



SIMULAÇÃO DE UMA COLUNA DE ESGOTAMENTO PARA REMOÇÃO DE 1,2-DICLOROETANO (1,2-DCE) UTILIZANDO AR ATMOSFÉRICO

Flávio Calheiros Barbosa Filho

Marlysson Marcio Camelo de Araújo

João Inácio Soletti

Sandra Helena Vieira de Carvalho

flaviocalheiros_@hotmail.com

araujommc@gmail.com

jisoletti@gmail.com

sandra.ufal@gmail.com

Universidade Federal de Alagoas, Centro de Tecnologia, Departamento de Engenharia Química

Campus Universitário A. C. Simões, Av. Lourival Melo Mota, s/n, Tabuleiro dos Martins, 57.072-970, Maceió, Alagoas, Brasil

Julio Inacio Holanda Tavares Neto

julio.tavares@braskem.com

Braskem S/A

Av. Maj. Cícero de Góes Monteiro, 2889, Mutange, Maceió, Alagoas, Brasil

Abstract. *Industrialmente, a coluna de esgotamento (stripping) é utilizada na separação de componentes voláteis em solução aquosa, geralmente utilizando o vapor d'água como gás de arraste. A substituição do vapor por ar atmosférico aparece como uma alternativa para redução do custo operacional deste tipo de coluna. Para efeito de aplicação no setor industrial faz-se necessário um estudo para avaliar a tecnologia e seus principais parâmetros. Dessa forma, foi realizado um estudo preliminar, baseado na simulação de uma unidade piloto para remoção de 1,2-dicloroetano (1,2-DCE), composta por uma coluna de air stripping. Foi utilizado o software Aspen Plus® como ambiente de simulação e ferramenta de avaliação das variáveis do processo, através da análise de sensibilidade. O simulador apresentou resultados satisfatórios para diferentes condições de projeto e de*

processo (vazões mássicas, temperatura, dentre outros parâmetros). Portanto, de acordo com a simulação realizada é possível a utilização de uma coluna stripping com ar de arraste em substituição ao uso do vapor

Keywords: *Aspen Plus®; stripping; 1,2-dicloroetano; simuladores;*

1 INTRODUÇÃO

Um composto orgânico com alta pressão de vapor e volatilidade relativa de pelo menos um em relação a água, a temperatura e pressão ambiente, é considerado um composto orgânico volátil (VOC). Entre os principais VOC's, destacam-se os clorados que são primordialmente conhecidos pela sua lipossolubilidade e vasta aplicação, sendo matéria prima para fabricação de diversos produtos como o policloreto de vinila (PVC) e pesticidas. (XIAN et al., 2014; FANG e KHOR, 1989). Apesar disso, fatores como a toxicidade e impactos na poluição atmosférica, tem sido um problema crescente nas últimas décadas (ECSA, 2001). Os VOC's clorados são emitidos, principalmente, nas perdas involuntárias durante processos produtivo, falta de informação no manuseio e estocagem incorreta, somado ao descarte inadequado de resíduos e efluentes industriais, oferecendo riscos em função dos graus de contaminação na água, ar e solo, exigindo uma fiscalização mais severa dos órgãos competentes (NICKOL e PARTNER, 2005).

ALBUQUERQUE (2002) cita diversas tecnologias de tratamento de soluções aquosas como a biofiltração com organismos especificamente desenvolvidos, a oxidação utilizando radiação ultravioleta, a separação por membranas, adsorção em leitos porosos e a remoção em colunas de stripping, onde um gás (ou vapor) estripador, em contracorrente, remove as impurezas da mistura líquida.

