



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
CURSO DE ENGENHARIA QUÍMICA

NATÁLIA TEIXEIRA GOMES

**UTILIZAÇÃO DA FERRAMENTA EXCEL COMO AUXÍLIO PEDAGÓGICO NO
PROJETO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO**

FORTALEZA

2018

NATÁLIA TEIXEIRA GOMES

UTILIZAÇÃO DA FERRAMENTA EXCEL COMO AUXÍLIO PEDAGÓGICO NO PROJETO
DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Química do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Ivanildo José da Silva Júnior

FORTALEZA

2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- G615u Gomes, Natália Teixeira.
Utilização da ferramenta Excel como auxílio pedagógico no projeto de colunas de destilação / Natália Teixeira Gomes. – 2018.
71 f. : il. color.
- Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Química, Fortaleza, 2018.
Orientação: Prof. Dr. Ivanildo José da Silva Júnior.
1. destilação. 2. McCabe-Thiele. 3. shortcut. 4. Excel. I. Título.

CDD 660

NATÁLIA TEIXEIRA GOMES

UTILIZAÇÃO DA FERRAMENTA EXCEL COMO AUXÍLIO PEDAGÓGICO NO PROJETO
DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Química do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Ivanildo José da Silva Júnior

Aprovada em: 15 / 06 / 2018.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Ivanildo José da Silva Júnior (Orientador)

Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dra. Rílvia Saraiva de Santiago Aguiar

Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Hosiberto Batista de Sant'Ana

Universidade Federal do Ceará (UFC)

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, por ter me proporcionado entrar na faculdade e viver essa experiência bastante enriquecedora para o meu futuro profissional.

Aos meus pais e meu irmão, por todo incentivo, apoio e amor. Por entender meus momentos de estresse e me acalmar quando precisei. Por todo esforço para que eu sempre tivesse o melhor. E por todo ensinamento de vida.

Ao meu professor e orientador Ivanildo, por todo o conhecimento dado, incentivo e apoio. Por acreditar no meu trabalho e orientar da melhor forma possível.

Aos meus colegas de faculdade e de vida, Mariana, Marcela, Ariane, Sâmia, Jéssica, Vírginia, Felipe, entre outros. Agradecimento especial a Flora, por todo companheirismo e noites viradas de estudo. A Thais, por mesmo distanciado após a mudança de curso, nunca mudou nossa amizade. Ao Guilherme por todo apoio, incentivo, conselhos e companheirismo nessa etapa. Aos meus colegas da empresa júnior por todo ensinamento durante a faculdade. Aos meus colegas do intercâmbio, em especial Bruna e Pedro que dividiram comigo a melhor experiência da minha vida.

Aos meus colegas do trabalho, por me motivar e me ensinar muito mais do que se é visto em sala de aula.

Aos professores do departamento de engenharia química que me ensinaram além do conteúdo abordado, a ser uma profissional melhor, superando os desafios de cada disciplina.

RESUMO

Nas aulas de engenharia química, o uso de novas metodologias de ensino visando uma maior participação dos alunos e seu aprendizado necessitam de algum auxílio da tecnologia, devido ao grande extensa rotina de cálculos para projetos de equipamentos. Apesar de possuir diversos *softwares* que possam ser úteis para as necessidades dos alunos, tais ferramentas devem trazer praticidade, tanto em sala de aula quanto no seu estudo individual em casa. Quando o tema discutido é destilação, durante as aulas de Operações Unitárias na Engenharia Química, os métodos utilizados no projeto de colunas são muitas vezes custosos para se resolver manualmente. Para tais projetos são utilizados métodos gráficos, como o método de McCabe-Thiele para misturas binárias, ou métodos com um grande número de variáveis, como o método *shortcut* para mistura de multicomponentes. Portanto, faz-se necessário buscar ferramentas de projeto de destiladores de forma eficaz e prática. O Excel mostrou-se, então, como uma das principais ferramentas utilizadas para tais projetos. A modelagem desenvolvida neste *software* visa ajudar os alunos do curso de engenharia química durante a resolução de exercícios propostos e na análise crítica das variáveis de entrada no dimensionamento de destiladores, podendo ser adaptada para diversos projetos. Os cálculos foram validados com exemplos resolvidos de importantes fontes bibliográficas da Engenharia Química e com auxílio de um website que faz o projeto de equipamentos.

Palavras chave: destilação McCabe-Thiele, *shortcut*, Excel.

ABSTRACT

In Chemical Engineering, the use of new teaching methods to achieve greater participation of students and to improve their learning needs the support of some kind of technology due to the hard manual working to project an equipment. Although there are several software that meets the needs of the students, those tools should be practical, both in the classroom and in their study at home. When the topic discussed is distillation, during unit operations classes in Chemical Engineering, the methods used in column design are often hard to solve manually. For such projects, graphical methodologies are used, such as McCabe-Thiele for binary mixtures, or methodologies with a large number of variables, such as shortcut method for multicomponent mixtures. Therefore, it is necessary to look for design tools for distillers that are effective and practical. Excel proved thus to be one of the main tools used for such projects. The modeling developed in this software aims to help the Chemical Engineering students during the resolution of proposed exercises and to improve their critical analysis of the variation of the input variables in the design of distillers, being able to be adapted for several projects. The calculations were validated with solved problem from a famous book and with the support of a website, which does the equipment design.

