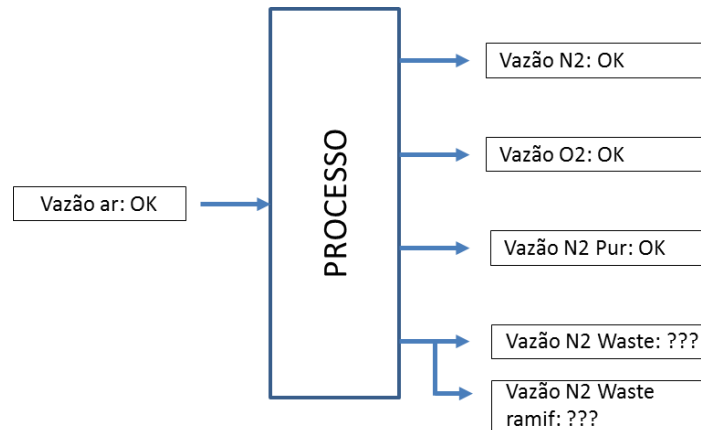


FIGURA 9: Esquema do balanço de massa simplificado da planta

- O EVAP é aberto no topo: O EVAP possui um diâmetro cerca de 2600 mm no topo, onde o N₂ waste é descarregado para a atmosfera, e este fato faz que a ocorrência de chuva gere uma adição de água no sistema e, portanto, influência sobre a temperatura do mesmo. Como durante a coleta de dados não foi possível registrar a variável chuva, ela será um ponto de incerteza da simulação.

Por fim, vale ressaltar que o sistema de aquisição de dados coleta informações a cada 01 minuto. Este período pode ser considerado adequado para o estudo em questão, uma vez que o mesmo é modelado como estando em regime permanente.

3.1.2 Perfil dinâmico x Perfil estacionário

Como já ressaltado, o fato de a válvula de purga abrir periodicamente causa oscilações nas variáveis do processo, especificamente nas temperaturas, inclusive a temperatura de saída do ar do DCA, T_{DCA} , que é a variável de interesse deste trabalho. A rigor, o sistema não opera em estado estacionário, como o será na simulação. O perfil das variações das principais temperaturas é visto na Figura 10.

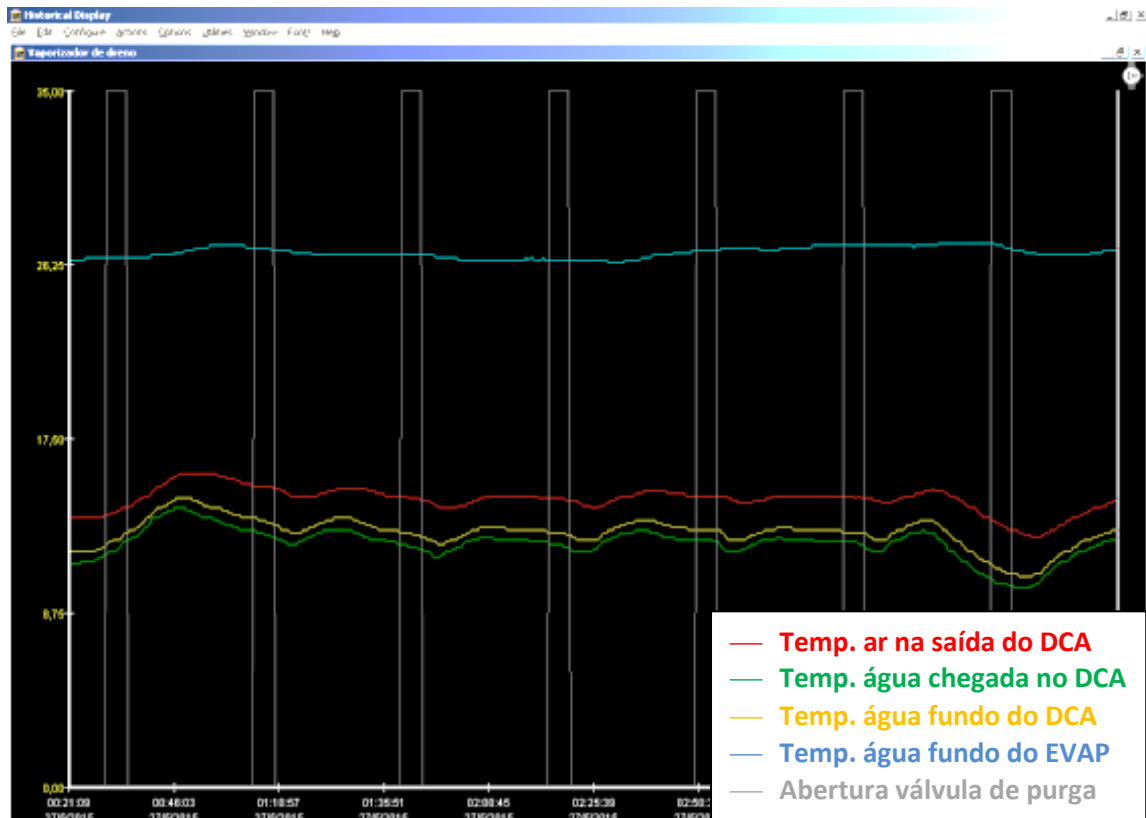


FIGURA 10: Perfil das variáveis do DCA e EVAP e abertura da válvula de purga

Face a isso, os dados de entrada inseridos na simulação foram tomados como a média aritmética de 01h10min (correspondente a 02 ciclos da válvula de purga) dos dados reais tomados do processo. Com isto, espera-se que a média das oscilações das variáveis de entrada gerem impactos médios nas variáveis de saída do sistema, e assim possa se aproximar da simulação em regime permanente.

Outra questão imposta pelo ciclo de abertura da válvula de purga é a alteração da vazão de água de retorno do DCA para o EVAP (ver Figura 2). Para tratar o sistema como estacionário foi considerado que a purga é contínua, e a quantidade purgada em 5 minutos será a mesma purgada durante todo o ciclo de abertura da válvula. O mesmo é feito para a reposição e água no EVAP.

A vazão de N_2 waste para o EVAP também possui alterações cíclicas, conforme visto na Figura 11. Para contornar este problema os dados foram selecionados de forma a não sofrer influência destas alterações e, portanto, serem considerados de caráter estacionário.

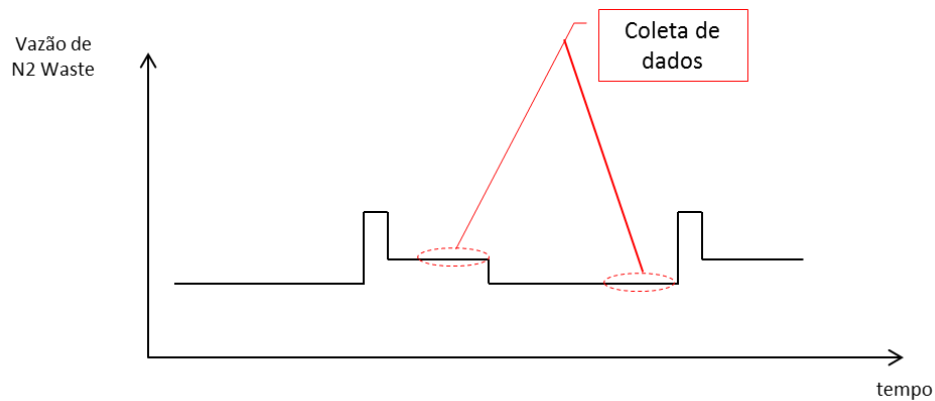


FIGURA 11: Ilustração do perfil da vazão de N₂ waste para o EVAP e pontos de coleta de dados

3.2 Cálculos e Simulações Preliminares

Algumas variáveis de entrada para a simulação precisaram ser definidas previamente, conforme abaixo:

3.2.1 *Cálculo da vazão de purga, de reposição do sistema DCA-EVAP e vazão da ramificação do N₂ waste*

O cálculo da vazão de purga de água do sistema e da vazão da ramificação da linha de N₂ waste (ver Figuras 2 e 9) foram baseados no CV e ΔP de um fabricante tradicional de válvula globo. Ver Catálogo de dimensionamento válvulas globo de controle Klinger.

Cálculo da vazão de purga de água do sistema:

Dados da Válvula de purga de água:

- Tipo: Válvula Globo
- Diâmetro nominal: 1 polegada
- CV: 14
- ΔP : 7,5 bar

Segundo o manual do fabricante a vazão pode ser calculada por:

$$C_v = \frac{1,16W}{\sqrt{(Gf.\Delta P)}} \quad (9)$$

Onde:

C_v : Coeficiente de vazão

W : Vazão do líquido, t/h

ΔP : Diferença de pressão, P à montante – P à jusante

Gf : Gravidade específica na temperatura de escoamento

Resultado obtido:

$W_{100\%} = 33 \text{ m}^3/\text{h}$ (vazão nominal da válvula de purga 100% aberta)

Como dito anteriormente, a fim de estudar o sistema como se estivesse em estado estacionário essa vazão de purga, que ocorre durante 5 minutos a cada 35 minutos, foi considerada contínua. Assim:

$W = 4,7 \text{ m}^3/\text{h}$ (quantidade de água que sai pela válvula de purga considerando uma purga contínua).

O cálculo da vazão de reposição de água no EVAP, W_{rep} , (considerada como contínua) leva em conta a vazão de purga W e as perdas/ganho devido à umidificação no EVAP e DCA, e foi equacionada para cada simulação conforme abaixo:

$$W_{rep} = W + P_{EVAP} + G_{DCA} \quad (10)$$

Onde:

W_{rep} : Vazão de água de reposição.

P_{EVAP} : Perda de água devido a umidificação do N_2 waste no EVAP.

G_{DCA} : Ganho de água devido a desumidificação do Ar no DCA.

W: Vazão de água de purga.

Segue abaixo cálculo da vazão da ramificação da linha de N₂ waste:

Dados da Válvula da linha de ramificação:

- Tipo: Válvula Globo
- Diâmetro nominal: 4 polegadas
- CV: 213
- ΔP : 0,0686 bar

Segundo o manual da Klinger a vazão pode ser calculada por:

$$C_v = \frac{Q}{295} \sqrt{\frac{GTZ}{\Delta P(P_1 + P_2)}} \quad (11)$$

Onde:

Cv: Coeficiente de vazão

Q: Vazão do gás a 15°C e 1 Atm, m³/h

ΔP : Diferença de pressão, P à montante – P à jusante

G: Gravidade específica do gás

T: Temperatura do escoamento

Z: Fator de compressibilidade

Resultado obtido:

$Q = 1318 \text{ m}^3/\text{h} @ 15^\circ\text{C e } 1 \text{ Atm.}$

$Q_N = 1249 \text{ Nm}^3/\text{h} @ 0^\circ\text{C e } 1 \text{ Atm.}$

O valor de Q foi normalizado (Q_N) para ser comparável com as demais vazões da planta, que são normalizadas para 0°C e 1 Atm.