A remoção dos VOC's clorados por air stripping é uma das mais apropriadas para esses compostos. O processo de stripping leva em consideração o fenômeno de difusão de determinados compostos em duas fases distintas, onde a propriedade que governa este fenômeno é a solubilidade. É recomendado trabalhar com baixa pressão para diminuir a necessidade de muitos estágios de equilíbrio e minimizar a vazão de gás na coluna. Entretanto, devido ao custo associado à produção do vácuo, as colunas operam com pressões um pouco acima da ambiente. É preciso tomar cuidado também com valores elevados da temperatura, pois além de elevar o custo de operação, pode promover vaporização e reações químicas indesejáveis. (BERANEK, 2001; SEADER, HENLEY e ROPER 2010)

Dessa forma, será estudada uma coluna de air stripping recheada com celas intalox para o tratamento de uma corrente aquosa de 1,2 - dicloroetano. A modelagem e simulação será feita no simulador Aspen Plus® e com auxílio de planilhas no Microsoft Office Excel®.

2 METODOLOGIA

2.1 Excel®

Os cálculos do projeto da unidade de tratamento foram efetuados utilizando métodos analíticos com auxílio do Excel® e da literatura consultada. Os dados de operação utilizados estão disponíveis na Tabela 1.

Tabela 1. Dados de operação utilizados no cálculo da coluna de stripping.

Dados de entrada	Valor	Unidades
Pressão de topo	1.1	kgf/cm ²
Temperatura de topo	30	°C
Vazão de efluente	1.1	m ³ /h
Conc. de entrada DCE	3500	mg/L
Conc. de saída DCE	1.33	mg/L
Massa molecular ar	28.95	g/mol
Densidade do efluente	990.036	kg/m ³
Massa molecular do DCE	98.96	g/mol
Densidade do ar	1.72	kg/m ³
Viscosidade do efluente	0.6711	cps
Tensão superficial do líquido	69.73	dyn/cm
Massa molecular do efluente	18.0675	g/mol

Essa tabela consta de cálculos rápidos que serviram como referência para alimentar o software, uma vez que não foi disponível obter valores referentes a operação real da coluna. Com esses dados, determinou-se a melhor configuração da unidade de tratamento e discriminação das variáveis dos internos das colunas.

2.2 Aspen Plus®

O modelo escolhido foi o NRTL-RK semelhante ao utilizado nos trabalhos de LISBOA (2008) e LÓPEZ (2003). A equação de estado de Redlich-Kwong é adequada para calcular as propriedades termodinâmicas dos sistemas em pressões baixas a moderadas.

O modelo NRTL (*Non Random Two-Liquid*) é aplicável para sistemas multicomponentes vapor-líquido, líquido-líquido e vapor-líquido-líquido com soluções miscíveis ou diluições muito grandes.

A coluna escolhida para representar o dispositivo foi a RadFrac. Utilizando o cálculo pelo equilíbrio de fases é considerado 100% de eficiência entre cada estágio da coluna, o que não acontece na prática. O método Rate-Based, por relacionar a operação de fracionamento com a taxa de transferência de massa, foi então escolhido.

Os coeficientes de transferência de massa e a área interfacial disponível foram calculados por correlações desenvolvidas por ONDA *et al.* (1968).

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

As diversas simulações realizadas forneceram dados para a geração de gráficos comparativos entre as variáveis analisadas, relacionando o perfil molar ou porcentagem de remoção pela altura da seção recheada. A altura de recheio corresponde a distância entre um ponto qualquer da coluna e o ponto de referência, onde a alimentação do líquido (topo da coluna) é o referencial.