Key words: distillation, McCabe-Thiele, shortcut, Excel

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Pirâmide de William Glasser.....	15
Figura 2 - Pesquisa com os softwares utilizados na engenharia química.....	16
Figura 3 - Esquema de uma coluna de destilação e suas correntes.....	19
Figura 4 - Esquema de vazões no prato n.....	22
Figura 5 - Diagrama de McCabe-Thiele.....	25
Figura 6 - Diagrama de McCabe-Thiele na condição de razão mínima de refluxo.....	26
Figura 7- Layout da Capa da modelagem no Excel.....	31
Figura 8 - Layout da página de dados.....	32
Figura 9 - Processo de resolução utilizando McCabe-Thiele.....	33
Figura 10 - Exemplo de diagrama de McCabe-Thiele.....	35
Figura 11 - Diagrama de McCabe-Thiele com degraus.....	36
Figura 12 - Layout da página para projeto utilizando o método de FUG.....	37
Figura 13 - Procedimento de cálculo para o método de FUG.....	39
Figura 14 - Diagrama de McCabe-Thiele para o exemplo.....	45
Figura 15 - Gráfico plotado para o exemplo no website Checal.com.....	46
Figura 16 - Resultado do item (b) plotado no Excel.....	48
Figura 17 - Resultado do item (b) plotado no Checalc.com.....	49
Figura 18 - Diagrama de McCabe-Thiele plotado no livro de McCabe.....	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Condição de alimentação.....	23
Tabela 2- Dados de entrada inseridos no sistema.....	44
Tabela 3 - Dados de equilíbrio termodinâmico buscados na modelagem.....	44
Tabela 4 - Resultados encontrados na modelagem	45
Tabela 5 - Resultados das fontes utilizadas e erro.....	47
Tabela 6 - Resultados do item b nas diversas fontes e erro.....	49
Tabela 7 - Dados de entrada para modelagem de misturas multicomponentes	52
Tabela 8 - Pressão do ponto de bolha e de orvalho da mistura de alimentação em mmHg	52
Tabela 9- Resultados das composições molares de entrada e saída da mistura.....	53
Tabela 10 - Demais resultados encontrados na modelagem do Excel	53
Tabela 11 - Resultados encontrados para composições em diversas fontes.....	54
Tabela 12 - Resultados encontrados em diversas fontes.....	54

NOMECLATURAS

A, B, C	Constantes termodinâmicas para Equação de Antoine
C_{PL}, C_{PV}	Calor específico
D	Vazão na corrente de topo da coluna de destilação
F	Vazão de alimentação na coluna de destilação
HK	Componente-chave pesado
K_i	Coefficiente de distribuição do componente i
L_a	Vazão de líquido do componente A
LK	Componente-chave leve
N_{esgot}	Número de pratos na zona de esgotamento
N_{esgot}	Número de pratos mínimo
N_{retif}	Número de pratos na zona de retificação
P_i*	Pressão de vapor do componente i
P_i	Pressão do componente i
q	Condição de alimentação da mistura
R	Razão de refluxo
R_{min}	Razão de refluxo mínima
T_b	Temperatura no ponto de bolha
T_d	Temperatura no ponto de orvalho
T_n	Temperatura no prato n
T_o, T_F	Temperatura de entrada na coluna de destilação
V_a	Vazão de vapor do componente A

V_b	Vapor que retorna no fundo da coluna
V_{n+1}	Vazão de vapor no prato n+1
W	Vazão na corrente de fundo da coluna de destilação
x_i	Composição líquida do componente i
y_i	Composição de vapor do componente i
y_{n+1}	Composição de vapor no prato n+1
z, x_F	Composição de alimentação
α	Volatilidade
θ	Valor de <i>Underwood</i>
λ	Calor de vaporização

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	12
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
2.1. Ferramentas Educacionais	14
2.2. Ferramentas Computacionais	15
2.3. Destilação	16
<i>2.3.1. Coluna de destilação</i>	18
<i>2.3.2. Refervedor</i>	19
<i>2.3.3. Condensador</i>	19
2.4. Método de McCabe-Thiele	20
<i>2.4.1. Volatilidade relativa</i>	20
<i>2.4.2. Balanços materiais</i>	21
<i>2.4.3. Ponto de alimentação</i>	23
<i>2.4.4. Número de pratos</i>	24
<i>2.4.5. Razão mínima de refluxo</i>	25
<i>2.4.6. Número mínimo de pratos</i>	26
2.5. Método de Fenske-Underwood e Gilliland	27
<i>2.5.1. Equação de Fenske</i>	28
<i>2.5.2. Equação de Underwood</i>	29
<i>2.5.3. Equação de Gilliland</i>	29
3. METODOLOGIA	30
3.1. McCabe-Thiele	31
3.2. Fenske-Underwood e Gilliland	37
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	42

