



UTILIZAÇÃO DE UM SOFTWARE GRATUITO PARA ANÁLISE E PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Sávia Del Vale TERRA¹; João Lameu SILVA JUNIOR²; Rejane Barbosa SANTOS³

RESUMO

A destilação é o processo de separação baseado no equilíbrio líquido vapor de misturas. A visualização dos conceitos nos processos de separação é uma necessidade, pois o aluno de engenharia deve ser capaz de entender as mudanças das variáveis e seus efeitos no processo. Neste contexto, este trabalho tem como proposta o uso do *ChemSep* como ferramenta computacional de forma rápida e didática, pois permite a visualização dos resultados de forma imediata e prática por meio de tabelas e gráficos.

INTRODUÇÃO

A destilação é o processo de separação baseado no equilíbrio líquido vapor de misturas, sendo uma operação unitária de amplo interesse industrial. A alimentação de uma mistura em dois ou mais componentes é separado em dois ou mais produtos, muitas vezes limitado, uma parte topo da coluna como destilado e outra parte como produto de base, com composições diferentes da alimentação (SEADER et al., 2010).

Apesar de pouco aplicada na indústria química, a destilação binária é amplamente usada nos cursos de graduação de engenharia química para estudo dos fenômenos de separação deste processo devido a sua simplicidade, o que

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

² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Câmpus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: joao.lameu@ifsuldeminas.edu.br

³ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Câmpus Pouso Alegre. Pouso Alegre/MG. E-mail: rejane.santos@ifsuldeminas.edu.br

facilita a visualização e assimilação dos conceitos envolvidos nesta operação unitária.

Ao longo dos anos, vários métodos de cálculo de pratos teóricos de colunas binárias e de análise de desempenho tem sido proposto. Porém, estes métodos exigem um grande número de cálculos, o que os tornam cansativos em projetos de colunas de grande porte ou da análise de diferentes configurações operacionais.

Uma alternativa é a utilização ferramentas computacionais. De acordo com BERTOLDI (2012) a simulação de processos por computador é uma das ferramentas mais importantes, sendo bastante utilizada na fase de operação das unidades, buscando melhorias em processo já existente, como também, durante a fase de projeto.

A simulação de processos tem se tornado de extrema importância na engenharia química. Pois, com o avanço da tecnologia computacional, vem sendo desenvolvidos simuladores cada vez mais sofisticados, permitindo prever o comportamento estático e dinâmico de processos químicos com exatidão.

A simulação tem como objetivos prever o efeito de mudanças nas condições operacionais, desenvolver o balanço de massa e energia de forma rápida, facilitar 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, como também, uma ferramenta de apoio aos estudantes de engenharia química.

Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo apresentar o simulador gratuito *ChemSep* para colunas de destilação, absorção e de extração apresentando uma interface fácil e intuitiva com até 40 componentes e 300 estágios de equilíbrio. O *ChemSep* foi utilizado para realizar uma separação de uma mistura ideal, constituída por n-hexano e n-octano, através de uma coluna de destilação de forma sistematizada, rápida e didática, pois permite a visualização dos resultados de forma imediata e prática por meio de tabelas e gráficos, facilitando o entendimento dos conceitos envolvidos em destilação e tornando-o uma ferramenta poderosa para os estudantes de engenharia química quanto no exercício profissional dos engenheiros.

Existem alguns trabalhos na literatura usando o EXCEL como ferramenta computacional para simular uma destilação binária, como por exemplo, OSIPI et al. (2011), OLIVEIRA et al. (2009) e UEMURA et al. (2005), entretanto, o *ChemSep*, se mostra vantajoso por se tratar de um software gratuito e a facilidade em simular

separação com mais de dois componentes, misturas azeotrópicas, como também, outros processos de separação.

MATERIAL E MÉTODOS

O *ChemSep* apresenta uma interface fácil e intuitiva, facilitando no aprendizado de estudantes de engenharia química, como por exemplo, prever o efeito de mudanças nas condições operacionais, desenvolver o balanço de massa e energia de forma rápida, facilitar em visualizar e analisar o completo comportamento do sistema.

Para realizar este trabalho, foi simulado uma coluna de destilação binária para separar uma mistura de n-hexano e n-octano. Foram realizadas três simulações com condições operacionais diferentes com a finalidade de conhecer a ferramenta computacional.

Inicialmente foram implementados os dados operacionais no software *ChemSep*, adicionando os componentes presentes na mistura (n-hexano e n-octano), configuração da coluna (número de pratos e prato de alimentação), modelo termodinâmico, condições operacionais da alimentação, razão de refluxo e fração molar do componente menos volátil (n-octano) na base da coluna.

Conforme visto na Figura 1, foi definido no simulador uma destilação simples, com condensador total (produto líquido), reboador parcial (produto líquido), alimentação no estágio 3 e número de estágios de 5.