3.2.2 Simulação da altura manométrica mínima da bomba de água

Para a confecção da carta gráfica há a necessidade de manipular a vazão da bomba d'água. Como a pressão da descarga da bomba está diretamente relacionada com a vazão, e esta pressão possui um valor mínimo admissível, o qual deve ser o necessário para enviar água para o DCA, surge a necessidade de saber a pressão mínima teórica de trabalho da bomba para que esta mantenha o fluxo de água para o DCA.

Para isto, foi feita uma simulação da perda de carga da linha da bomba considerando todos os equipamentos envolvidos tais como filtros, válvulas, reduções, expansões, curvas, elevação, etc. A altura de nível do EVAP e todo o dimensional da linha também foram considerados no cálculo. A Figura 12 mostra um esquema da linha da bomba do EVAP para o DCA.

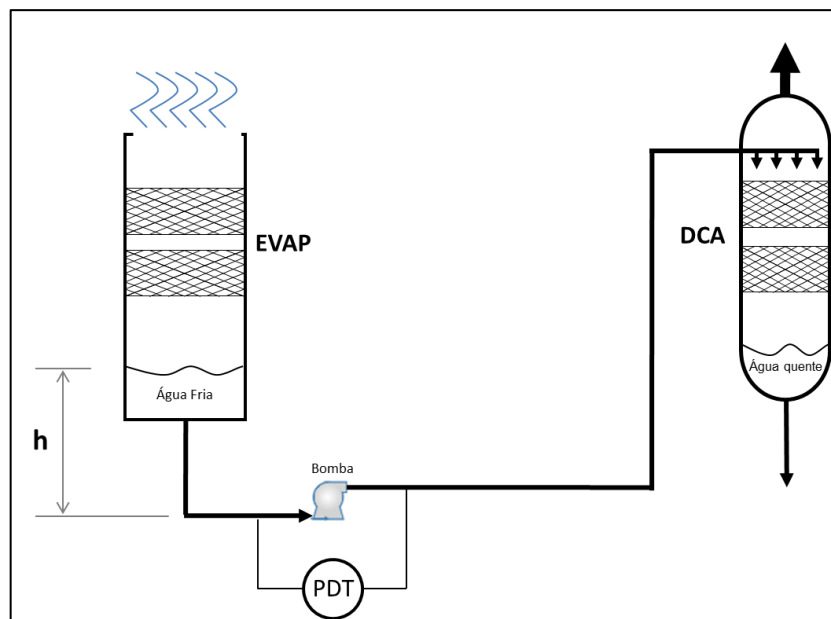


FIGURA 12: Fluxograma esquemático da linha da bomba do EVAP para DCA

Como no simulador não é considerada a formação de nível de água no fundo do EVAP, foi necessário calcular por método analítico o ganho de pressão na sucção da bomba devido à altura de nível do EVAP (cota h na Figura 12). A perda de carga dinâmica tanto na linha de sucção como na de descarga da bomba foram determinadas pelo simulador.

Seja P_s a pressão na sucção da bomba considerando a cota h e desconsiderando as perdas de carga dinâmicas.

$$P_s = \rho \cdot g \cdot h = 1000 \cdot 9,81 \cdot 1,95 \quad (12)$$

$$P_s = 0,195 \text{ Kgf/cm}^2 \text{ g}$$

Seja PDT a pressão diferencial entre descarga e sucção da bomba (altura manométrica) e considerando a influencia da cota h do EVAP e perdas de carga ao longo da tubulação da bomba, o valor mínimo teórico de PDT encontrado pelo simulador é:

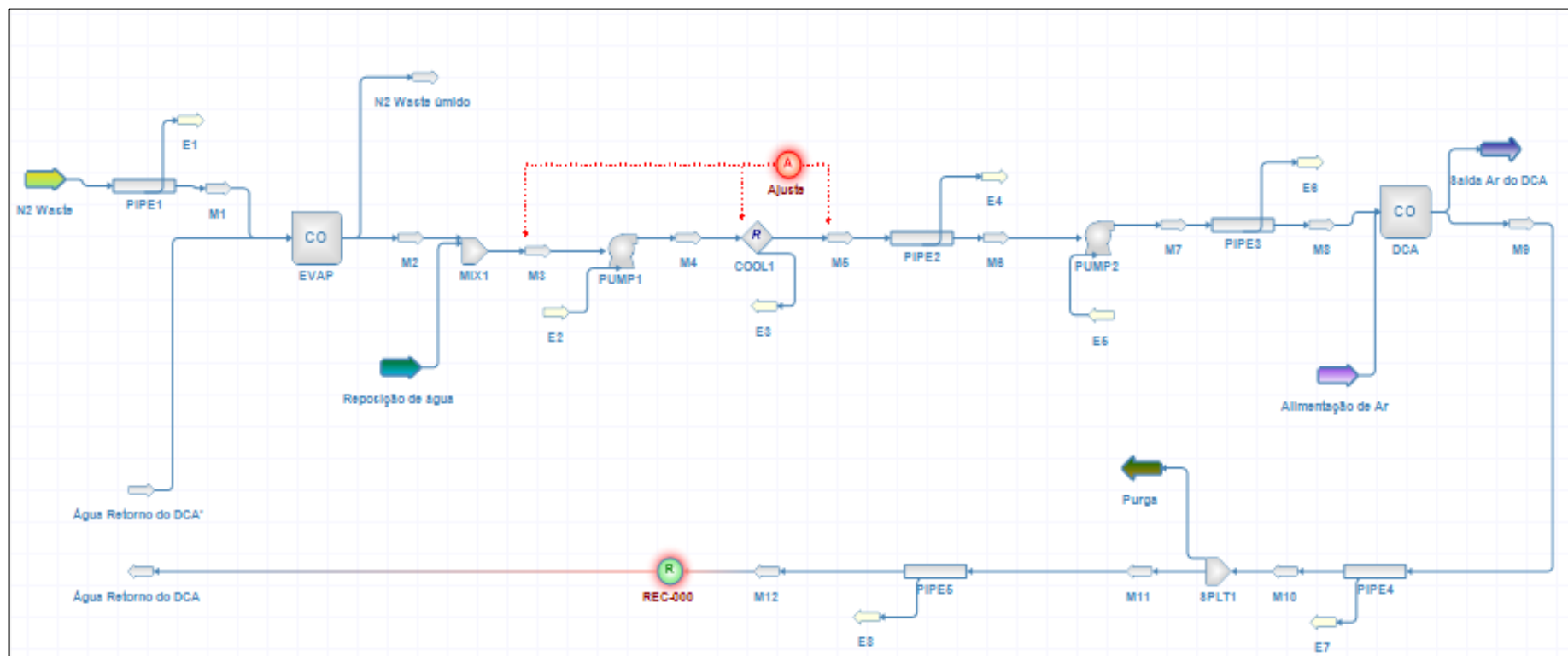
$$PDT_{\min} = 12,45 \text{ Kgf/cm}^2 \text{ g}$$

3.3 Elaboração do Fluxograma do Processo no Simulador

Nesta seção serão apresentadas informações sobre a construção do fluxograma nos simuladores de processo.

3.3.1 O fluxograma geral da simulação

O fluxograma do sistema DCA – EVAP completo foi construído no simulador DWSIM e está mostrado na Figura 13. Dados das propriedades e condições termodinâmicas dos fluxos em cada ponto do sistema DCA-EVAP são mostrados no Apêndice B (Tabela 9); e o resultado dos cálculos das tubulações e bomba do sistema é mostrado na em B.6.



Na construção do modelo do EVAP foram utilizados os seguintes artifícios:

- O PIPE1 representa a tubulação de entrada de N2 waste do EVAP e são considerados a troca de calor com o ambiente, curvas, válvulas expansões, comprimento real conforme projeto, etc. Isto é valido para o s demais PIPEs do fluxograma.
- Foi utilizado o MIX1 para representar a adição de água de reposição no fundo do EVAP.
- A coluna de líquido formada pelo nível no fundo do EVAP foi representada pela PUMP1 e o COOL1. Este último foi usado apenas com o fim de anular o ganho de temperatura da PUMP1, cujo controle é feito pelo elemento lógico “Ajuste”.

O modelo no DWSIM utilizou o pacote de propriedade Peng-Robinson.

Segue abaixo na Figura 14 uma comparação entre a construção do EVAP no Simulador seu esquema real:

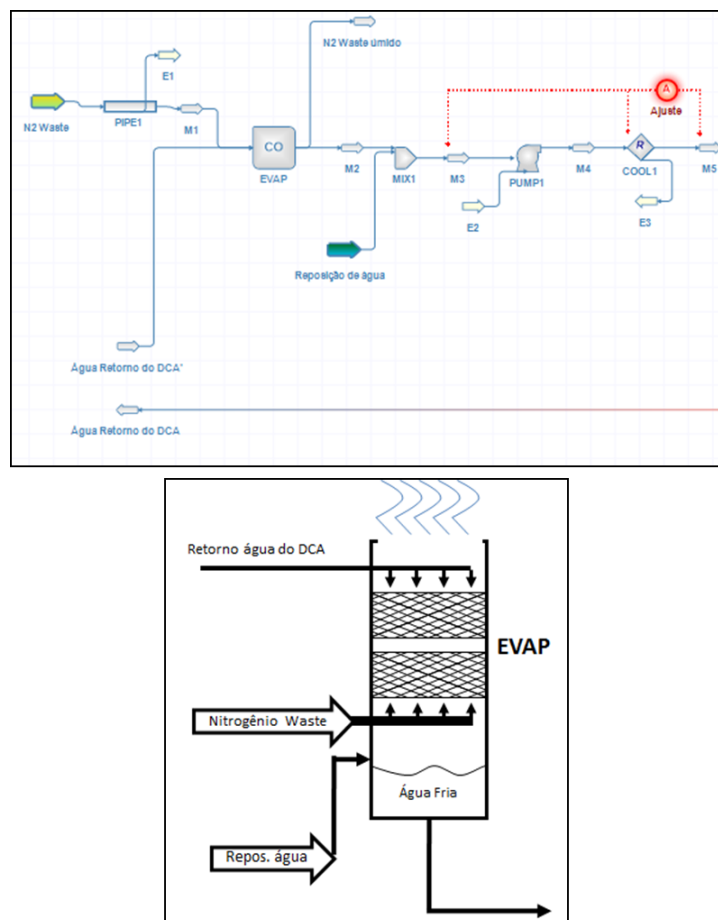


FIGURA 14: Comparação de Fluxograma real e simulado do EVAP

De maneira análoga, a Figura 15 mostra uma comparação entre o esquema simulado e real do DCA.