4.1. Validação de dados	42
4.2. McCabe-Thiele	42
4.2. Metodologia de FUG.....	51
5. CONCLUSÃO.....	55
6. SUGESTÕES.....	55
REFERÊNCIAS	56
APÊNDICE A – MEMORIAL DE CÁLCULO PARA MCCABE-THIELE	58
APÊNDICE B – MEMORIAL DE CÁLCULO PARA DESTILAÇÃO SHORTCUT	63

1. INTRODUÇÃO

A destilação é uma operação unitária largamente utilizada na indústria química capaz de separar misturas devido suas diferenças de volatilidade. O equipamento utilizado neste processo é chamado de coluna de destilação. Durante a destilação, os componentes mais voláteis tendem a vaporizar mais facilmente, saindo no topo da coluna, e os componentes menos voláteis coletados no fundo da mesma. “O fracionamento do petróleo, a obtenção de álcoois e a extração de essências são apenas alguns exemplos de processos em que a destilação é empregada na indústria.” (BELTRAN, 1996).

Em relação aos cálculos de projeto para uma coluna de destilação, Marangoni (2005) afirma que a destilação fracionada é um problema essencialmente multivariável e com restrições de operação. O comportamento dinâmico é extremamente não linear e existe um elevado grau de acoplamento entre as variáveis. Para misturas de dois componentes (misturas binárias), o método mais estudado durante a graduação em engenharia química é o método de McCabe-Thiele. Essa metodologia tem sido amplamente empregado sobretudo devido a simplicidade nos cálculos e as considerações feitas de forma a diminuir o procedimento, tais como a perda de calor ser desprezível. Porém, “por se tratar de um método gráfico, muitas vezes é cansativo para ser resolvido de forma manual” (MORIIZUMI, 2012).

Para projetos em que as colunas de destilação são alimentadas com uma mistura de mais de dois componentes, o método de Fenske-Underwood e Gilliland (FUG ou método *shortcut*) é bastante utilizado. Além dessa metodologia, alguns métodos rigorosos, como um conjunto das equações de balanço de massa, das relações de equilíbrio, dos somatórios de frações molares e dos balanços entálpicos de energia, ou seja as equações MESH, foram desenvolvidos também para projetos de misturas com essas característica. Entretanto, ambos os métodos torna-se ainda mais complexo que McCabe-Thiele, devido ao número de variáveis envolvidas e interações necessárias para resolução das equações.

Apesar das ferramentas computacionais existentes no campo de projeto de equipamentos e de mudanças no formato das aulas, como a introdução de recursos tecnológicos, o professor da

disciplina de Operações Unitárias III do curso de Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará e os alunos não dispõem de um software educacional prático, de forma a facilitar a aprendizagem. Apesar dos esforços de inovação durante as aulas para aumentar o raciocínio lógico dos alunos e sua participação na disciplina, as metodologias empregadas não se tornam eficientes em projetos de colunas de destilação, devido ao longo tempo necessário para resolução manual de questões propostas. Os alunos limitam-se a realizar o procedimento padrão de cálculos e desenhar os gráficos necessários, sem analisar criticamente os passos realizados ou os dados obtidos. Além disso, o procedimento de cálculo manual para resolução de exercícios de destilação dificulta na análise, por parte dos alunos, dos possíveis impactos no projeto causado na mudança das variáveis de entrada, visto que para cada uma das condições se faz necessário realizar todo o procedimento de cálculos, o que é custoso para se fazer manualmente. Esse tipo de análise é de extrema importância na formação do Engenheiro Químico, fazendo-se necessária sua abordagem na disciplina.

Com isso, o presente trabalho tem como objetivo principal desenvolver uma modelagem didática utilizando software Excel na aplicação das metodologias de McCabe-Thiele ou de Fenske-Underwood e Gilliland (FUG) para projeto de uma coluna de destilação, sendo capaz de realizar os cálculos tanto para misturas binárias quanto para misturas com multicomponentes. Essa modelagem tem como principal função facilitar os cálculos de projeto e o aprendizado dos alunos de engenharia química, com a demonstração gráfica do comportamento nos variados pratos ao longo da coluna para um modelo de mistura binária e a análise de possíveis impactos na mudança de alguma variável de entrada. Além disso, o programa também tem como objetivo mostrar como o projeto é feito, através de um memorial de cálculos para que os alunos do curso de Engenharia Química possam, além de realizar projetos mais rápidos, aprender a metodologia empregada por trás do dimensionamento realizado. Com isso, busca-se trazer praticidade, rapidez na resolução de problemas e um aprendizado mais dinâmico, trazendo benefícios para os alunos e professores da disciplina de Operações Unitárias III, além de Princípios de Processos Químicos e Termodinâmica.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