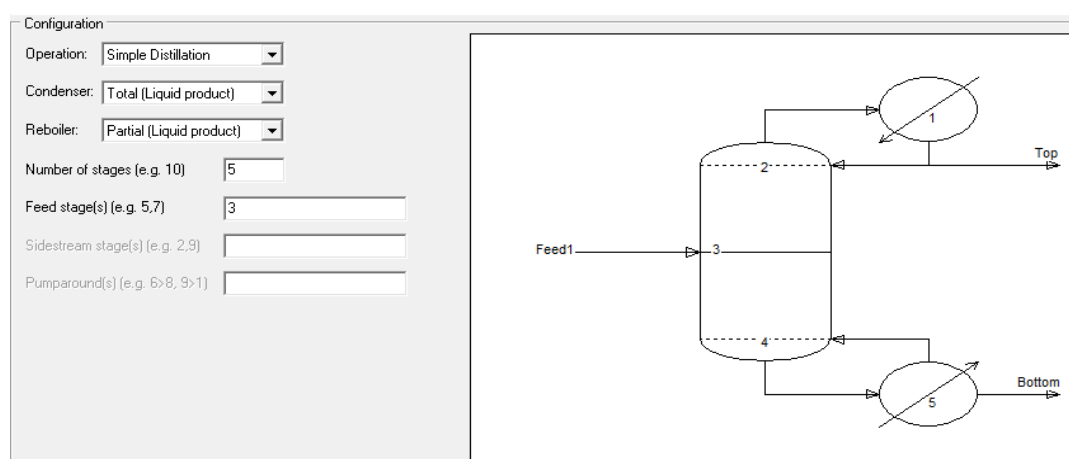


Figura 1. Configuração da coluna de destilação.

O *ChemSep* disponibiliza de alguns modelos termodinâmicos, facilitando na simulação da separação de misturas. No presente trabalho, foi escolhida a Lei de Raoult (Figura 2), pois trata-se de uma mistura ideal.

A alimentação da coluna de destilação foi realizada com 850 kg/h de líquido saturado a 50 % de n-hexano e 50 % de n-octano, em base mássica. A pressão foi considerada constante ao longo da coluna.

A Figura 3 apresenta as especificações do produto obtido na coluna, como por exemplo, razão de refluxo igual a 2 e fração molar na base da coluna de n-octano de 0,95.

Thermodynamics Physical properties Reactions

Select Thermodynamic Models

K-value: Raoult's law

Equation of state: Ideal gas law

Activity coefficient: Ideal solution

Vapour pressure: Antoine

Enthalpy: None

Enthalpy / Exergy

Reference state: Vapour 298.1 (K)

Heat of formation: Excluded

Surroundings T: 298.150 (K)

Heat Capacity IG: T correlation

Heat Capacity L: Mole fraction a

Figura 2. Seleção do modelo termodinâmico.

Column Product Specifications

Top product name: Top

Condenser duty name: Qcondenser

Top specification: Reflux ratio = 2.00000 (-)

Bottom product name: Bottom

Reboiler duty name: Qreboiler

Bottom specification: Mole fraction of a component = 0.950000 (-)

n-oc

Figura 3. Especificações do produto da coluna.

Foram realizadas 3 simulações variando o número de pratos da coluna de destilação, obtido através do método de McCabe – Thiele, verificando a influência do número de pratos em uma coluna sob a composição de n-hexano no topo da coluna, como também, a razão de refluxo.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As simulações foram realizadas com as condições descritas no item anterior, porém duas foram definidas com número de pratos diferentes (5 e 8 estágios), considerando razão de refluxo 2, enquanto que a última simulação foi realizada com 5 estágios e com uma razão de refluxo 10.

A Figura 4(a) mostra o gráfico de McCabe Thiele com uma situação com 5 estágios, enquanto que a Figura 4(b) ilustra uma situação com 8 estágios. Através das mesmas, percebe-se que a fração molar do n-hexano (destilado) no topo da coluna apresentou uma maior pureza (de aproximadamente 0,99) na situação com 8 estágios, enquanto que na separação da mistura com 5 estágios, a fração molar do hexano no topo da coluna foi de aproximadamente 0,93.