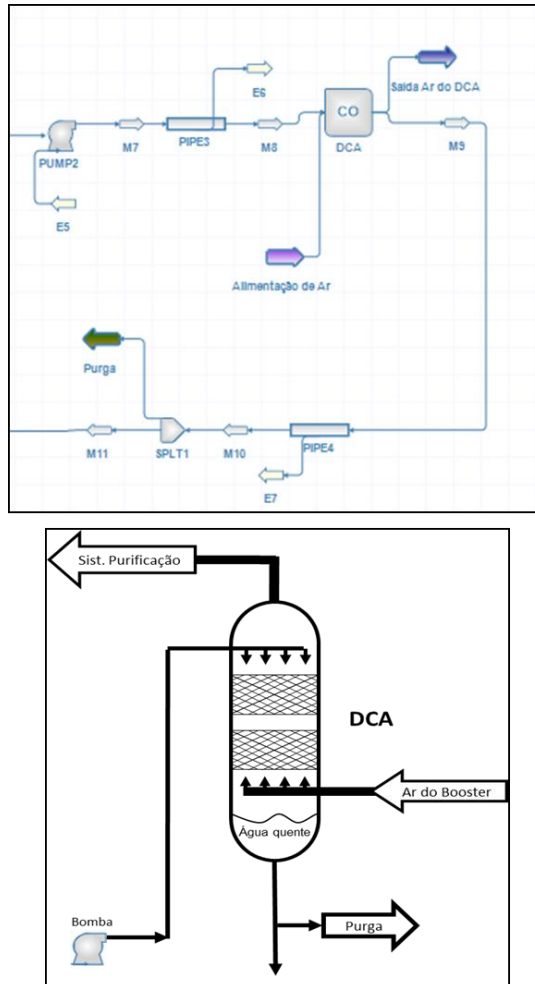


FIGURA 15: Comparação de Fluxograma real e simulado do DCA

Nas Figuras 13, 14 e 15 os componentes designados como “CO” representam uma operação unitária que é processada externamente ao DWSIM, no caso deste trabalho operação unitária é da CAPE-OPEN (“CO”) e o simulador que as processa é o ChemSep.

3.3.2 Modelagem do EVAP e do DCA no ChemSep

Foram tomados 13 conjuntos de dados aleatórios (Apêndice B – B.2: Tabela 6), que representa todo do sistema DCA-EVAP, e aplicado o conceito da validação cruzada. 11 (onze) conjuntos de dados foram reservados para fins de validação e dois (02) conjuntos de dados, diferentes daqueles tomados para fins de validação, foram utilizados para a determinação do número de estágios e dos parâmetros de interação binária.

O DCA foi simulado como uma coluna de destilação simples com 7 estágios. A utilização de uma coluna de destilação para representar o DCA não significa que o fenômeno que ocorre no DCA é um processo de destilação. O nome dado à coluna é irrelevante para o simulador em questão uma vez que o princípio de modelagem subjacente é o de estágio de equilíbrio. Deve-se entender cada estágio no simulador como uma unidade de processamento de cálculos baseado no modelo de estágio de equilíbrio; e a resposta dependerá das espécies químicas envolvidas, suas propriedades termodinâmicas e modelos de cálculo escolhidos.

Uma vez que o simulador possui limitação de não ser possível especificar o recheio interno, a definição da quantidade de estágios os parâmetros de interação binária foram manipulados com o objetivo de ajustar a resposta do simulador à realidade do sistema. Essa manipulação começa variando o número de estágios até a resposta da simulação se aproximar dos dados reais e depois se manipula os parâmetros de interação binária do modelo de cálculo do coeficiente de atividade e da entalpia para fazer um ajuste fino no resultado. Na Figura 16 está tela de configuração dos modelos termodinâmicos para os cálculos das propriedades no DCA.

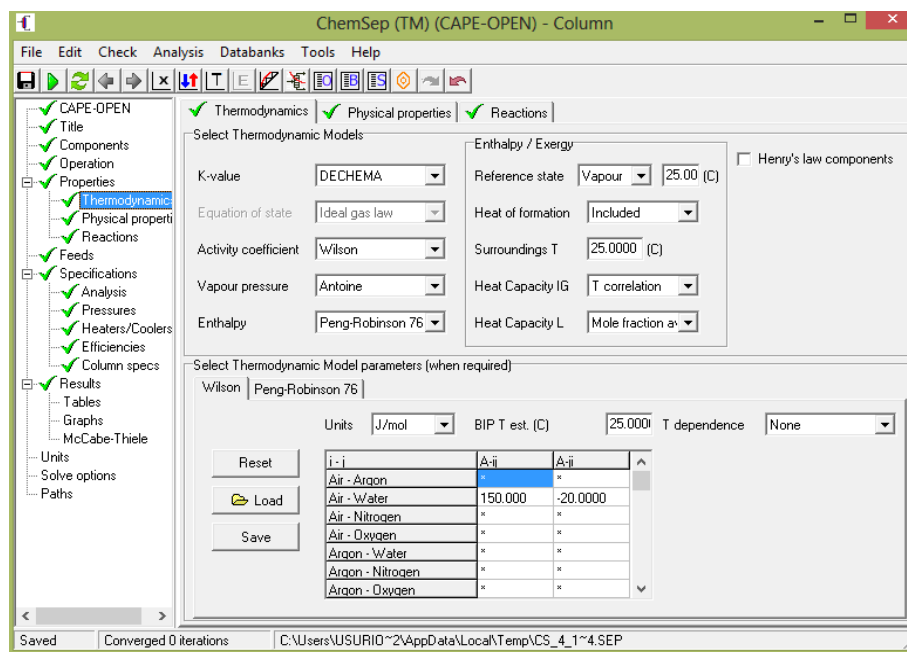


FIGURA 16: Tela de Configuração dos modelos termodinâmicos para o cálculo das propriedades do DCA no ChemSep

De maneira análoga, o EVAP foi modelado como uma coluna de destilação simples de 10 estágios. Tanto o DCA como o EVAP possui recheio interno de anéis de polipropileno (pall rings) e a definição do número de estágios do EVAP considerou a proporção do volume interno de recheio. Na Figura 17 está a tela de configuração da operação do EVAP.

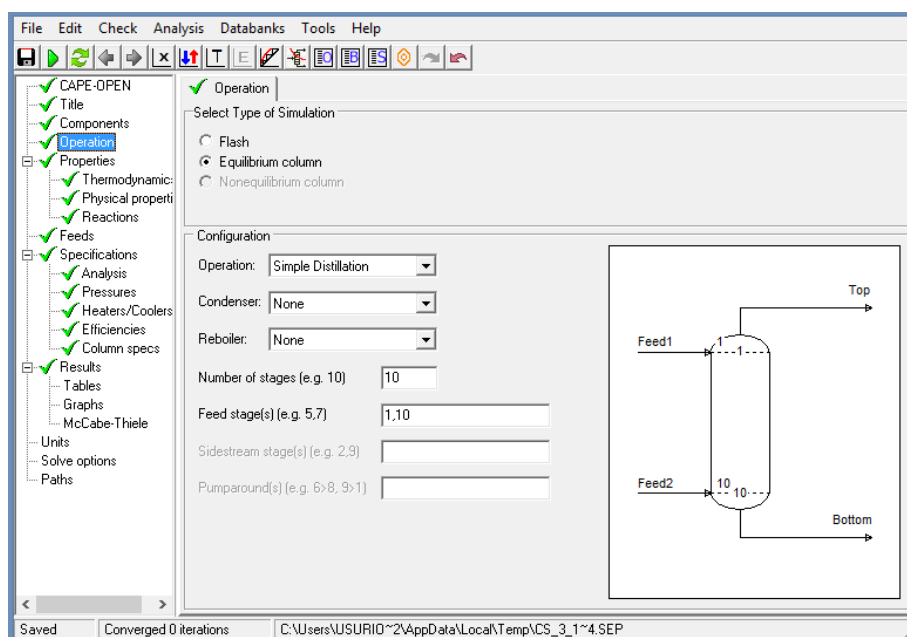


FIGURA 17: Tela de Configuração da Operação do EVAP no ChemSep

No Apêndice B (B.3 e B.4) são apresentados o resultado do cálculo do EVAP (Tabela 7) e do DCA (Tabela 8) no simulador ChemSep, mostrando propriedades de entrada e saída dos fluxos das colunas.

As configurações para cálculo das propriedades termodinâmicas foram as seguintes:

- DCA: Equação de Wilson: $A_{ij} = 150$ e $B_{ji} = -20$ e Peng-Robinson76: $Ar/H_2O = -6,33$; $N_2/H_2O = -80$;
- EVAP: Equação de Peng-Robinson76: $N_2/H_2O = 4,5$;

3.3.3 Simplificações do modelo

Tanto o DCA como o EVAP é isolado termicamente com espuma de poliuretano revestida com folha de alumínio. A troca de calor considerando apenas o poliuretano, 20°C de ΔT , temperatura da parede interna e externa igual à de processo e ambiente, respectivamente, resultou em apenas 560 W no EVAP. Isto pode ser considerado desprezível, uma vez que a simulação gerou uma variação na temperatura de saída da água do EVAP de 0,04% ao considerar tal troca de calor. Devido à pequena influencia da troca de calor com o ambiente nos resultados finais e ao fato de simulador ChemSep não dispor de ferramentas para modelar essa troca, a mesma foi desprezada no DCA e EVAP. Foi utilizado o valor fixo de 560 W de troca de calor com o meio ambiente.

A modelagem usando o conceito de estágio de equilíbrio não permite lidar com fenômenos como arraste ou gotejamento nas colunas. Caso se deseje estudar ou contemplar tais fenômenos nos modelos se deve recorrer à modelagem de colunas em não-equilíbrio.

As tubulações de N_2 waste e água também são isoladas termicamente com espuma de poliuretano revestida com folha de alumínio e foram modeladas no DWSIM. Este simulador possui ferramentas apropriadas e, portanto, foi feita a definição do perfil térmico para estimar a troca de calor. Na Figura 18 está a tela de ajuste do perfil térmico.