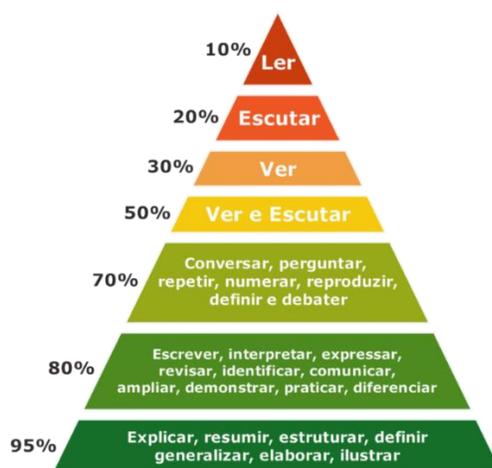
2.1 Ferramentas educacionais

Com o avanço da tecnologia, na chamada *era da informação*, alunos de universidades estão cada vez buscando novos meios de aprendizagem de diversos conteúdos vistos em sala de aula. Segundo Neto et al. (2014), foi divulgado uma pesquisa na Folha de São Paulo em 2013 que seis tecnologias iam mudar o cenário da educação superior. “No curto prazo, os especialistas apontam o uso de *tablets* e cursos on-line; no médio prazo, o uso de jogos eletrônicos e softwares que incorporam a tecnologia *big data*; no longo prazo, o uso de impressão 3D e de equipamentos integrados a roupas e acessórios”. Alguns professores, também, têm buscado cada vez mais inovar nas metodologias empregadas, de forma a ter a atenção do aluno e facilitar na aprendizagem.

No âmbito da engenharia, busca-se cada vez mais incluir as inovações, tanto computacionais como de metodologias de ensino, de forma a contribuir para o desenvolvimento do aluno. Projetos englobando diferentes disciplinas (projetos integrados), trabalhos em equipe, sala de aula invertida, aprendizagem baseada em problemas, jogos e atividades práticas são exemplos de metodologias utilizadas que agregam habilidades ao profissional nos dias de hoje.

Conforme a pirâmide de William Glasser, Figura 1, tais metodologias ajudam no aprendizado, pois os alunos de forma geral aprendem até 95% quando definem e elaboram sobre a sistemática abordada, ao contrário do método tradicional em que os alunos veem e escutam e aprendem apenas 50% da temática. Portanto, acredita-se que metodologias de ensino diferentes e *softwares* que facilitem suas aplicações será uma tendência em universidades do Brasil e do mundo.

Figura 1 – Pirâmide de William Glasser



Fonte: Sesi, 2017

2.2 Ferramentas computacionais

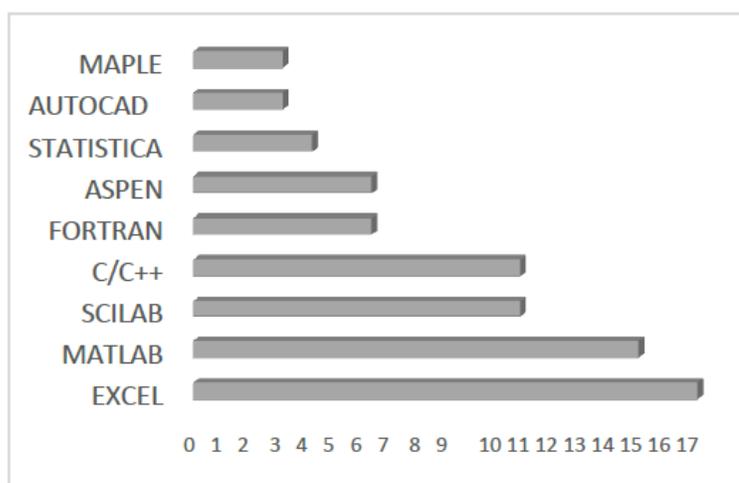
Em um mercado cada vez mais competitivo, é necessário que o profissional de Engenharia Química esteja capacitado para enfrentar os vários desafios que o trabalho na indústria pode apresentar. Muitas vezes, problemas matemáticos complexos devem ser resolvidos com a máxima eficiência, economia e confiabilidade. Portanto, o uso de *softwares* no campo da Engenharia Química está cada vez mais abrangente, permitindo a modelagem e simulação de projetos de forma rápida, econômica e prática.

Apesar da grande necessidade de ferramentas computacionais para auxiliar os alunos de Engenharia Química, muitos destes *softwares* são pagos, necessitam de conhecimento prévio da ferramenta ou necessitam do uso de internet, o que, algumas vezes, impossibilita a praticidade para os alunos. Exemplos de softwares utilizados pelos alunos de Engenharia Química na Universidade Federal do Ceará são *Hysys*, *Excel*, *Matlab*, *Python*, entre outros. Importante ressaltar que alguns desses softwares necessitam de licenças e são utilizados apenas em determinados laboratórios para fins de pesquisa.