3.1 Relação G/L

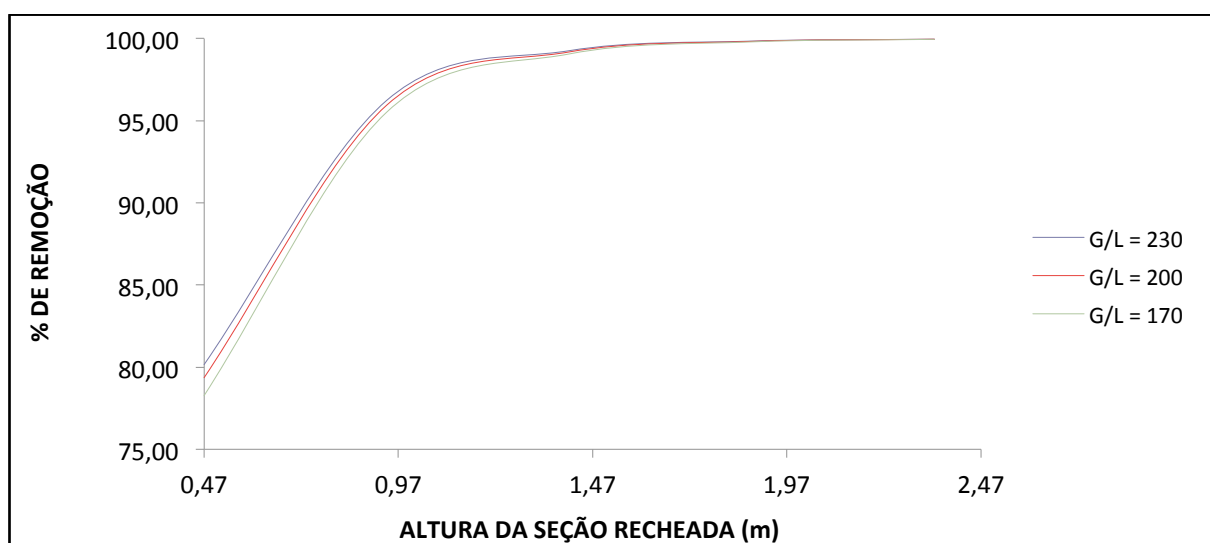


Figura 1. Porcentagem de remoção ao longo da seção recheada com a variação da relação L/G.

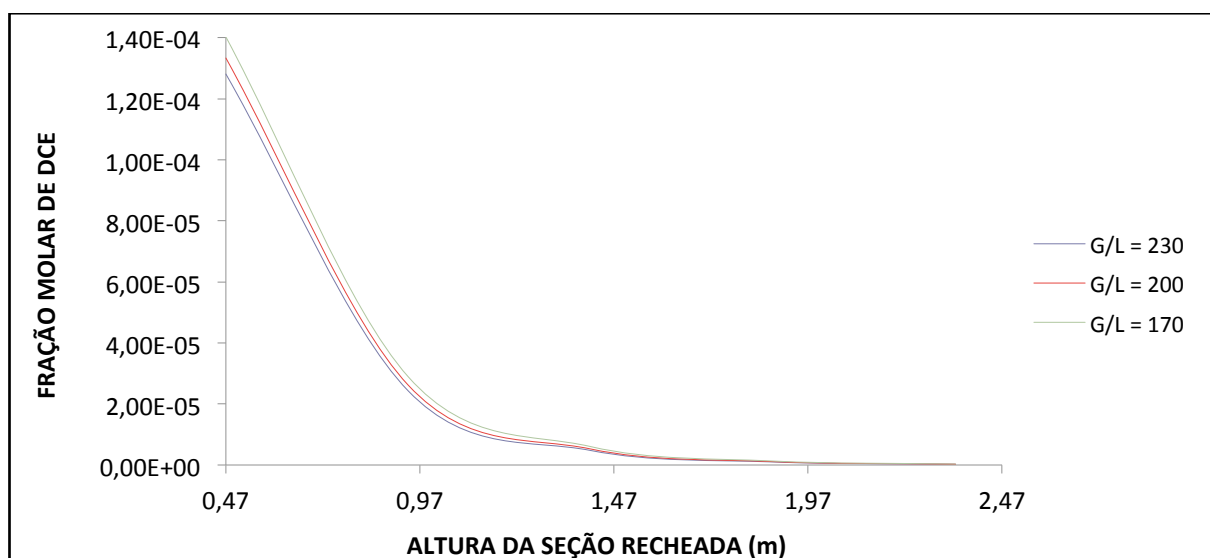


Figura 2. Fração molar de DCE ao longo da seção recheada com a variação da relação G/L.

