



CONGRESSO BRASILEIRO  
DE ENGENHARIA QUÍMICA EM  
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

21-24 Julho de 2019  
Uberlândia/MG



# DESENVOLVIMENTO DA SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UMA COLUNA DE ABSORÇÃO EM SCILAB PARA SUPORTE AO ENSINO DE ENGENHARIA QUÍMICA

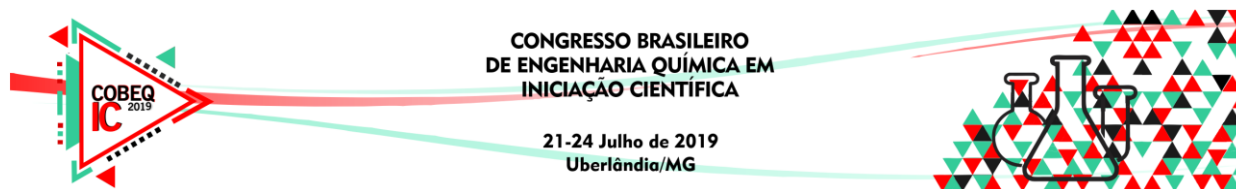
A.F.B. PEREIRA, C.B.B. COSTA

Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Engenharia Química  
E-mail para contato: anaflaviabalisk@gmail.com.br

**RESUMO** – As simulações vêm desempenhando um papel importante, tanto no meio industrial, quanto na academia, seja em atividades de pesquisa ou ensino, uma vez que a análise de processos por meio de simulação permite uma maior compreensão dos mesmos. Por outro lado, os avanços nos programas comerciais de simulação de processos fizeram com que eles se tornassem cada vez mais caros e de mais difícil acesso quando se tem em conta limitações de orçamento. Pensando nisso, esse trabalho busca explorar, particularmente para uma coluna de absorção, o uso do Scilab, ambiente computacional de licença gratuita utilizado para simulação dinâmica de processos. Nesse sentido, o trabalho tem como objetivo principal o incentivo ao uso dessa ferramenta gratuita em uma das atividades fim da universidade, sendo também um suporte aos acadêmicos nas disciplinas de Operações Unitárias e Análise, Simulação e Controle de Processos, facilitando o entendimento do comportamento estacionário e dinâmico dos processos químicos.

## 1. INTRODUÇÃO

Na Engenharia Química, o uso de ambientes computacionais capazes de simular processos é essencial. Uma simulação adequada pode agregar diversos benefícios, aumentando, por exemplo, o conhecimento sobre o processo e sobre o seu comportamento diante diferentes condições. Além de avaliar o estado estacionário dos processos, a simulação permite o estudo da sua dinâmica, diminuindo a necessidade de conduzir testes em plantas físicas. A representação dos processos através de equações matemáticas é conhecida como modelagem de processos. Quanto maior a aproximação da realidade, mais complexos serão os modelos matemáticos encontrados. A simulação de processos utiliza modelos matemáticos com o objetivo de testar diversas possibilidades de configuração e/ou condições operacionais, buscando um processo ótimo ou prevendo o comportamento de sistemas em diferentes condições operacionais. Os modelos matemáticos fenomenológicos são obtidos por meio da aplicação das equações de conservação e de relações constitutivas, levando a equações algébrico-diferenciais, com exceção dos processos modelados por parâmetros concentrados e que operam em estado estacionário, cujos modelos matemáticos são compostos por equações algébricas (BEQUETTE, 2003).



Os modelos de processos químicos desenvolvidos para o estado estacionário têm sido largamente utilizados e aprimorados, durante e após a década de 1980, nos simuladores comerciais. O avanço computacional abriu caminho para o surgimento de soluções de engenharia baseadas em modelos complexos, não restritos a processos estacionários, mas incluindo o uso de simuladores comerciais dinâmicos aplicáveis a níveis industriais, além do desenvolvimento de *softwares* de licença gratuita utilizados para simulação.

O Scilab é um pacote para computação numérica de licença gratuita e *open-source*. Esse *software* utiliza uma linguagem de programação de alto nível para auxiliar na resolução de problemas matemáticos diversos. Possui o recurso para modelagem dinâmica Xcos, um editor gráfico para projetar modelos de sistemas dinâmicos e que permite ao usuário realizar a apresentação da resposta dinâmica do sistema, além de uma interface na qual são dispostos blocos de funções, os quais são interligados entre si conforme a modelagem desejada pelo usuário (SCILAB, 2019; FUJARRA *et al.*, 2019).