Conforme pesquisa realizada por Ferreira e Vieira (2017), os softwares mais utilizados de forma didática para os alunos de Engenharia Química em diversas universidades do Brasil são *MatLab*, *SciLab*, *C/C++* e *Excel*, sendo esse último unânime em todas as instituições pesquisadas, conforme Figura 2. Além dos softwares já mencionados, o *CheCalc.com* é um *website* em que o

aluno consegue realizar cálculos de projetos de equipamentos de forma rápida e prática. Entretanto, não é uma ferramenta aplicável em sala de aula, devido aos diversos problemas de infraestrutura das universidades, tais como o fácil acesso à internet. Além disso, tais ferramentas são úteis para o desenvolvimento do projeto e geração de resultados, mas não demonstra como os cálculos são realizados.

Figura 2 - Pesquisa com os softwares utilizados na engenharia química.



Fonte: Ferreira e Vieira, 2017

Por outro lado, e conforme observado na pesquisa realizada por Ferreira e Vieira (2017), o Excel é uma ferramenta computacional bastante difundida nos dias de hoje para uso em sala de aula. Isso ocorre pelo fato de ser uma ferramenta altamente acessível e versátil. O aluno pode criar planilhas eletrônicas, desde as mais simples até a mais completas de forma a realizar cálculos para as diversas disciplinas da matriz curricular.

2.3 Destilação

A destilação, ou destilação fracionada, é a operação unitária mais utilizada na indústria química. “Entretanto, esse processo necessita de uma alta quantidade de energia, especialmente quando a volatilidade relativa dos componentes chave é menor que 1,50.” (Seader e Henley, 2011). Segundo Roitman (2002), essa operação ocorre por intermédio de vaporizações e condensações

sucessivas, que, aproveitando as diferentes volatilidades das substâncias, torna possível o enriquecimento da parte vaporizada, com as substâncias mais voláteis. Na destilação, portanto, o agente de separação é o calor, pois o vapor formado tem composição diferente da mistura original. Além disso, há sucessivos processos de transferência de massa nos pratos de contato ao longo da coluna de destilação.

A mistura de entrada na coluna de destilação pode ser de dois componentes, mistura binária, ou de multicomponentes. Para o caso em que se tem mais de 2 componentes, os cálculos são ainda mais complexos, visto que a temperatura e pressão, que variam ao longo da torre, interferem nos cálculos. Portanto, existem diversos métodos de cálculo para esse tipo de projeto, desde os métodos aproximados, como o método FUG ou *shortcut*, até métodos mais rigorosos, como as equações de MESH. Além disso, há casos em que ocorre reações ao interior da torre de destilação, devendo incluir as variáveis da reação no projeto, tais como velocidade de reação. Outro caso de destilação que requer ainda mais cálculos rigorosos é quando a mistura forma azeótropos. Ou seja, os componentes da mistura entram em ebulição em uma mesma condição de temperatura e pressão, dificultando ainda mais a separação. Importante mencionar também que para misturas em que a volatilidade relativa é menor que 1,10, o custo para a separação é bem alta e complexa. Entretanto, para tais condições, há metodologias gráficas que ajudam no projeto da coluna de destilação.

Conforme mencionado por Treybal (1981), a destilação difere da absorção, pelo fato da separação ser realizada apenas pela adição ou remoção de calor ao sistema. Na absorção, por outro lado, faz-se necessário a entrada de uma outra substância, conhecida com o solvente, de forma que o componente a ser separado (o soluto) seja transferido para essa terceira substância por solubilização.

Segundo Kiss (2013), numa escala comercial, a destilação tem diversas aplicações, tais como a separação do petróleo em frações, purificação da água, dessalinização e na produção de bebidas alcólicas. Esse processo era utilizado desde as antiguidades para produção de bebidas alcólicas. Entretanto, nessa época o processo era feito em batelada.

2.3.1 Coluna de destilação

O equipamento utilizado na destilação é chamado de coluna de destilação. “O objetivo principal da coluna é proporcionar o contato íntimo entre o líquido e o vapor, de modo a permitir a transferência de massa entre as fases.” (JUNGES, 2010).

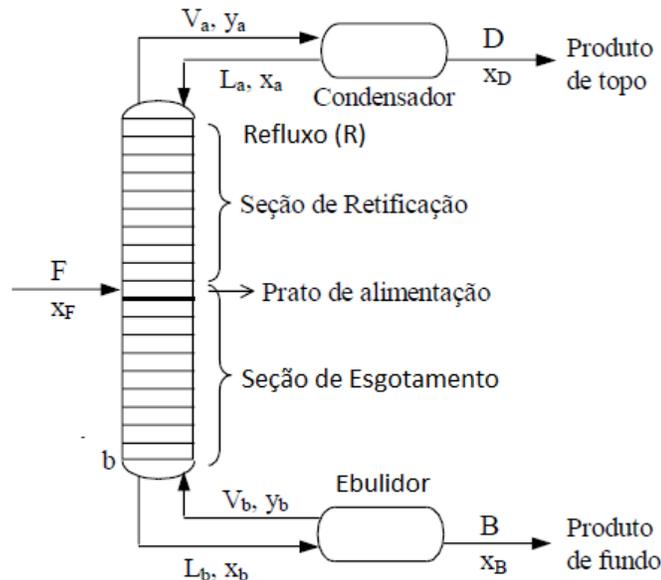
Esse equipamento pode ser de pratos borbulhadores, pratos perfurados ou de recheio. “A grande diferença entre pratos e recheios é a porcentagem de abertura entre esses dois tipos de dispositivos de contato líquido-vapor” (ORLANDO, 2007). Além disso, o contato líquido-vapor se dá em apenas algumas partes em colunas de pratos, ao contrário de colunas de recheio, que se dá em todo comprimento em que o recheio esteja contido.