Editar perfil térmico da tubulação

☐ Definir o coeficiente global de transferência de calor

Coef. global de transferência de calor W/[m².K] Temp. amb. C

☐ Definir a quantidade de calor trocado

Calor trocado kW

☒ Estimar o coeficiente global de transferência de calor

Temperatura ambiente C

☒ Incluir paredes da tubulação

☒ Incluir coeficiente de transferência interno

☒ Incluir isolamento

Material

Condução térmica e espessura W/[m.K] m

☒ Incluir coeficiente de transferência externo

Meio ambiente

Velocidade [ou profundidade] m/s [m]

FIGURA 18: Tela de Configuração do perfil térmico do PIPE2

Outras simplificações foram comentadas na secção 3.1.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os resultados do trabalho: o modelo, a validação estatística feita para atestar a validade do modelo e será apresentada a carta gráfica do sistema DCA-EVAP.

4.1 Os Resultados do Modelo

Foram realizadas simulações com 11 (onze) conjuntos de dados de entrada e feita comparação entre a saída real do processo e a saída da simulação, cujo resultado gráfico pode ser visto na Figura 19 e a tabela de dados pode ser verificada no Apêndice B (B.1: Tabela 5).

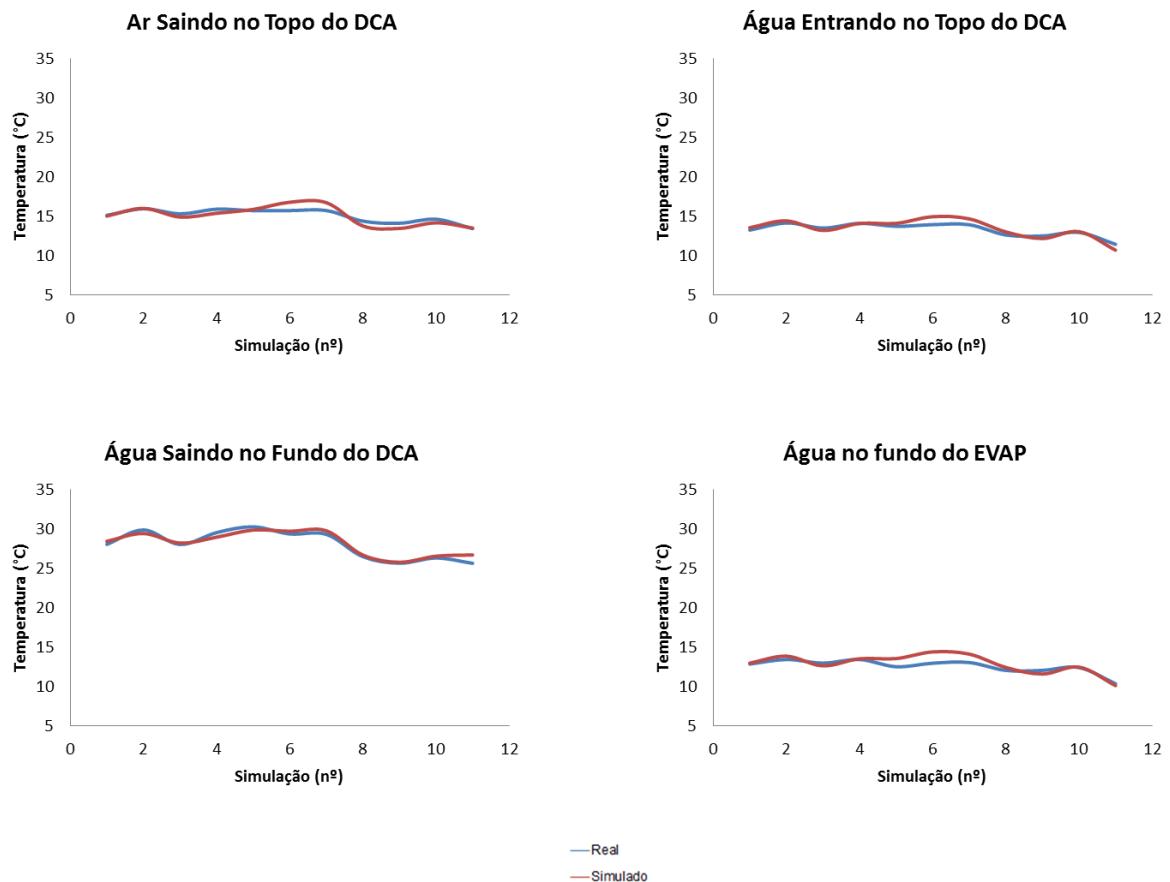


FIGURA 19: Comparação entre valores reais e simulados dos principais pontos do sistema DCA-EVAP

Nota-se boa concordância entre os valores reais e simulados para os pontos principais de saída da simulação. Como a variável de interesse é a temperatura de saída do DCA (T_{DCA}), a validação estatística irá focá-la.

4.2 Resultado da Validação Estatística

Para fins de validação, foram tomados os onze (11) conjuntos de dados de entrada aleatórios para realizar simulações, porém o período (dia e horário) no qual foram selecionados foi escolhido de maneira a captar grandes variações nas principais variáveis de entrada. Assim, foram tomados dados de um dia com temperatura ambiente muito quente, outro com temperatura amena e outro muito frio; a vazão de N_2 waste no máximo e no mínimo, temperatura e vazão de ar para o DCA em dois extremos e também com valor intermediário, etc. Esta estratégia buscou testar a capacidade do modelo para prever as diferentes condições operacionais da planta de fracionamento de ar.

A variável de interesse é a temperatura de saída do ar do DCA (T_{DCA}), portanto os resultados das simulações para essa variável foram comparados com dados reais de saída do processo para o mesmo conjunto de dados de entrada. Na Tabela 1 estão os valores reais e simulados de T_{DCA} ;

TABELA 1: Comparação dos valores reais e simulados

ID	$T_{DCA} \text{ Real}$	$T_{DCA} \text{ Simulado}$	ΔT
1	15,10	15,01	0,09
2	15,95	15,99	-0,04
3	15,30	14,90	0,40
4	15,88	15,37	0,51
5	15,71	15,86	-0,15
6	15,71	16,77	-1,06
7	15,72	16,72	-1,00
8	14,37	13,76	0,61
9	14,11	13,45	0,66
10	14,62	14,16	0,46
11	13,42	13,50	-0,08
Média			0,04
DesvPad			0,60
Desvio máximo			6,70%
ΔT máximo			1,06°C

Para uma melhor visualização dos resultados foi construído um gráfico de dispersão (Figura 20) dos valores reais e simulados, onde se vê o grau de concordância entre os valores ao ser comparado com a reta de regressão.

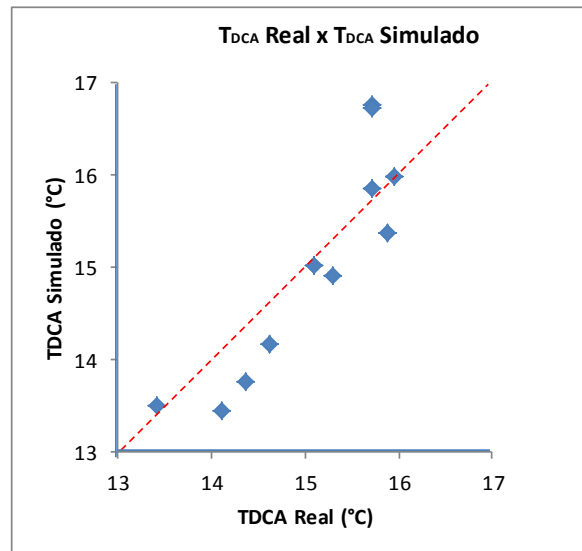


FIGURA 20: Gráfico de regressão linear T_{DCA} Real x T_{DCA} simulado

Para traduzir em número a concordância entre valores reais e simulados foi calculado o Coeficiente de Correlação de Pearson ($R = 0,89$) através do Microsoft Excel, visto no gráfico acima. Esse valor de R indica forte correlação entre os valores, segundo Brito e Alexandre (2009).

Com vistas a avaliar se as diferenças ($I_i = x_i - y_i$) são significativas foi feito do Teste-t de Student Emparelhado tomando os valores da Tabela 1 para um nível de significância de 5%, cujo resultado dado pelo Excel é visto Tabela 2.

TABELA 2: Teste-t: duas amostras em par para médias

	<i>TDCA Real</i>	<i>TDCA Simulado</i>
Média	15,08	15,04
Variância	0,71	1,48
Observações	11	11
Correlação de Pearson	0,89	
Hipótese da diferença de média	0	
gl	10	
Stat t	0,201	
P(T<=t) uni-caudal	0,422	
t crítico uni-caudal	1,812	
P(T<=t) bi-caudal	0,844	
t crítico bi-caudal	2,228	

O valor de **t** encontrado foi de **0,201** (Stat t), que é menor que $t_{\text{critico}} = 2,228$ (bi-caudal) e, portanto, não se pode rejeitar a hipótese nula. Isto não quer dizer que a hipótese nula é verdadeira, apenas que não podemos provar estatisticamente que ela seja falsa. Assim, a diferença da média dos valores simulados e o valor esperado da média das diferenças pode ser de fato zero.

De outro ponto de vista, o valor de **P** bi-caudal (**0,844**) indica que rejeitar a hipótese nula implica em adotarmos um nível de significância de pelo menos 84,4%, cuja interpretação é que haveria 84,4% de probabilidade de rejeitarmos a hipótese nula, sendo ela de fato verdadeira. Como esta probabilidade é muito alta, temos fortes indícios de que na realidade $\bar{I}$ seja zero (e não 0,04, conforme Tabela 1) e, portanto consideraremos o modelo como validado estatisticamente.

A Tabela 3 traz os valores máximo e mínimo utilizados para as variáveis de entrada da simulação dos 11 conjunto de dados. Portanto, podemos afirmar que para esta faixa de valores o modelo de simulação está validado.