As relações entre as vazões volumétricas estudadas fornecem perfis diferentes. Um acréscimo na razão G/L aumenta o contato entre as fases e reduz a resistência da fase gasosa, além de melhorar a porcentagem de remoção, uma vez que diminui a pressão parcial e aumenta a solubilidade do DCE na fase gás.

É importante avaliar também que, mesmo com a especificação de separação obtida, as relações são limitados por valores referentes a capacidade de fracionamento da coluna, queda de pressão e ponto de inundação. A relação G/L = 230 apresenta uma perda de carga estimada de 0,26 in.water/ft e capacidade de fracionamento de 0,51 (abaixo de 0,62 - máximo recomendado para projeto), dando uma boa folga em relação ao ponto de inundação.

3.2 Efeito da resistência gasosa

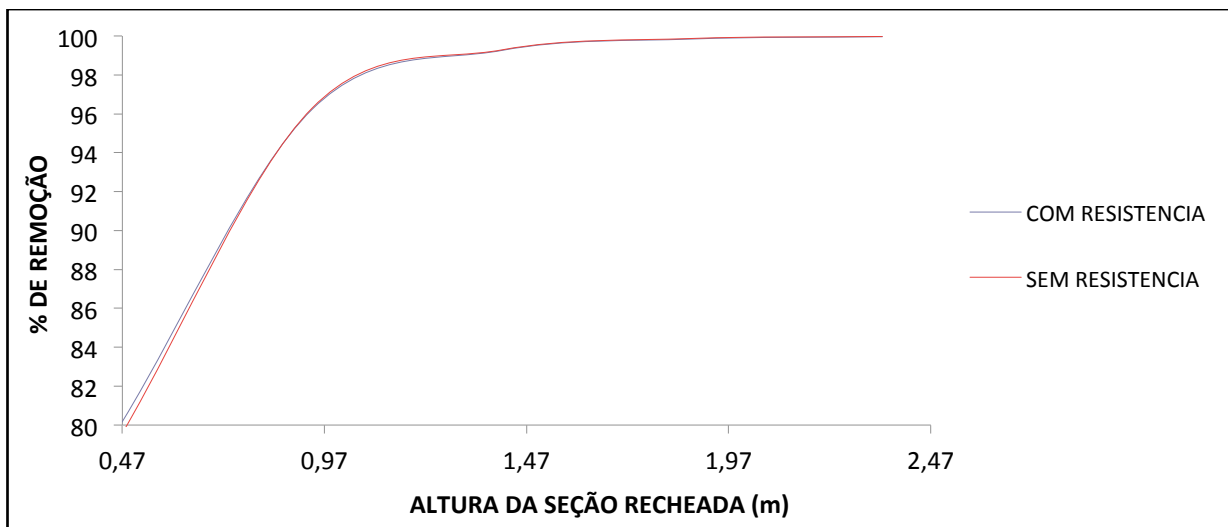


Figura 3. Porcentagem de remoção ao longo da seção recheada com e sem a consideração da resistência na fase gasosa.