A altura da torre de destilação é definida pela composição desejada na corrente de destilado (topo), visto que quanto maior a pureza do produto, maior a troca de massa e maior o contato necessário para que o componente volátil seja vaporizado. Ou seja, em uma coluna de pratos, quanto maior for a quantidade de pratos, maior o tamanho da torre. O mesmo acontece para uma torre de recheios, onde a quantidade de recheios é maior.

A mistura de componentes a ser separada entra na coluna de destilação no ponto F . Esse ponto intermediário divide a zona de retificação, zona superior ao ponto de alimentação, e a zona de esgotamento, zona inferior. A parte superior é encontrado uma maior quantidade de componentes voláteis, enquanto na inferior encontra-se os componentes menos voláteis que descendem em forma de líquido. Quando a mistura entra na torre, há uma troca de massa e de calor com o vapor que está no sentido ascendente da coluna, essa troca é devido ao contato nos diversos pratos que compõem a coluna de destilação. Essa troca faz com os componentes mais voláteis sejam vaporizados na coluna e fluam para o topo, ou seja, em contracorrente da mistura líquida. Além disso, na parte superior da coluna, o vapor que está saindo é então condensador e parte dele volta para coluna numa vazão R , de forma a diminuir os gastos com energia na troca de calor. “Na base da coluna, a mistura pobre em componentes mais voláteis, deixa o equipamento na corrente residual B .” (Roitman, 2002).

Na Figura 3 está esquematizado uma coluna de destilação com suas correntes, além de mostrar o condensador no topo e o refeedor ou ebulidor na parte inferior. Tais equipamentos são de extrema importância para que haja a troca térmica na coluna.

Figura 3 - Esquema de uma coluna de destilação e suas correntes



Fonte: Silva, 2011 e adaptado: autor, 2018

2.3.2 Refervedor

A principal finalidade de um refervedor na base da coluna de destilação é promover a vaporização dos componentes mais voláteis que chegam na parte inferior da torre. Esses componentes fluem de forma ascendente e podem chegar ao topo da coluna, saindo na corrente de destilado ou condensar novamente e ser coletado na corrente de resíduo, dependendo da sua volatilidade. O refervedor pode ser construído com dispositivos de aquecimento com vapor d'água, por aquecimento com circulação de frações de óleos quentes ou, até mesmo, através de resistências elétricas.

2.3.3 Condensador

O condensador possui a função inversa do refervedor. Geralmente encontrado no topo da coluna de destilação, o condensador transforma em líquido os componentes mais voláteis que saem do topo da coluna. Esse líquido é parte extraído por possuir a composição exigida para determinado produto e parte volta para coluna para facilitar a troca térmica e de massa com o vapor em ascendência.

2.4. Método de McCabe-Thiele

O método de McCabe-Thiele é o método gráfico mais comumente utilizado para misturas binárias em torres de destilação e para extração líquido-líquido. De acordo com Carvalho e Moura (2009), esse método possui algumas simplificações, tais como os efeitos térmicos serem desprezíveis, a coluna operar em regime permanente e o calor molar liberado durante a condensação do vapor é exatamente o mesmo usado para a vaporização do líquido e, portanto, as vazões molares de líquido e vapor são constantes em cada uma das duas seções da coluna. A metodologia foi desenvolvida em 1925 “para determinação do número de estágios de equilíbrio necessários para que produtos de fundo e de topo, de uma coluna de destilação, atingissem uma determinada pureza” (Carvalho e Moura, 2009). Além disso, através do resultado gráfico, é possível se calcular o ponto de alimentação da mistura e a composição das correntes em cada prato ao longo da coluna. O método baseia-se no estabelecimento de balanços mássicos para cada prato das seções de retificação e de esgotamento da coluna, além da utilização da volatilidade relativa e do diagrama de equilíbrio para descrever o comportamento dos componentes.

Devido ser um método gráfico, McCabe-Thiele é bastante trabalhoso para ser resolvido manualmente, fazendo-se necessário o uso de ferramentas gráficas e computacionais, de forma a se realizar o projetos de colunas de destilação para misturas binárias mais rapidamente. Além disso, o uso dessas ferramentas facilitam na análise de uma possível mudança nas variáveis de entrada. A resolução é feita por uma sequência de passos que será mostrada em seguida.