TABELA 3: Valores extremos das principais variáveis de entrada da simulação

VARIÁVEL	MIN.	MÁX.
Temperatura ambiente	17,77 °C	30,99 °C
Temperatura N2 waste	15,12 °C	21,00 °C
Temperatura Ar p/ DCA	32,04 °C	36,90 °C
Vazão N2 waste p/ EVAP	36.000 Nm ³ /h	44.000 Nm ³ /h
Vazão Ar p/ DCA	100.500 Nm ³ /h	112.500 Nm ³ /h
Vazão de água	73 m ³ /h	(Sem alteração)
Pressão de Ar p/ DCA	10,53 Kgf/cm ² g	10,79 Kgf/cm ² g
Pressão N2 waste p/ EVAP	1,111 Kgf/cm ² g	1,142 Kgf/cm ² g

4.3 Carta Gráfica do Sistema DCA - EVAP

Com o modelo validado, foram feitas simulações a fim de construir a carta gráfica do sistema DCA-EVAP, onde T_{DCA} é função da vazão de água do sistema e da vazão de N₂ waste para uma dada carga da planta e adotando a hipótese de que o modelo responde adequadamente fora dos limites usados na validação (Tabela 3). Foram feitas simulações para seis vazões diferentes da bomba de água e da vazão de N₂ Waste. A carta gráfica foi construída considerando as variáveis de entrada na simulação conforme Tabela 4. Na Figura 21 está a Carta Gráfica do sistema DCA-EVAP

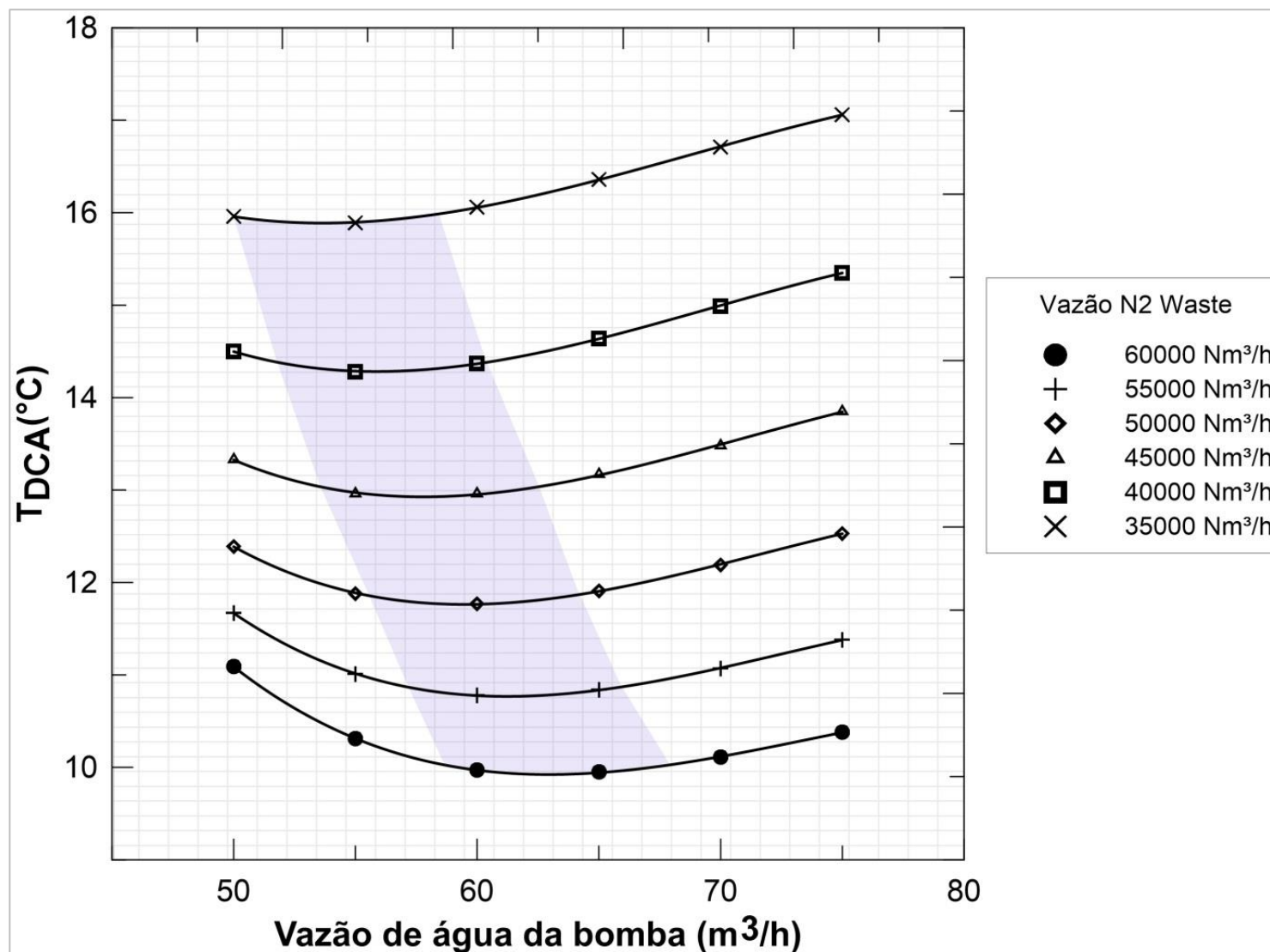


FIGURA 21: Carta gráfica do sistema DCA-EVAP

TABELA 4: Valores das principais variáveis de entrada para confecção da carta gráfica

VARIÁVEL	Valor
Temperatura ambiente	24 °C
Temperatura N ₂ waste	18 °C
Temperatura Ar p/ DCA	35 °C
Vazão Ar p/ DCA	100.500 Nm ³ /h
Pressão de Ar p/ DCA	10,70 Kgf/cm ² g
Pressão N ₂ waste p/ EVAP	1,130 Kgf/cm ² g

O perfil da família de curvas que representa o sistema DCA–EVAP implica na existência de um ponto de mínimo e, portanto, mostra a oportunidade de se buscar um ajuste do sistema de forma a melhorar seu desempenho - reduzir T_{DCA} .

Nota-se que o ponto de mínimo das curvas desloca-se para a direita com o aumento da vazão de N₂ waste (de cima para baixo na Figura 21). Isto indica que, estando operando em um ponto ótimo do sistema, ao aumentar a vazão de N₂ waste deve-se também aumentar a vazão de água da bomba para que o sistema retorne ao ponto de melhor desempenho e vice-versa. A área demarcada na carta gráfica representa a região de melhor desempenho do sistema DCA-EVAP e possui o ponto de mínimo de T_{DCA} no centro e os limites referem-se a 0,1°C de afastamento.

Nota-se uma redução no espaçamento entre curvas de cima para baixo na carta gráfica e isto significa que o aumento da vazão de N₂ Waste não é linear com a T_{DCA} . Isto pode ser confirmado pela Figura 22 onde temos a relação da vazão de N₂ Waste x T_{DCA} para uma vazão de bomba fixa de 75 m³/h.

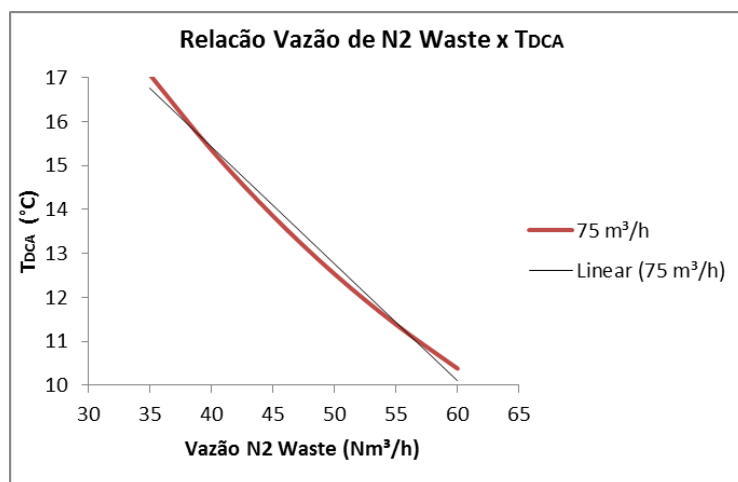


FIGURA 22: Relação Vazão de N₂ Waste x T_{DCA}

Uma forma particular de ver a carta gráfica do DCA-EVAP é plotando a linha de tendência de cada uma das curvas. A inclinação das linhas revela a tendência geral de um aumento da vazão de água em T_{DCA} para cada vazão de N_2 waste.

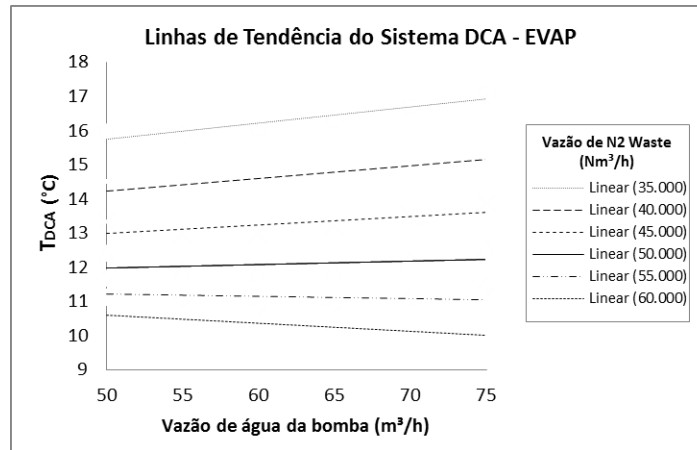


FIGURA 23: Linhas de tendência das curvas do sistema DCA-EVAP

Obviamente, as linhas de tendência da Figura 23 não devem ser referência para um ajuste preciso do sistema. Contudo, é possível correlacionar a inclinação de cada reta com uma tendência de um aumento ou diminuição de T_{DCA} para a faixa vazão de água da bomba de 50 a 75 m^3/h . Assim, um aumento aleatório (sem observar a carta gráfica) da vazão de água da bomba para uma vazão de N_2 waste de 35.000 Nm^3/h tem maior tendência de causar aumento do que redução em T_{DCA} . Já para uma vazão de N_2 waste de 60.000 N^3/h tal aumento aleatório na vazão de água tem maior tendência de reduzir do que aumentar T_{DCA} .

Por fim, ao analisar o ponto de operação atual do sistema nota-se que este está diferente do recomendado pela carta gráfica para reduzir T_{DCA} , como visto na Figura 24.