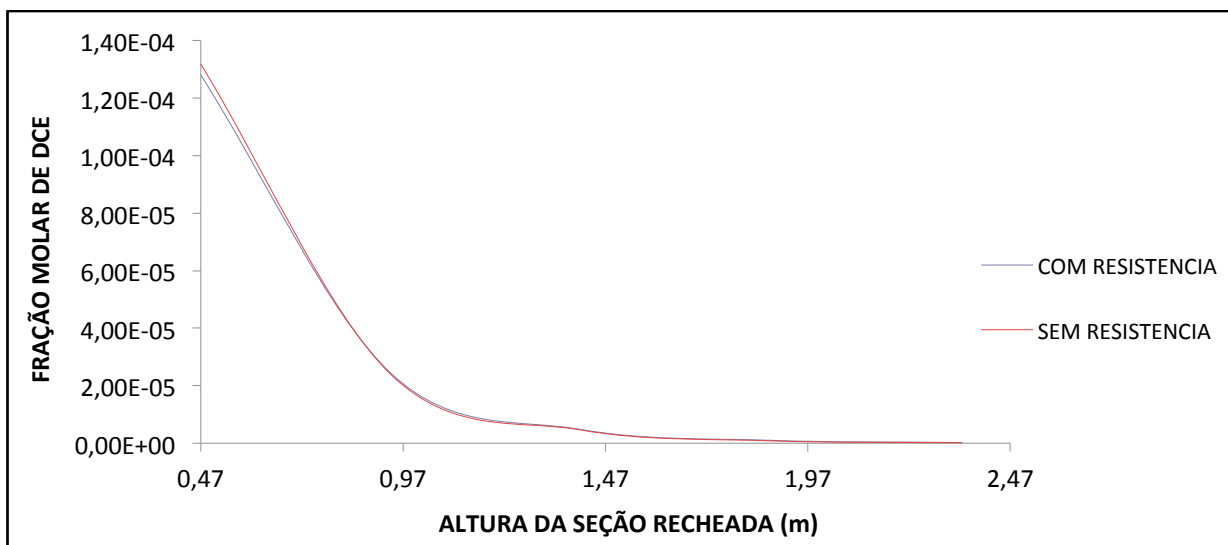


Figura 4. Fração molar de DCE ao longo da seção recheada com e sem a consideração da resistência na fase gasosa.

Os resultados obtidos com a simulação fornecem que a resistência gasosa representa 9,13% da resistência global. Por não ser muito solúvel em água, a resistência gasosa não afeta tanto o valor obtido para a porcentagem de remoção do DCE (existe um pequeno aumento na eficiência de 1,4%).