2.4.1 Volatilidade relativa

Conforme mencionado anteriormente, o princípio de funcionamento de uma torre de destilação é devido a diferença de volatilidade dos componentes. Segundo Montoro (2013), a volatilidade relativa é definida pela razão entre o componente mais volátil pelo menos volátil. Quando esse valor é próximo de 1, mais difícil é a separação da mistura, visto que a pressão de vapor dos componentes são bem próximas, fazendo com que eles vaporizem aproximadamente nas mesmas condições. Esse valor é de extrema importância para definir a viabilidade do projeto

e os próximos passos, visto que componentes com volatilidade relativa baixa vai necessitar de uma grande quantidade de pratos na coluna, aumentando sua altura.

Portanto, o primeiro passo na metodologia de McCabe-Thiele é o cálculo da volatilidade relativa dos componentes a serem separados utilizando o princípio de equilíbrio líquido-vapor em uma mistura binária ideal. Para isso, utiliza-se a Equação de Antonie (equação 1), na qual é possível calcular a pressão de vapor em diversas temperaturas, bem como a lei de Raoult (equação 2), o balanço para mistura binária (Equações 3 e 4) e a equação para volatilidade relativa (equação 5) para se calcular a pressão de vapor dos dois componentes da mistura.

$$\log P^* = A - \frac{B}{C+T} \quad (1)$$

$$P_a = P_a^* x_a \quad (2)$$

$$x_a + x_b = 1 \quad (3)$$

$$y_a + y_b = 1 \quad (4)$$

$$\alpha = \frac{P_a^*}{P_b^*} \quad (5)$$

Nas equações acima a e b são os componentes da mistura, P refere-se a pressão, x a composição na fase líquida e y a composição na fase de vapor.

Para a construção da curva de equilíbrio no diagrama final de McCabe-Thiele, utiliza-se a volatilidade conhecida pela equação 5 e a equação da curva de equilíbrio (equação 6). O eixo x varia entre 0 a 1.

$$y = \frac{\alpha \cdot x}{1 + (\alpha - 1) \cdot x} \quad (6)$$

2.4.2 Balanços materiais

Os balanço mássico geral da coluna de destilação é feito através das Equações 7 e 8. Onde F é a vazão de entrada, D a vazão no destilado, B a vazão no resíduo da torre e x a composição do componente a ser destilado.

$$F = D + W \quad (7)$$

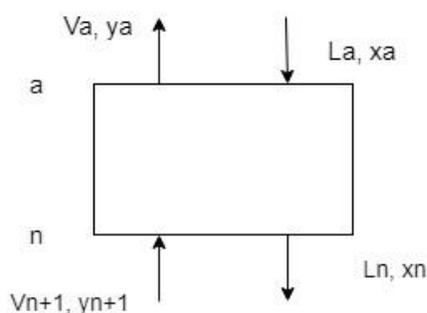
$$Fx_f = Dx_d + Wx_q \quad (8)$$

Além disso, o balanço material para a composição um componente é dada pela equação 9.

$$Vy_a = Dx_d + Lx_a \quad (9)$$

Para cada prato, são feitos balanços de massa que determinam as zonas de esgotamento e de retificação. Esses balanços geram duas equações de $y = f(x)$ representada graficamente como duas linhas retas, ou seja, através de uma equação de primeiro grau. O fluxo de matéria em cada prato é ilustrado pelas correntes representadas na Figura 4.

Figura 4 - Esquema de vazões no prato n .



Fonte: autor, 2018

$$V_{n+1} + L_a = V_a + L_{n+1} \quad (10)$$

Das equações acima de balanço acima e isolando y , obtêm-se a equação de operação para a reta da zona de retificação e zona de esgotamento, respectivamente conforme abaixo. Na equação 11, a variável R significa a razão de refluxo, ou seja, quantidade de vapor condensado que volta para a coluna de destilação e x_D a composição do componente desejado no topo da coluna. Na equação 12 x_D é a composição do componente mais volátil na corrente de fundo e V_B a razão de *boil-up*.

$$y_{n+1} = \frac{R}{R+1} x + \frac{1}{R+1} x_D \quad (11)$$

$$y_{n+1} = \frac{V_B+1}{V_B} x + \frac{1}{V_B} x_w \quad (12)$$

2.4.3 Ponto de alimentação

Ao entrar na torre, a mistura entre os componentes genéricos a e b pode possuir até cinco estados físicos distintos. Segundo McCabe et. all (2005), todos esses estados são caracterizados por um fator q e definido como a quantidade de mols na fase líquida que fluem para a zona de esgotamento que resulta da entrada de cada mol na alimentação. Ou seja, esse estado depende das condições térmicas em que a mistura é submetida no início, conforme Tabela 1.

Tabela 1. Condição de alimentação.

