

SIMULADOR GRATUITO CHEMSEP COMO FERRAMENTA PARA O ENSINO DE SISTEMAS DE SEPARAÇÃO NA ÁREA DE ENGENHARIA QUÍMICA

Viviane M. PEREIRA¹; Brenda S. de SOUZA²; João L. da S. JÚNIOR³; Rejane B. SANTOS⁴.

RESUMO

A simulação tem como objetivos predizer o efeito de modificações nas condições operacionais, a capacidade de operação do equipamento, desenvolver o balanço de massa e energia de forma rápida, detectar e solucionar falhas operacionais, facilidade em visualizar e analisar o completo comportamento do sistema, otimização de operação; avaliação de novas ou melhores estratégias de controle, praticidade nos treinamentos de operadores e engenheiros, minimizar a poluição ambiental, como também, uma ferramenta de apoio aos estudantes de engenharia química. O presente trabalho tem como objetivo apresentar o simulador gratuito *ChemSep* para o ensino de sistemas de separação (destilação, absorção, extração), pois permite a visualização dos resultados de forma dinâmica e clara por meio de tabelas e gráficos, facilitando o entendimento dos conceitos envolvidos.

Palavras-chave:

Simulação; *ChemSep*; Separação.

1. INTRODUÇÃO

A simulação de processos tem se tornado de extrema importância na engenharia química, visto que há a crescente necessidade de se estudar e analisar o desempenho de sistemas complexos. Com o avanço da tecnologia computacional, vem sendo desenvolvidos simuladores cada vez mais sofisticados, permitindo prever o comportamento estático e dinâmico de processos químicos.

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: vivii_magaalhaes@hotmail.com

² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: brendaasouza@hotmail.com

³ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: joao.lameu@ifsulde Minas.edu.br

⁴ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: rejane.santos@ifsulde Minas.edu.br

A simulação tem como objetivos prever o efeito de modificações nas condições operacionais, a capacidade de operação do equipamento, desenvolver o balanço de massa e energia de forma rápida, detectar e solucionar falhas operacionais, facilidade em visualizar e analisar o completo comportamento do sistema, otimização de operação; avaliação de novas ou melhores estratégias de controle, praticidade nos treinamentos de operadores e engenheiros, minimizar a poluição ambiental, como também, uma ferramenta de apoio aos estudantes de engenharia química.

De acordo com BERTOLDI (2012) a simulação de processos por computador é uma ferramenta muito utilizada na fase de operação das unidades de processo, procurando melhorias em processo já existente, como também, durante a fase de projeto.

Alguns trabalhos utilizaram como ferramenta computacional o EXCEL para simular uma destilação binária, como por exemplo, OSIPI et al. (2011), todavia, o *ChemSep*, se mostra vantajoso por se tratar de um software gratuito e apresentar uma facilidade em simular separação com mais de dois componentes, misturas azeotrópica, como também, outros processos de separação, a absorção e a extração, conforme Figura 1.

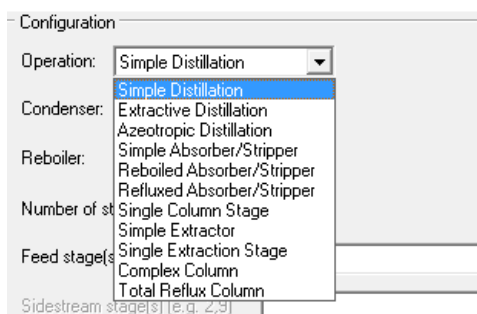


Figura 1: Sistemas de separação no *ChemSep*.

O *ChemSep* apresenta 40 componentes e 300 estágios de equilíbrio; utilizando um banco de dados que cobre mais de 400 produtos químicos. A Figura 1 mostra os tipos de separação do software. (Fonte: ChemSep, 2016).

O presente trabalho tem como objetivo mostrar o simulador gratuito *ChemSep* para o ensino de sistemas de separação apresentando uma interface fácil e intuitiva. Como estudo de caso, o *ChemSep* foi utilizado para realizar uma separação de uma mistura ideal, constituída por acetona e água, através de uma coluna de destilação.

3. MATERIAL E MÉTODOS

Para realizar este trabalho, foi simulada uma coluna de destilação binária para separar uma mistura de acetona e água.

Inicialmente foram adicionados os dados operacionais no software *ChemSep*, inserindo os componentes presentes na mistura (acetona e água) e a configuração da coluna, que inclui o número de pratos e o prato de alimentação, modelo termodinâmico, condições operacionais da alimentação, razão de refluxo e fração molar do componente menos volátil na base da coluna.