3.3 Efeito da temperatura

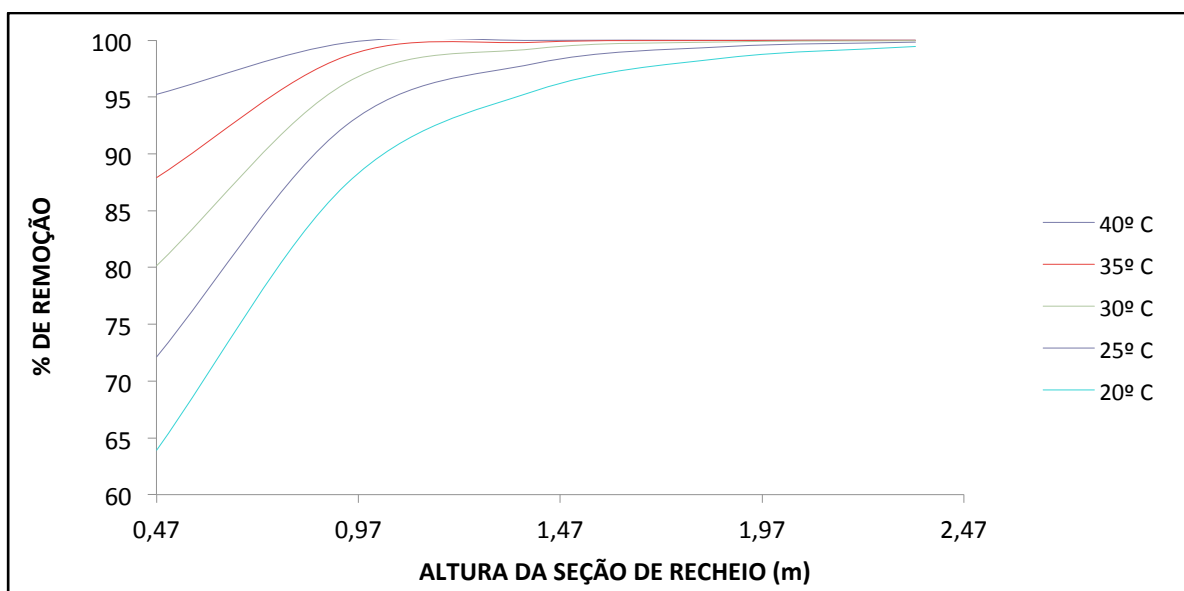


Figura 5. Porcentagem de remoção ao longo da seção recheada com a variação de temperatura.

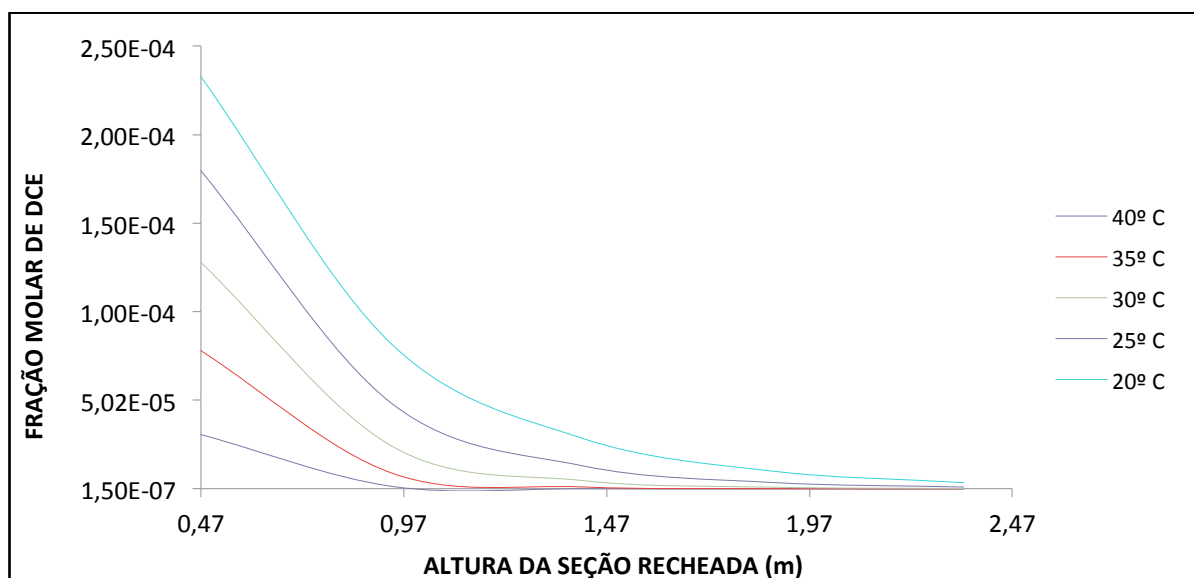


Figura 6. Fração molar de DCE ao longo da seção recheada com a variação de temperatura.

A dependência da separação do DCE em relação a temperatura é examinada nas Fig. 5 e 6. De uma maneira geral, os compostos orgânicos diminuem sua solubilidade em água com o aumento da temperatura. No caso do DCE, esse efeito é bem acentuado, minimizando a altura da seção recheada em 42% para 40° C e 33,5% para 35° C. Entretanto, para promover o aumento da temperatura, faz-se necessário o uso de aquecedores o que implica um aumento no custo de operação.