Fazendo uso do *software* Scilab, neste trabalho foi realizada a simulação de uma coluna de absorção a fim de analisar os efeitos que possíveis alterações nos dados de entrada da coluna causariam ao seu comportamento dinâmico ou como influenciariam no seu estado estacionário. Além disso, este trabalho também teve como objetivo incentivar o uso dos programas de licença gratuita para fins acadêmicos, de modo que seus resultados possam ser utilizados, por exemplo, em cursos voltados às operações unitárias, aos princípios dos processos químicos, à análise, simulação e controle de processos.

## 2. DESENVOLVIMENTO

Como já foi mencionado, neste trabalho o *software* Scilab foi utilizado para simular uma coluna de absorção sujeita a modificações realizadas pelo usuário. O foco era observar o comportamento desse sistema em malha aberta e sem qualquer ação de controle implementado. O desenvolvimento foi baseado no código em MATLAB constante do Módulo 6 de Bequette (2003). Diferentemente do que consta em Bequette (2003), na implementação desenvolvida, é facultado ao usuário que tipo de variável ou parâmetros ele gostaria de modificar, para que ele possa avaliar o efeito dessa mudança, como descrito a seguir.

No código da simulação é pedido que o usuário forneça os dados de vazão molar de líquido, vazão molar de gás, quantidade molar de líquido retida (*holdup*) em cada estágio, composição da alimentação líquida, composição da alimentação gasosa, número de estágios da coluna e o coeficiente de equilíbrio. Para esses dados, calcula-se qual é a composição da fase líquida em cada estágio para a coluna operando em estado estacionário, o que constitui o vetor **xs**. Feito isso, é proposto ao usuário que modifique algum dos dados fornecidos anteriormente para que ele veja o efeito dessa alteração no comportamento dinâmico da coluna ou a influência no estado estacionário, caso a alteração seja em parâmetro de projeto / sistema. No caso de comportamento dinâmico, o estado inicial é o estado estacionário, ou seja, supõe-se que a coluna esteja operando no estado estacionário e de repente, no tempo zero, alguma coisa é alterada. Isso fará com que as variáveis mudem de valor até que atinjam um novo estado estacionário.

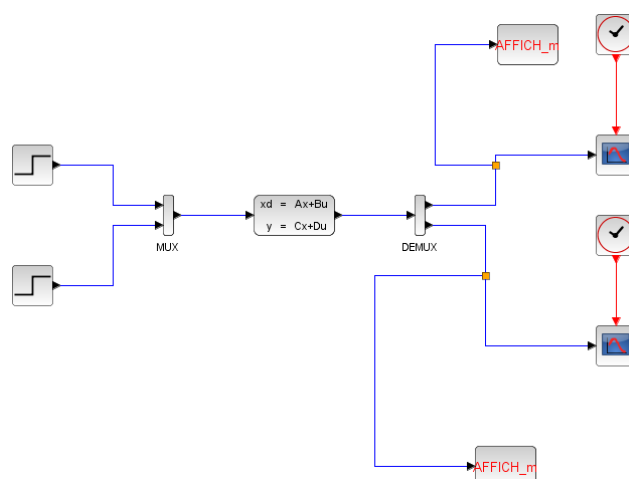
Neste trabalho, por conta do espaço limitado, estão ilustradas graficamente as respostas de alterações realizadas pelo usuário relativas à composição da corrente líquida e à composição da corrente gasosa de entrada a fim de observar graficamente o efeito dessas alterações nas correntes de saída de líquido e de gás. Nesse exemplo, os valores iniciais utilizados para os parâmetros e variáveis foram os mesmos daqueles utilizados no exemplo do Módulo 6 resolvido em Bequette (2003) para uma coluna de 5 estágios, a saber, constante de equilíbrio de 0,5, vazão de líquido de 1,33 kmol/min e de gás de 1,67 kmol/min, *holdup* líquido de 6,67 kmol, líquido de alimentação isento de soluto e gás de alimentação contendo 0,1 kmol soluto/kmol gás. As equações para o modelo podem ser escritas conforme as Equações 1 a 5 e também na forma matricial, como apresentado nas Equações 6 e 7. As saídas de interesse são representadas pelo vetor  $y$  (Equação 8), enquanto a Equação 9 apresenta a relação de equilíbrio.

É importante destacar que as alterações foram feitas individualmente, isso é, as duas variáveis de entrada mencionadas no parágrafo anterior foram perturbadas uma por vez, mantendo a outra constante (sem perturbação), e o sistema era perturbado no tempo  $t = 0$ , estando inicialmente no estado estacionário definido pelos valores de entrada acima descritos.

Foi também simulada alteração, pelo usuário, de número de estágios da coluna e, nesse caso, o código desenvolvido calcula o estado estacionário para essa outra condição de projeto e ilustra os perfis de composição da fase líquida ao longo da coluna tanto com o número de estágios originais quanto com a nova condição de projeto. Nesse sentido, foram comparados quatro casos diferentes sendo estes com 3 estágios, 5 estágios, 7 estágios e 15 estágios.