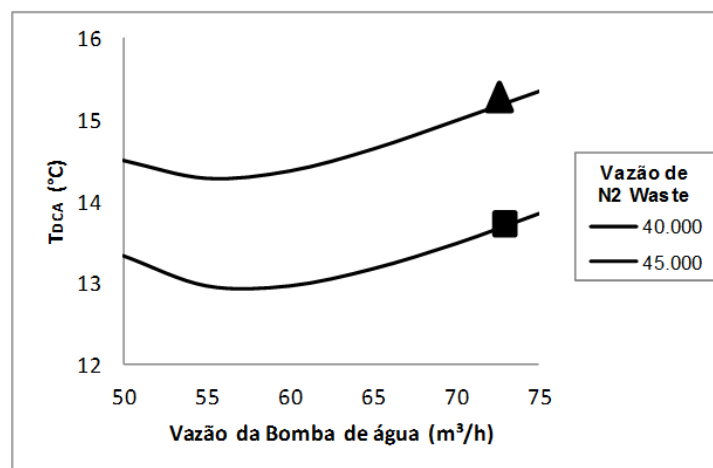


FIGURA 24: Ponto atual de operação do sistema DCA-EVAP

Uma análise do gráfico da Figura 24 mostra que apenas ajustando a vazão de água da bomba pode-se levar a uma redução de temperatura de cerca de **0,90°C**.

Uma simulação independente, ou seja, sem melhoria no ponto de operação, utilizando um conjunto de dados que retrata a situação atual da planta, porém aumentando apenas a vazão de N₂ waste em 9.000 Nm³/h resultou em uma redução de T_{DCA} em **2,72°C**. Há a possibilidade técnica de se ajustar a planta do estudo de caso de forma a aumentar a vazão de N₂ waste em 9.000 Nm³/h, porém seria necessário reduzir a mesma quantidade da vazão de nitrogênio gasoso produzido pela planta. Cabe neste caso um estudo da viabilidade operacional e econômico-financeira desta proposta.

Com o modelo do sistema validado, há diversas possibilidades de estudos sobre o sistema. Os exemplos anteriores mostram a importância da confecção do modelo.

5 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Os resultados obtidos neste trabalho (a carta gráfica e o modelo validado) poderão auxiliar a operação da planta de fracionamento de ar na melhoria operacional do sistema e gerar ganhos de produtividade e de processo, cuja mensuração foge ao escopo deste trabalho.

Os resultados obtidos pelos simuladores de processo DWSIM e ChemSep mostrou a ótima capacidade atual dos programas de código aberto para resolver problemas de engenharia, quer para fins didáticos ou para pesquisas individuais, mesmo com menos recursos disponíveis e maior tempo de cálculo.

Face às limitações de instrumentação, de disponibilidade de dados e de confecção modelo apresentadas, não é recomendável utilizar as cartas gráficas para prever valores exatos de operação do sistema. Devem ser utilizadas apenas como referência para o comportamento geral do sistema, e para mostrar a direção para a qual as manobras operacionais devem se direcionar.

Sugere-se para trabalhos futuros a avaliação técnico-econômica dos impactos para a planta de fracionamento das possíveis melhorias identificadas no sistema DCA-EVAP.

Para aumentar a confiabilidade dos resultados obtidos e permitir a utilização do modelo como uma ferramenta de predição de valores de operação, sugere-se para futuros trabalhos a realização de estudo de propagação das incertezas de medição. Para aumentar a disponibilidade de dados sobre o sistema DCA-EVAP, com vistas a embasar decisões operacionais e propostas de melhorias, sugere-se a realização de uma análise de sensibilidade das principais variáveis de entrada do sistema, cujo resultado demonstrará o efeito de cada ajuste de processo no resultado final de T_{DCA} e revelará as variáveis que causam maior impacto.

O estudo de caso em questão mostra a necessidade de os engenheiros desenvolverem habilidade em lidar com simuladores de processo, uma vez que em muitas aplicações da indústria uma abordagem analítica e matemática são contraproducentes. Apesar da falta de referência bibliográfica específica sobre um dado sistema e da necessidade de utilizar várias hipóteses simplificadoras no modelo, ainda assim é possível estudar sistemas complexos e obter informações que podem auxiliar na melhoria operacional de diversos processos.

BIBLIOGRAFIA

ADEWALE, Rasheed A.; BERROUK, Abdallah S.; DARA, Satyadileep. **A process simulation study of hydrogen and sulfur production from hydrogen sulfide using the Fe-Cl hybrid process.** Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers 000 (2015) 1–8.

ALOBALID, Falah et al. **A comparative study of different dynamic process simulation codes for combined cycle power plants – Part B: Start-up procedure.** Journal Fuel 153 (2015) 707–716.

BERROUK, Abdallah S.; OCHIENG, Richard. **Improved performance of the natural-gas-sweetening Benfield-HiPure process using process simulation.** Journal of Fuel Processing Technology 127 (2014) 20–25.

BEZERRA, Ana Cristina A. M. **Validação de modelos matemáticos para descrever a fluidodinâmica de um Rise a frio utilizando atenuação gama.** Tese de Doutorado. Refice, 2014.

BRITO, Dalson F.F.; ALEXANDRE, José da Silva J. **Desvendando os Mistérios do Coeficiente de Correlação de Pearson (R).** Revista Política Hoje, Vol. 18, n. 1, 2009.

EFRON, B; TIBSHIRANI, R. **Improvements nos Cross-Validation: The .632+ Bootstrap method.** Journal of the American Statistical Association, Vol. 92 nº 438 (Jun., 1997) pp. 548 a 560.

FOUST, Alan S.; CLUMP, Curtis W. **Princípios de Operações unitárias.** 2 ed. LTC 1982.

HINES, Willian W. et al. **Probabilidade e estatística na engenharia.** 4 ed. LTC, Rio de Janeiro, 2006.

KLEIJNEN, Jack P.C. **Verification and validation of simulation models: Theory e Methodology.** European Journal of Operational Research 82 (1995) 145-162.

KLEIJEN, Jack P. C; GROENENDAAL, Willen Van. **Simulation: A statistical perspective**. John Wiley & Sons Ltda, Chichester, 1992.

KLINGER: **Manual de dimensionamento para válvulas de controle**, 2013. Disponível em <http://hiter.pentair.com.br/hiter/_uploads/>. acesso em 20/04/2015.

KOHAVI, Ron. **A Study of Cross Validation and Bootstrap for Accuracy Estimation e Model Selection**. International Join Conference on Artificial Intelligence, 1995.

KOOIJMAN, Harry A.; TAYLOR, Ross. **The ChemSep Book**. 2 ed. 2006. Disponível em <http://www.chemsep.org/>. Acesso em 15/02/2015

MCCABE, Warren L.; SMITH, Julian C.; HARRIOTT, Peter. **Unit Operations of Chemical Engineering**. McGraw-Hill. 5 ed. 1993.

PONTONS, Jack W. **Nonideal Mixtures**. Disponível em:<<http://www.see.ed.ac.uk/~jwp/procalcs/procalcs/mixtures/nonideal/slides/slides2>>. Acesso em 22/05/2015.

REID, R.C.; PRAUSNITZ, J.M.; POLING, B.E. Poling, **The Properties of Gases and Liquids**, 5 ed., McGraw-Hill, New York (2001).

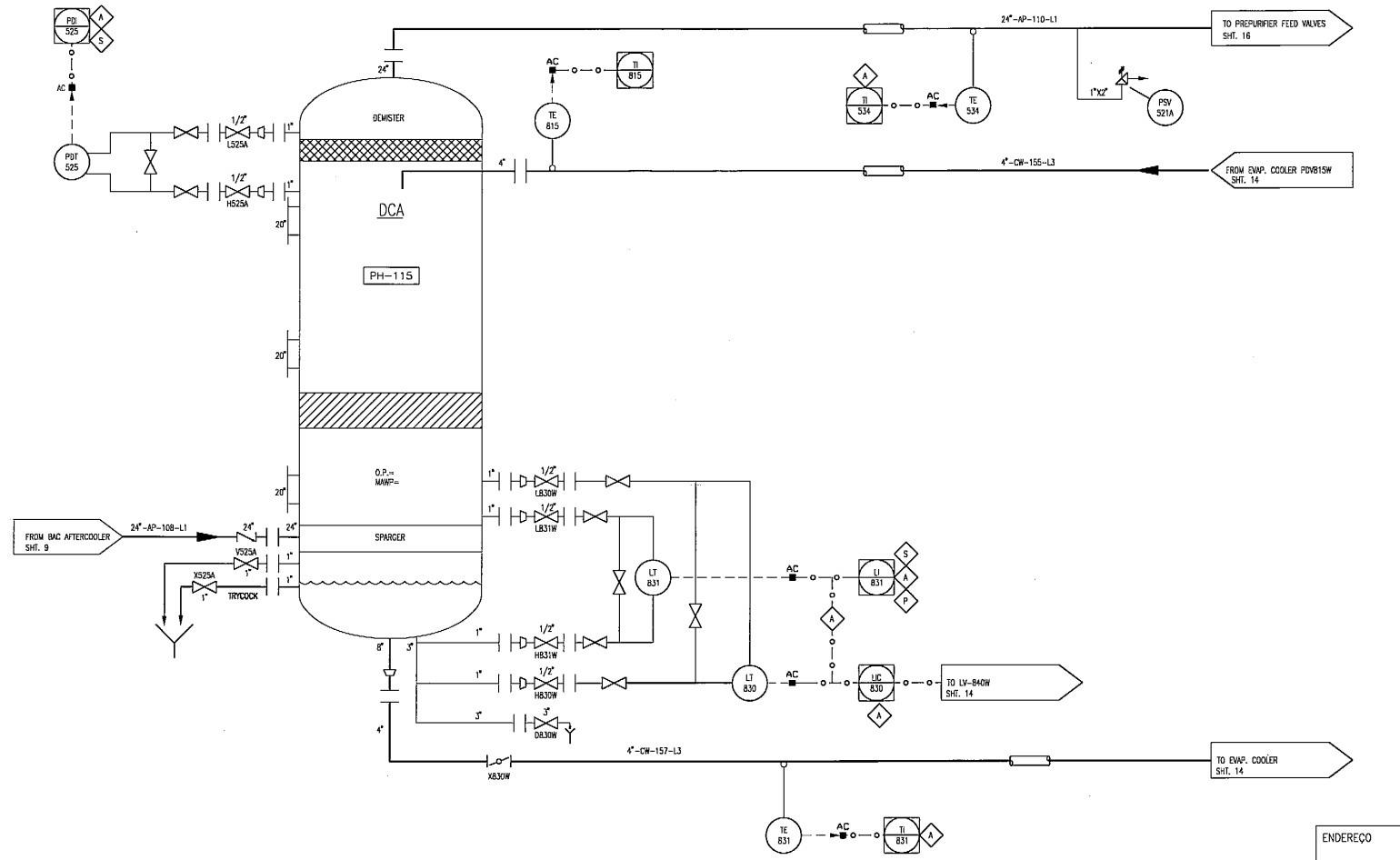
RIBEIRO, Paulo Justiniano Jr. Correlação: <<http://leg.ufpr.br/~paulojus/CE003/ce003/>>. Acesso em 15/06/2015

SIMON, Haykin. **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**. 2 ed. Person Education, Sigapore, 1999.