3.4 Efeito da Pressão

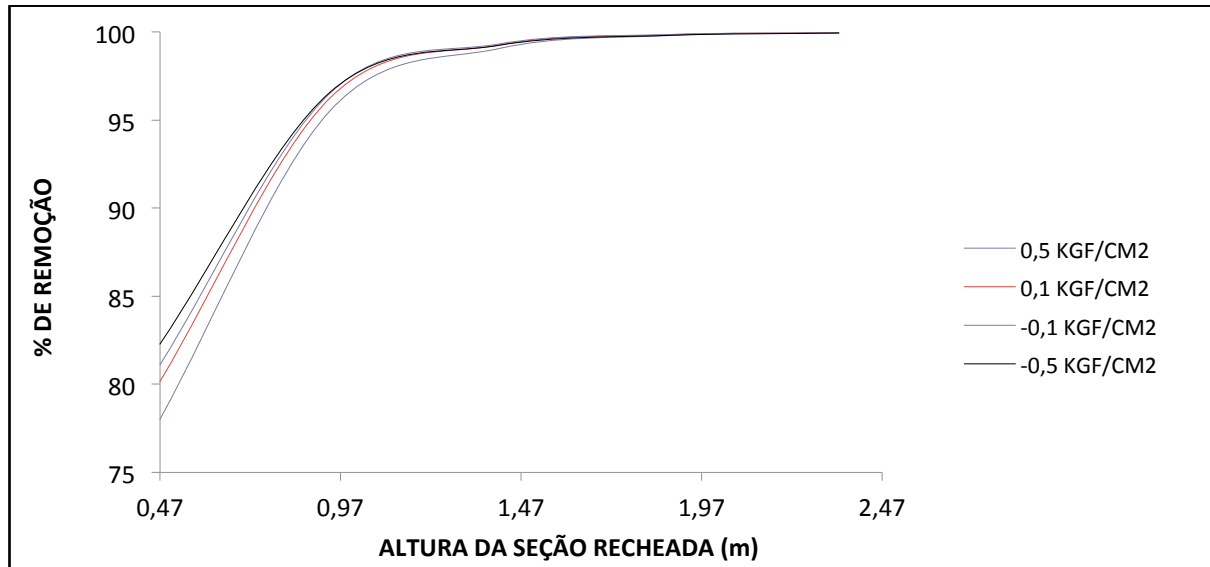


Figura 7. Porcentagem de remoção ao longo da seção recheada com a variação da pressão.

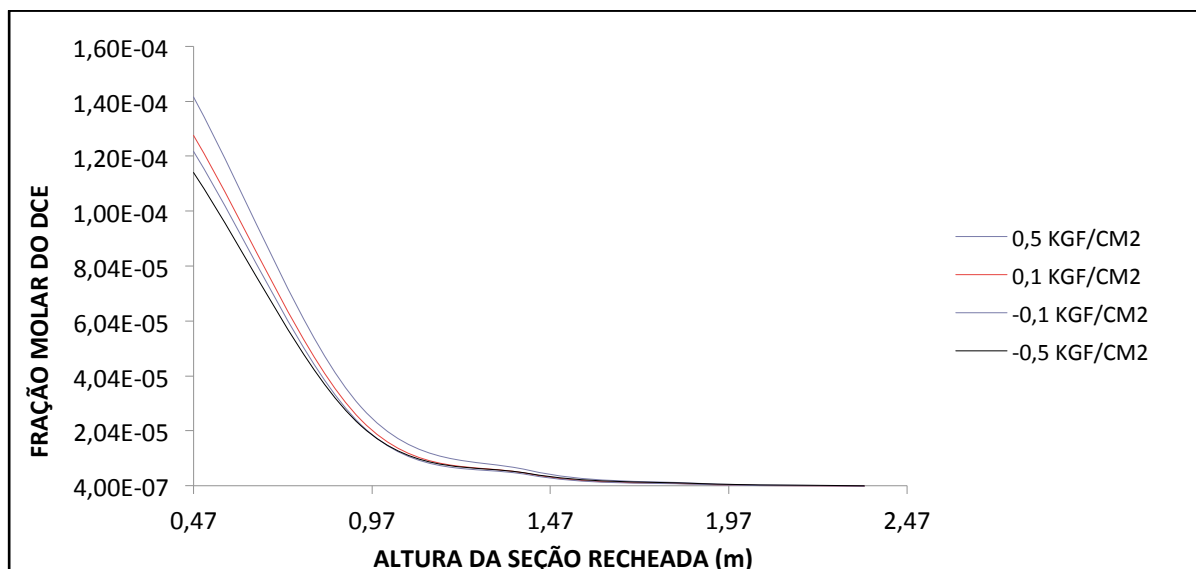


Figura 8. Porcentagem de remoção ao longo da seção recheada com a variação da pressão.