Conforme visto na Figura 2, foi definido no simulador uma destilação simples, com condensador total (produto líquido), reboleador parcial (produto líquido), alimentação no estágio 5 e número total de estágios 10.

O *ChemSep* disponibiliza de alguns modelos termodinâmicos, facilitando na simulação da separação de misturas. No presente trabalho, foi escolhida a Lei de Raoult, pois trata-se de uma mistura ideal, conforme Figura 3.

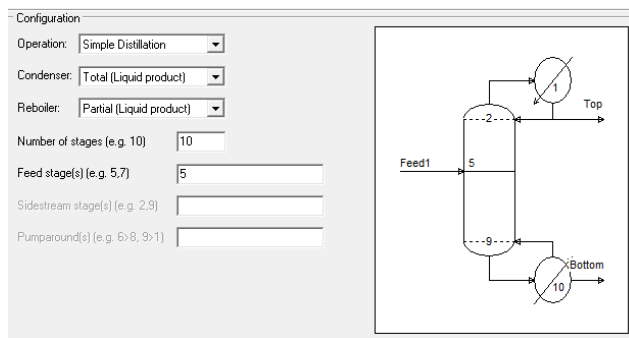


Figura 2: Configuração da coluna de destilação.

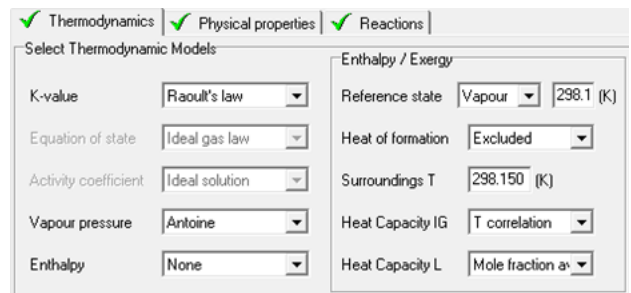


Figura 3: Escolha do modelo termodinâmico.

A alimentação da coluna de destilação foi realizada com 100 Kmols/s de líquido saturado a 40% de acetona e 60% de água, em base molar. A pressão foi considerada constante ao longo da coluna (0,9 atm) e a fração de vapor igual a 0 na alimentação, ou seja, alimentação de líquido saturado. Foi considerado para as especificações do produto obtido na coluna razão de refluxo igual a 2 e fração molar na base da coluna de acetona com valor de 0,1.

Depois de realizado a simulação com as condições mencionadas acima, foram realizadas mudanças nas variáveis razão de refluxo, tipo de alimentação e o número de estágios da coluna, com a finalidade de verificar a influencia na composição do topo (fração de acetona) e conhecer a ferramenta computacional.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

As simulações foram realizadas com as condições descritas no item anterior, como também, foram feitas mudanças na razão de refluxo, no tipo de alimentação (fração de vapor) e no número de pratos de uma coluna de destilação e analisado a influência na fração molar de acetona no destilado, conforme Tabela 1.

Tabela 1: Avaliação da influência razão de refluxo, fração de vapor na alimentação e número de pratos na composição de acetona no topo da coluna.

Razão de refluxo	Fração molar de acetona no topo	Fração de vapor (alimentação)	Fração molar de acetona no topo	Número de pratos teóricos	Fração molar de acetona no topo
0,5	0,926	0	0,997	8	0,989
2	0,997	0,5	0,986	10	0,997
5	0,999	1	0,871	12	0,999

Conforme visto na Tabela 1, percebe-se que quanto maior a razão de refluxo e o número de pratos na coluna, maior a pureza do destilado, enquanto que quanto maior a fração de vapor na alimentação da coluna menor a pureza da composição do topo.

5. CONCLUSÕES

Constatou-se que o simulador *ChemSep* conseguiu representar bem o sistema de separação por destilação, sendo possível analisar as condições operacionais do processo, como também conhecer o potencial da ferramenta. Logo, nota-se um grande potencial do simulador *ChemSep* para o ensino de sistemas de separação no curso de engenharia química, permitindo a visualização dos resultados de forma dinâmica e clara por meio de tabelas e gráficos, facilitando o entendimento dos conceitos envolvidos em sistema de separação.

REFERÊNCIAS

BERTOLDI, O.J. Investigação de estratégias de otimização de plantas virtuais usando software COCO, Scilab e Excel, 2012. Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.

OSIPI, S. R., SILVA Jr, A. T., LIMA, O.C.M., BARROS, M.A.S.D. e FARIA, S.H.B. Pacote computacional em Excel para análise, projeto, e correção do Método McCabeThiele em colunas de destilação binária. XXXIX Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, 2011. ChemSep, disponível em: <http://www.chemsep.org/>, acesso 01 de agosto de 2016.