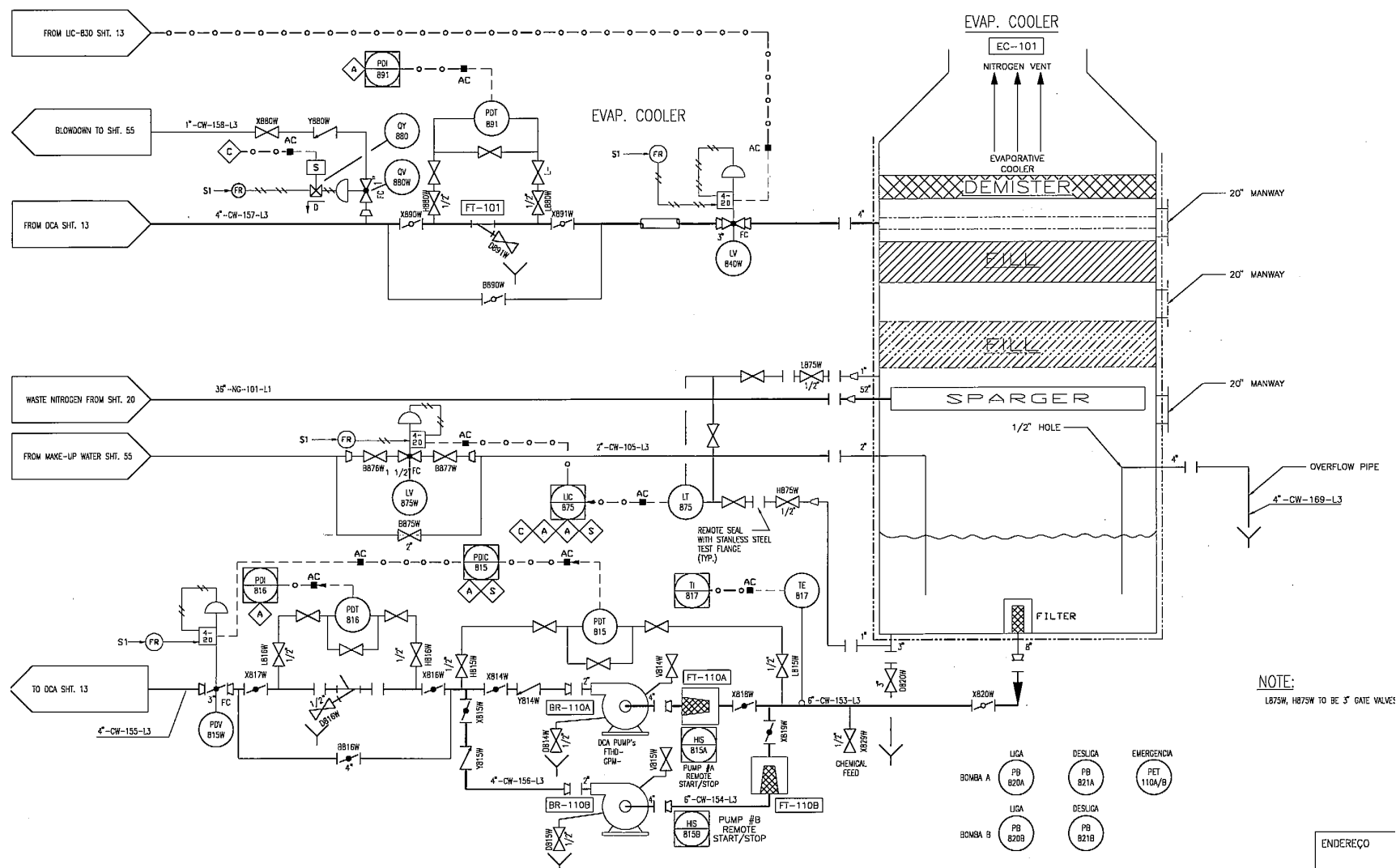
VALDERRAMA, José O.; TOSELLI, Luis A.; FAÚNDEZ, Claudio A. **Advances on modeling and simulation of alcoholic distillation**. Part 2: Process simulation. Journal of food and bioproducts processing 90 (2012) 832–840.

APÊNDICE A – Diagramas de Processo e Instrumentação

A.1. Diagrama de Processo e Instrumentação do DCA



A.2. Diagrama de Processo e Instrumentação do EVAP



APÊNDICE B – Dados de entrada da Simulação e Resultados do Balanço de Massa e Energia no Simulador

B.1. Resultado das Simulações para Fins de Validação Estatística

TABELA 5: Comparação entre os valores reais e simulados para os conjuntos de dados da validação estatística

ID	Temperatura do ar na saída do DCA (°C)		ΔT	Temperatura da água na entrada do DCA (°C)		ΔT	Temperatura da água no fundo do DCA (°C)		ΔT	Temperatura no fundo EVAP (°C)		ΔT	
	Real	Simulado		Real	Simulado		Real	Simulado		Real	Simulado		
1	15,10	15,01	0,09	13,24	13,54	-0,30	28,02	28,41	-0,39	12,85	12,96	-0,11	
2	15,95	15,99	-0,04	14,14	14,41	-0,27	29,86	29,41	0,45	13,42	13,85	-0,43	
3	15,30	14,90	0,40	13,50	13,19	0,31	28,02	28,19	-0,17	12,97	12,62	0,35	
4	15,88	15,37	0,51	14,09	14,08	0,01	29,51	28,94	0,57	13,42	13,52	-0,10	
5	15,71	15,86	-0,15	13,72	14,09	-0,37	30,25	29,84	0,41	12,51	13,54	-1,03	
6	15,71	16,77	-1,06	13,93	14,94	-1,01	29,35	29,69	-0,34	12,95	14,39	-1,44	
7	15,72	16,72	-1,00	13,92	14,66	-0,74	29,30	29,75	-0,45	13,04	14,11	-1,07	
8	14,37	13,76	0,61	12,62	13,01	-0,39	26,47	26,67	-0,20	12,04	12,42	-0,38	
9	14,11	13,45	0,66	12,49	12,17	0,32	25,63	25,76	-0,13	12,05	11,58	0,47	
10	14,62	14,16	0,46	12,94	13,04	-0,10	26,30	26,53	-0,23	12,41	12,46	-0,05	
11	13,42	13,50	-0,08	11,43	10,69	0,74	25,62	26,68	-1,06	10,35	10,11	0,24	
Média			0,04							-0,14			-0,32
Desvio-Padrão			0,60							0,47			0,62

B.2. Conjuntos Aleatórios de Dados de Entrada da Simulação Utilizados na Validação Estatística e Determinação do n° de Estágio e dos Parâmetros de Interação Binária

TABELA 6: Dados de entrada da simulação

ID	Data /Hora	Temp. ar na ent.do DCA (°C)	Pressão ar na ent. DCA (°C)	Vazão de ar ent. DCA (Kg/s)	Temp. ambiente (°C)	Temp. N ₂ waste ent. EVAP (°C)	Pressão N ₂ waste ent. EVAP (Kgf/cm ²)	Vazão N ₂ waste ent. EVAP (Nm ³ /h)	Vazão N ₂ waste p/ Sist. Purificação (Nm ³ /h)	Vazão N ₂ Produto saída da planta (Nm ³ /h)	Vazão de O ₂ gasoso saída da planta (Nm ³ /h)
1	21/03/2015 01:16	34,73	10,63	38,034	23,91	17,43	0,134	13,552	14.833	25.980	19492
2	21/03/2015 12:34	35,91	10,63	37,699	29,37	18,81	0,130	13,354	14.897	25.761	19297
3	22/03/2015 03:19	34,66	10,65	37,640	25,13	19,39	0,128	14,338	11.969	25.722	19262
4	22/03/2015 11:09	35,72	10,57	37,312	30,99	20,87	0,131	14,150	11.940	25.583	19259
5	18/12/2014 12:34	36,90	10,64	37,339	29,11	21,00	0,127	14,178	11.990	25.511	19086
6	18/12/2014 22:33	36,68	10,73	36,204	25,11	18,32	0,133	12,517	14.848	24.974	18493
7	20/12/2014 02:39	36,67	10,75	36,496	24,67	18,23	0,129	12,750	14.815	24.969	18663
8	02/05/2015 03:48	32,96	10,53	37,853	21,25	16,37	0,142	13,449	14.871	25.845	19387
9	09/05/2015 02:32	32,04	10,67	37,535	20,18	17,00	0,140	14,279	11.961	25.676	19201
10	09/05/2015 23:23	32,56	10,63	37,907	21,97	16,81	0,140	13,465	14.881	25.906	19418
11	15/07/2014 02:51	32,21	10,79	40,521	17,77	15,12	0,111	15,271	14.778	26.480	20876
12	20/12/2014 14:17	37,69	10,60	35,354	30,44	19,82	0,131	12,068	14.843	24.429	18062
13	15/07/2014 01:08	32,28	10,81	40,602	18,05	15,74	0,110	16,510	11.339	26.527	20924

Obs.: Os dados das linhas 1 a 11 foram utilizados para fins de validação e das linhas 12 e 13 foram usados como dados de geração de parâmetros

B.3. Balanço de Massa e Energia e Propriedades dos Fluxos no EVAP

TABELA 7: Folha de Dados do Cálculo do EVAP no ChemSep (conjunto de dados 11)