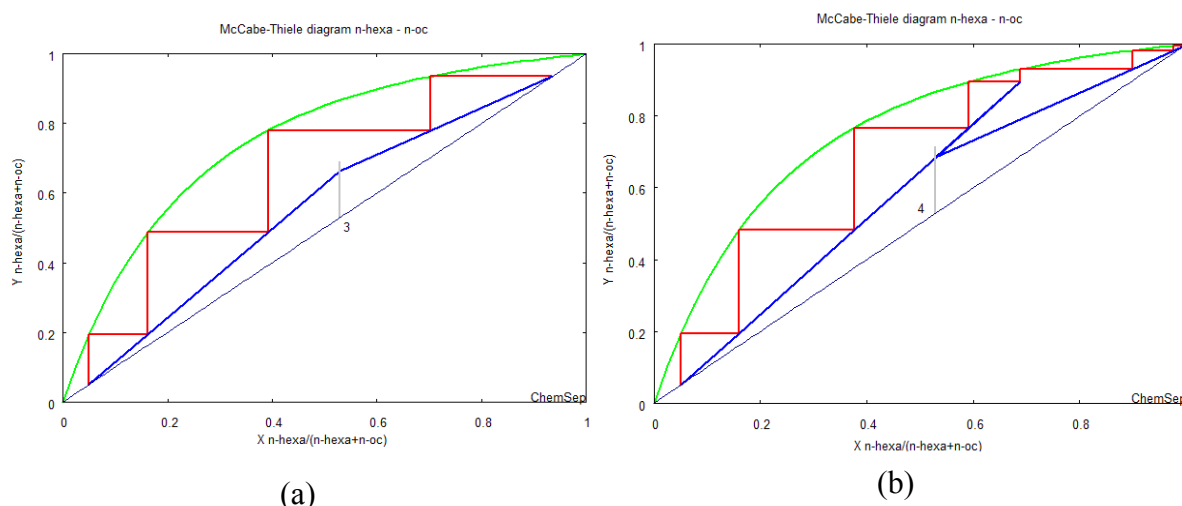


Figura 4. Números de estágios determinados pelo Método de McCabe-Thiele e razão de refluxo 2. (a) 5 estágios e (b) 8 estágios.

A Figura 5 demonstra a situação com 5 estágios na coluna de destilação, conforme Figura 4(a), porém com uma razão de refluxo igual a 10. Através do resultado ilustrado (Figura 5), nota-se um aumento na fração molar do n-hexano no primeiro estágio (topo da coluna) para um valor próximo de 0,97.

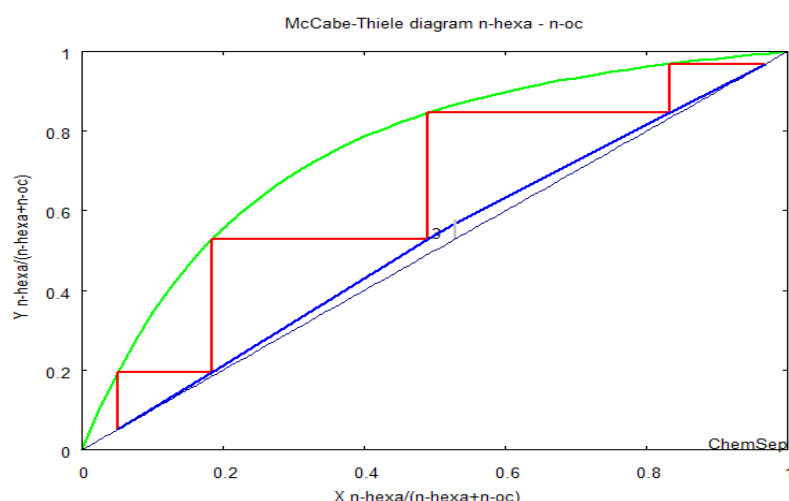


Figura 5. Coluna de destilação com 5 estágios determinados pelo Método de McCabe-Thiele e razão de refluxo 10.

CONCLUSÕES

Notou-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.

Através das simulações foi possível verificar os efeitos causados com mudanças no processo, como por exemplo, foi possível perceber que quanto maior o número de estágios da coluna e a razão de refluxo, maior a fração molar do destilado no topo.

Logo, percebe-se um grande potencial da ferramenta *ChemSep* para o ensino de sistemas de separação no curso de engenharia química, permitindo a visualização dos resultados de forma dinâmica e prática por meio de tabelas e gráficos, facilitando o entendimento dos conceitos envolvidos.

REFERÊNCIAS

- BERTOLDI, O.J. Investigação de estratégias de otimização de plantas virtuais usando software COCO, Scilab e Excel, 2012. Dissertação(Mestrado). Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.
- OLIVEIRA, A. C., CÂMARA, M.M., LIMA, O.C.M e BARROS, M.A.S.D. Estimativa de parâmetros termodinâmicos de equilíbrio líquido vapor e projeto de colunas de destilação binária utilizando o software Excel. VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, 2009.
- 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 McCabe-Thiele em colunas de destilação binária. XXXIX Congresso Brasileiro de Educação em Engenharia, 2011.
- SEADER, J. D., HENLEY, E. J. e ROPER, D.K. **Separation Process Principles**. 3 ed., EUA: Wiley, 2010.
- UEMURA, V.O., BUENO, C., LIMA, O.C.M. e BARROS, M.A.S.D. Excel como ferramenta didática de apoio na análise de processos de destilação – parte 1: Destilação flash binária. VI Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, 2005.