Além de ter sido codificado no SciNotes (editor), que disponibiliza um espaço onde os arquivos .sci podem ser criados e editados para a execução, esse caso também foi simulado no Xcos, como ilustra a Figura 1.

Figura 1 – Estudo de caso da modelagem dinâmica da coluna de absorção no Xcos.



$$\frac{dx_1}{dt} = -\frac{(L + Va)}{M}x_1 + \frac{Va}{M}x_2 - \frac{L}{M}x_f \quad (1)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{L}{M} x_1 - \frac{(L+Va)}{M} x_2 + \frac{Va}{M} x_3 \quad (2)$$

$$\frac{dx_3}{dt} = \frac{L}{M} x_2 - \frac{(L+Va)}{M} x_3 + \frac{Va}{M} x_4 \quad (3)$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{L}{M} x_3 - \frac{(L+Va)}{M} x_4 + \frac{Va}{M} x_5 \quad (4)$$

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{L}{M} x_4 - \frac{(L+Va)}{M} x_5 + \frac{V}{M} y_6 \quad (5)$$

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \\ \dot{x}_4 \\ \dot{x}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{(L+Va)}{M} & \frac{Va}{M} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{L}{M} & -\frac{(L+Va)}{M} & \frac{Va}{M} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{L}{M} & -\frac{(L+Va)}{M} & \frac{Va}{M} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{L}{M} & -\frac{(L+Va)}{M} & \frac{Va}{M} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{L}{M} & -\frac{(L+Va)}{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{L}{M} & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & \frac{V}{M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_f \\ y_6 \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{Ax} + \mathbf{Bu} \quad (7)$$

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} x_5 \\ y_1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$y_i = a x_i \quad (9)$$

### 3. RESULTADOS

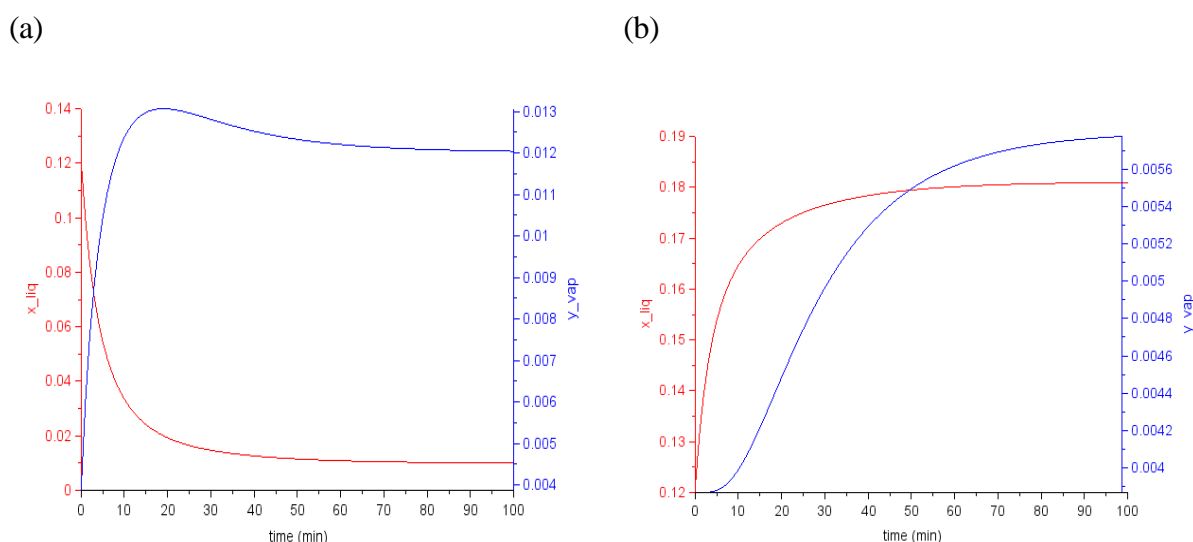
O resultado desse trabalho contempla a análise dos efeitos das modificações realizadas pelo usuário no sistema simulado, conforme descritas no item anterior.

Os gráficos da Figura 2 ilustram o que acontece com a saída de líquido e de gás caso a composição de líquido na entrada da coluna seja alterada de 0,000 para 0,025 (Figura 2 (a)) e caso a composição de gás na entrada seja alterada de 0,10 para 0,15 (Figura 2 (b)).