Por se tratar de um processo de transferência de massa, a difusividade é favorecida pela diminuição da pressão, o que influi diretamente nos coeficientes de transferência de massa. Comparando as pressões de operação 0,1 kgf/cm² e -0,1 kgf/cm² temos coeficientes de transferência de massa iguais a 92,52 kmol/hr e 93,43 kmol/hr, respectivamente (um aumento de apenas 1%). Esse aumento corresponde a um acréscimo de 0,15% na eficiência de remoção. Em uma situação real de operação, esses baixos valores não justificam o trabalho em pressões negativas (vácuo), uma vez que operações com vácuo são caras e oferecem certos riscos aos operadores.

4 CONCLUSÃO

A utilização do software *AspenPlus*® como ambiente de simulação e suas ferramentas de avaliação mostraram a influência das principais variáveis no processo de separação por *air stripping* de uma solução de DCE em meio aquoso. São destacados abaixo as principais conclusões a partir dos estudos efetuados.

- As relações entre as vazões de ar e a solução aquosa apresentam uma influência na separação dos componentes, principalmente por afetarem o contato entre as fases e a resistência na fase gasosa, mas deve ser limitada pelas condições de inundação da coluna.
- A resistência gasosa não oferece uma resistência predominante na separação efetuada. As simulações que estudaram sua influencia mostraram uma variação na eficiência de separação pouco significativa (1,4%).
- A utilização de uma pressão de operação de 0,1 kgf/cm² e temperatura de 30° C apresentou uma eficiência de separação um pouco abaixo das mostradas nas aplicações de vácuos e pré-aquecimento, mas fatores como custo e segurança operacional limitaram sua aplicação.

Em função disso, estudos de custo/benefício estão sendo realizados de forma a otimizar a separação e viabilizar cada vez mais os resultados obtidos na simulação à uma aplicação real e industrial.

REFERÊNCIAS

Albuquerque, E., 2012. *Projeto otimizado de uma unidade de air stripping para remover VOCs clorados de águas residuárias*. Master dissertation, Universidade Estadual de Campinas/Campinas.

Beranek, D. A., 2001. Engineering and Design Air Stripping, Design Guide No. 1110-1- 3, *Department of the Army, U. S. Army Corps of Engineers*, Washington.

European Chlorinated Solvent Association. Chlorinated solvents. Brussels, 2001.

Fang, C., Khor, S., 1989. Reduction of volatile organic compounds in aqueous solutions through air stripping and gas-phase carbon adsorption. *Environ. Prog.* Vol. 8, p. 270–278.

Nickol, P., 2008. Gerenciamento de contaminações por solventes clorados. *Deutsche Gesellschaft für Technische Zusammenarbeit (GTZ) GmbH*. Nickol do Brasil LTDA.

Onda, K. H. Takeuchi, Y. J., Okumoto, 1968. *J. Chem. Eng. Jpn.*, 1, 56–62.

Seader, J. D., Henley, E. J., Roper, D. K., 2010. *Separation Process Principles*, 3rd Edition, John Wiley & Sons.

Xian, S., Yu, Y., Xiao, J., Zhang, Z., Xia, Q., Wang, H., Li, Z., 2014. Competitive adsorption of water vapor with VOCs dichloroethane, ethyl acetate and benzene on MIL-101(Cr) in humid atmosphere. *The Royal Society of Chemistry*, 1827–1834.