Stream	Feed1	L.Feed1	Feed2	V.Feed2	Top	Bottom
Stage	1	1	10	10	1	10
Pressure (bar)	10,3022	1,04951	1,12147	1,08951	1,04951	1,08951
Vapour fraction (-)	0	0	1	1	1	0
Temperature (C)	25,69	25,8846	15,1198	15,1108	22,7717	9,32809
Enthalpy (J/kmol)	-287400000		-297021		-9735000	-2,9E+08
Entropy (J/kmol/K)	65774,9		189649		192270	61777,1
Total molar flow (kmol/s)	1,08682	1,08682	0,54512	0,54512	0,566228	1,06571
Total mass flow (kg/s)	19,579	19,579	15,271	15,271	15,6358	19,2142
Mole flows (kmol/s)						
Air	0	0	0	0	0	0
Water	1,08682	1,08682	0	0	0,022648	1,06417
Nitrogen	0	0	0,54512	0,54512	0,54358	0,001541
Mass flows (kg/s)						
Air	0	0	0	0	0	0
Water	19,579	19,579	0	0	0,408003	19,171
Nitrogen	0	0	15,271	15,271	15,2278	0,043159
Vapour:						
Mole weight (kg/kmol)			28,014	28,014	27,6141	
Density (kg/m3)			1,31168	1,27431	1,17683	
Std.density (kg/m3)			1,1825	1,1825	1,16562	
Viscosity (N/m2.s)			1,74E-05	1,74E-05	1,76E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)			29124,6	29124,6	29308,6	
Thermal cond. (J/s/m/K)			0,024772	0,02477	0,025032	
Liquid:						
Mole weight (kg/kmol)	18,015	18,015				18,0295
Density (kg/m3)	1006,72	1006,54				1018,05
Std.density (kg/m3)	996,988	996,988				996,456
Viscosity (N/m2.s)	0,00088325	0,000879				0,001325
Heat capacity (J/kmol/K)	75542,2	75542,3				75472,4
Thermal cond. (J/s/m/K)	0,611277	0,611566				0,572439
Surface tension (N/m)	0,0719553	0,071924				0,074429

B.4. Balanço de Massa e Energia e Propriedades dos Fluxos no DCA

TABELA 8: Folha de dados do cálculo do DCA no ChemSep (conjunto de dados 11)

Stream	Feed1	L.Feed1	Feed2	V.Feed2	L.Feed2	Top	Bottom
Stage	1	1	7	7	7	1	7
Pressure (bar)	12,8086	11,362	11,597	11,562	11,562	11,362	11,562
Vapour fraction (-)	0	0	0,999325	1	0	1	0
Temperature (C)	10,6891	10,7575	32,21	32,1921	32,1921	13,5009	26,6818
Enthalpy (J/kmol)	-2,6E+08		-1130000			-801322	-2,6E+08
Entropy (J/kmol/K)	114108		297283			177646	117224
Total molar flow (kmol/s)	1,12489	1,12489	1,40184	1,40091	0,000933	1,37897	1,14776
Total mass flow (kg/s)	20,2804	20,2804	40,521	40,504	0,016969	39,9119	20,8894
Mole flows (kmol/s)							
Air	0	0	1,39487	1,39485	1,51E-05	1,37545	0,019421
Water	1,12335	1,12335	0,006973	0,006055	0,000918	0,001986	1,12834
Nitrogen	0,001541	0,001541	0	0	0	0,001541	5,31E-18
Mass flows (kg/s)							
Air	0	0	40,3954	40,3949	0,000437	39,833	0,562418
Water	20,2372	20,2372	0,125615	0,109083	0,016532	0,035781	20,327
Nitrogen	0,043159	0,043159	0	0	0	0,043159	1,49E-16
Vapour:							
Mole weight (kg/kmol)			28,9128	28,9127		28,9432	
Density (kg/m3)			13,2072	13,1682		13,7987	
Std.density (kg/m3)			1,22044	1,22044		1,22172	
Viscosity (N/m2.s)			1,88E-05	1,88E-05		1,79E-05	
Heat capacity (J/kmol/K)			29038,5	29038,5		28982,9	
Thermal cond. (J/s/m/K)			0,026625	0,026622		0,025304	
Liquid:							
Mole weight (kg/kmol)	18,0287	18,0287	18,1926		18,1921		18,2002
Density (kg/m3)	1017,13	1017,07	991,905		991,947		995,831
Std.density (kg/m3)	996,484	996,484	993,533		993,543		993,387
Viscosity (N/m2.s)	0,001277	0,001274	0,000695		0,000695		0,000779
Heat capacity (J/kmol/K)	75476	75476	74790,1		74792,2		74755,1
Thermal cond. (J/s/m/K)	0,575119	0,575195	0,600155		0,600154		0,5922
Surface tension (N/m)	0,074221	0,07421	0,069764		0,06977		0,070583

B.5. Balanço de Massa e Energia e Propriedades das Correntes no Fluxograma Completo no DWSIM

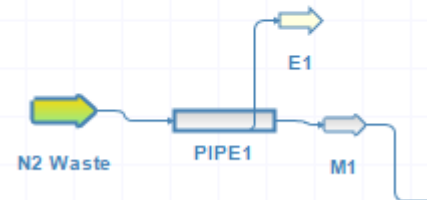
TABELA 9: Folha de dados do fluxograma completo no DWSIM (conjunto de dados 11)

Propriedade	M1	M2	M3	Água Retorno do DCA'	N2 Waste úmido	Reposiçã o de água	N2 Waste	M4	M5	M6	M7	M8	Alimentaça ão de Ar	Saída Ar do DCA	M9	M10	M11	M12	Purga	Água Retorno do DCA
Temperatura (C)	15,11983	9,32809	10,10954	25,69	22,7717	17,77	15,12	10,44838	10,14398	10,14399	10,6891	10,68914	32,21	13,50084	26,68183	26,68182	26,68278	26,69065	26,68278	26,69065
Pressão (kgf/cm2g)	0,11033	0,07775	0,07775	9,47	0,03697	2,5	0,111	0,27282	0,27282	0,21449	13,66152	12,02528	10,79	10,55047	10,75436	9,88908	9,88908	9,46675	9,88908	9,46675
Vazão Volumétrica (m3/h)	41912,52	91,99804	95,67885	66,00586	46897,33	3,56676	41887,94	91,46337	91,4132	92,54948	69,46388	69,73268	10973,22	10321,54	218,6216	230,6218	216,1598	222,3299	14,46258	222,4207
Massa Específica da Mistura (kg/m3)	1,31168	751,8743	763,0661	1067,851	1,20026	1076,137	1,31244	798,2352	798,6733	788,8675	1051,039	1046,988	13,29378	13,92068	343,9825	326,0838	326,0829	317,0334	326,0829	316,9053
Entalpia Específica da Mistura (kJ/kg)	-10,60246	-2604,767	-2601,399	-2533,092	-32,45681	-2569,434	-10,60248	-2599,854	-2601,227	-2601,232	-2597,497	-2597,653	4,0351	-14,99045	-2460,352	-2460,415	-2460,411	-2460,407	-2460,411	-2460,407
Entropia Específica da Mistura (kJ/(kg.K))	-0,06605	-7,06925	-7,05724	-6,82439	-0,05409	-6,94486	-0,06623	-7,0519	-7,05673	-7,05672	-7,04938	-7,04925	-0,67198	-0,73583	-6,64463	-6,64393	-6,64391	-6,64343	-6,64391	-6,57776
Massa Específica da Fase Vapor (kg/m3)	1,31168	1,29955	1,2959	0	1,18623	0	1,31244	1,52199	1,52366	1,4555	17,24936	15,31586	13,29378	13,92068	13,51556	12,51631	12,51627	12,02856	12,51627	12,02547
Entalpia Específica da Fase Vapor (kJ/kg)	-10,60246	-16,64874	-15,83487	0	-2,67669	0	-10,60248	-15,53737	-15,85454	-15,83784	-19,17048	-18,70277	4,0351	-14,99045	-1,58385	-1,3503	-1,34932	-1,22711	-1,34932	-1,2293
Vazão Volumétrica da Fase Vapor (m3/h)	41912,52	28,248	28,34067	0	46896,64	0	41887,94	24,10551	24,07539	25,21096	2,11687	2,38378	10973,22	10321,54	150,0094	162,0089	151,8496	158,0189	10,15979	158,11
Massa Específica da Fase Líquida (Mistura) (kg/m3)	-	1084,752	1083,937	1067,851	950,3442	1076,137	-	1083,582	1083,904	1083,903	1083,553	1083,525	-	-	1066,499	1066,483	1066,482	1066,466	1066,482	1066,467
Entalpia Específica da Fase Líquida (Mistura) (kJ/kg)	0	-2607,739	-2604,212	-2533,092	-2547,119	-2569,434	0	-2602,664	-2604,038	-2604,044	-2600,294	-2600,451	0	0	-2528,482	-2528,564	-2528,559	-2528,564	-2528,559	-2494,438

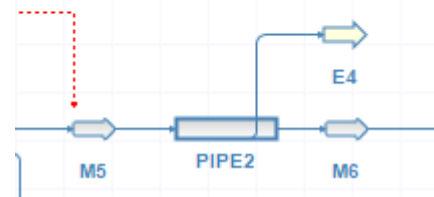
B.6. Dados de Cálculo das Tubulações e Bomba do Sistema DCA-EVAP

Nota: Cálculos para o conjunto de dados 11.

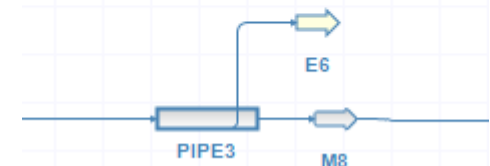
PIPE1		
Queda de Pressão	-0,00067	kgf/cm2
Queda de Temperatura	0,00002	C.
Calor Trocado	0,00034	kW



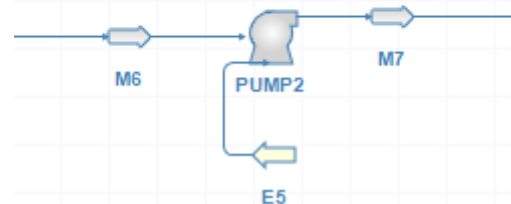
PIPE2		
Queda de Pressão	-0,05747	kgf/cm2
Queda de Temperatura	0,00002	C.
Calor Trocado	0,00096	kW



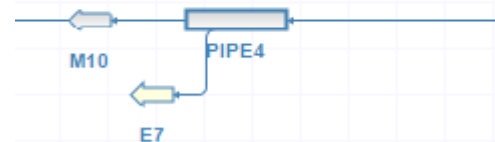
PIPE3		
Queda de Pressão	-1,63495	kgf/cm2
Queda de Temperatura	0,00004	C.
Calor Trocado	0,00274	kW



PUMP2		
Aumento na Pressão (Head)	12,45	kgf/cm2
Eficiência	75,0	
Delta-T	0,52955	C.
Potência Requerida	41,85176	kW



PIPE4		
Queda de Pressão	-0,86534	kgf/cm2
Queda de Temperatura	0,0	C.
Calor Trocado	-0,00019	kW



PIPE5		
Queda de Pressão	-0,42235	kgf/cm2
Queda de Temperatura	0,0	C.
Calor Trocado	-0,0001	kW