Ao analisar a Figura 2 (a) percebe-se que o aumento na fração de soluto na corrente líquida de entrada faz com que a composição líquida de saída tenha uma taxa de variação maior nos primeiros minutos e diminua com o passar do tempo, estabilizando-se em um novo estado estacionário (de menor fração do que no estado estacionário anterior), enquanto que a fração de soluto na corrente de saída do gás aumenta dinamicamente, até que se estabiliza em um valor maior do que no estado estacionário anterior. Isso demonstra que, quanto mais pobre em soluto

for a corrente líquida de alimentação, maior será a remoção que ela conseguirá prover de soluto da fase gasosa. Já na Figura 2 (b) percebe-se que, aumentando a fração molar de soluto na corrente de entrada do gás, a fração molar de soluto no líquido na saída se torna cada vez maior, até que se estabiliza a partir de certo tempo (atinge novo estado estacionário). Esses resultados são coerentes com o fato de a operação de absorção estar modelada com suposição de estágios de equilíbrio e ter como força motriz para a transferência de massa do soluto da fase gasosa para a fase líquida o distanciamento do equilíbrio. Assim, se a corrente gasosa entra mais concentrada, maior é a força motriz. Os mesmos resultados podem ser visualizados utilizando o Xcos conforme o fluxograma já apresentado na Figura 1.

Figura 2 - Fração molar de soluto na saída de líquido e de gás quando (a) a composição da corrente líquida de entrada passa de 0,000 para 0,025; (b) a composição de da corrente gasosa na entrada passa de 0,10 para 0,15.



Ao analisar as modificações referentes ao número de estágios da coluna (perfis não ilustrados por falta de espaço), percebe-se que, mesmo aumentando este número de 5 para 7 ou 15 estágios, a corrente líquida sempre entra e sai com uma composição muito parecida nos três casos. A fração de soluto presente no líquido na saída, por exemplo, é igual a 0,1334 para uma coluna de 5 estágios, 0,1375 para uma coluna de 7 estágios e 0,1399 para uma coluna de 15 estágios, ou seja, acrescentar mais do que 5 estágios não faz com que a purificação da mistura gasosa seja mais eficiente. No entanto, ao reduzir o número de estágios de 5 para 3, percebe-se que a corrente de saída líquida apresenta uma menor fração de soluto do que nos casos anteriores, sendo este valor igual a 0,1208. Desse modo, percebe-se que, devido ao equilíbrio, o incremento que se vai ganhando em retirar o componente da fase gasosa para a fase líquida é muito pequeno a partir de um determinado número de estágios, o que demonstra que não há sentido em se projetar uma coluna demasiadamente grande. Ela irá ser mais cara (já que é maior), mas não propiciará uma melhor separação. Sendo assim, também não há sentido em reduzir o número de estágios para menos do que um determinado número, que representa o mínimo de projeto, uma vez que, nessa condição, o líquido ainda é capaz de absorver o soluto.



## 4. CONCLUSÃO

Este trabalho apresentou um estudo de caso dedicado a modelagem dinâmica de uma coluna de absorção em Scilab. O estudo de caso desenvolvido foi bem explorado, de modo que, para cada modificação realizada pelo usuário, gráficos ilustrativos da resposta dinâmica / perfil estacionário são exibidos, permitindo ao usuário a verificação do comportamento desse sistema. Por utilizar um *software* gratuito, o uso de simulação para análise dessa operação em específico independe de recursos para aquisição de programas comerciais e estimula o emprego de ferramentas computacionais nas atividades de ensino.

## 5. AGRADECIMENTOS

As autoras agradecem ao CNPq pelo apoio financeiro.

## 6. NOMENCLATURA

$a$	Constante de equilíbrio
$L$	Vazão molar de líquido
$M$	Quantidade molar de líquido acumulada em cada estágio
$V$	Vazão molar de gás
$x_i$	Fração de soluto em determinado estágio, em relação à quantidade de líquido inerte
$y_i$	Fração de soluto em determinado estágio, em relação à quantidade de gás inerte

## 7. REFERÊNCIAS

BEQUETTE, B. W. **Process Control: Modeling, Design and Simulation**. Prentice Hall International Series in Physical and Chemical Engineering Sciences, 2003.

FUJARRA, A. L. C.; TANNURI, E. A.; BARBOSA, R. S. **Introdução a programação numérica para simulação de sistemas dinâmicos utilizando o programa Scilab/ xcos**. Disponível em< [http://sites.poli.usp.br/d/pme3200/Tutorial\\_scicos.pdf](http://sites.poli.usp.br/d/pme3200/Tutorial_scicos.pdf)>. Acesso em: janeiro, 2019.

SCILAB. **About Scilab**. Disponível em<<https://www.scilab.org/en/scilab/about>>. Acesso em: janeiro, 2019.