Condição de alimentação	q
Líquido sub-resfriado	>1
Líquido no ponto de bolha	1
Líquido vaporizado parcialmente	$0 < q < 1$
Vapor no ponto de orvalho	0
Vapor superaquecido	<0

Fonte: autor, 2018

O valor de q para condição de líquido subresfriado e para vapor superaquecido podem ser definidos pelas Equações 13 e 14, em que c_p é o calor específico da mistura no estado líquido para c_{pL} e no estado vapor para c_{pV} , T_b , T_d e T_f são as temperaturas da mistura no ponto de bolha, no ponto de orvalho e na alimentação, respectivamente, e λ é o calor latente molar da mistura. Além disso, para a condição de líquido vaporizado parcialmente, $q = 1 - f$, em que f é a fração de vapor da alimentação que fluirá pela zona de retificação.

$$q = 1 + \frac{c_{pL}(T_b - T_f)}{\lambda} \quad (13)$$

$$q = - \frac{c_{pV}(T_f - T_d)}{\lambda} \quad (14)$$

A partir da definição de q , desenha-se no diagrama de McCabe-Thiele a linha de alimentação. Essa linha define o ponto de alimentação da mistura, ou seja, é o ponto de interseção entre a zona de retificação, a zona de esgotamento e a linha de alimentação. A equação da linha é mostrada na equação 15.

$$y = \frac{q}{q-1}x - \frac{1}{q-1}x_f \quad (15)$$

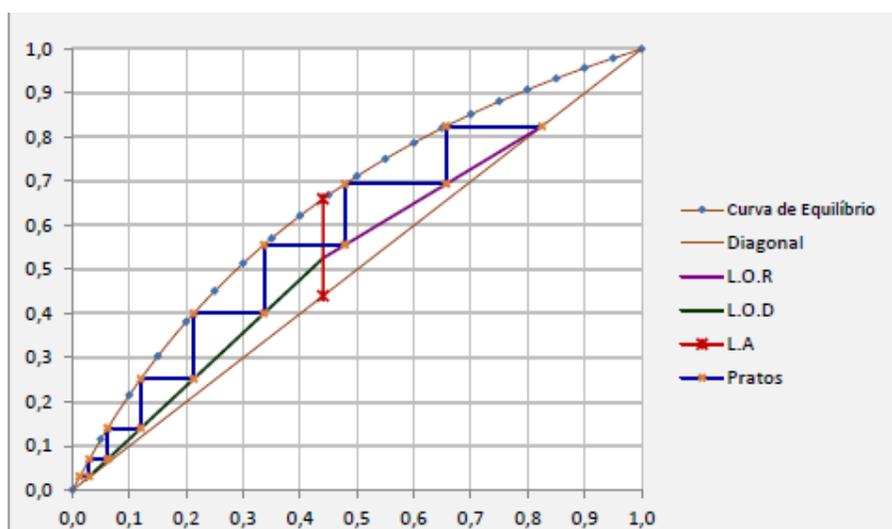
Para se definir o prato ideal em que se deve ocorrer a alimentação da mistura inicial, observa-se em que degrau ocorre a interseção das linhas de retificação, de esgotamento e de alimentação. Esse cálculo tem extrema importância no projeto pois, caso a alimentação ocorra em outro estágio, o número de pratos para que ocorra a separação desejada tende a aumentar.

2.4.4 Número de pratos

O número de pratos é a quantidade de estágios onde há trocas térmicas e mássicas entre a correntes de vapor ascendente e a corrente líquida descendente. Graficamente são feitos espécies de degraus, no qual o ponto inicial é o primeiro ponto da zona de retificação ($x = x_D$ e $y = x_D$). Em seguida, calcula-se o valor de x em que o y inicial toca a curva de equilíbrio. A curva de equilíbrio é o limite, pois mostra a composição limite de troca mássica entre os componentes na dada temperatura do prato.

Com o valor de x encontrado, calcula-se o valor de y que esse x encosta na linha de operação da zona de retificação. Os passos vão se repetindo até que se chegue no valor final da zona de esgotamento ($x = x_w$ e $y = x_w$). Cada ponto sobre a curva de equilíbrio representa um prato na torre de destilação. A Figura 5 mostra como fica o diagrama de McCabe Thiele.

Figura 5 - Diagrama de McCabe-Thiele



Fonte: Moriizumi, 2012.

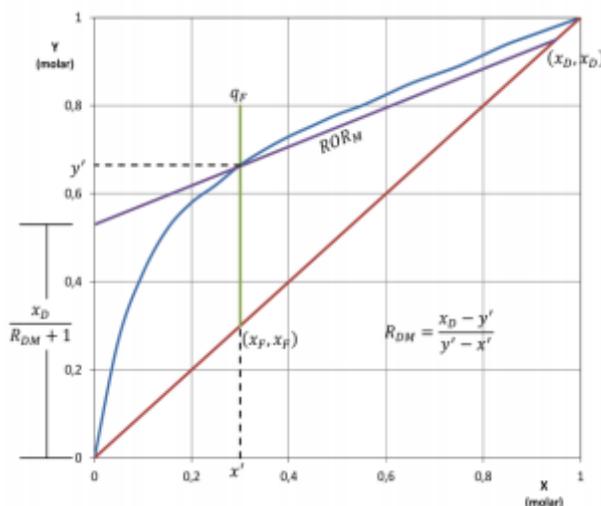
2.4.5 Razão mínima de refluxo

No topo da coluna, o vapor extraído flui para um condensador. Esse vapor é transformado em líquido e parte volta para coluna em contracorrente com o vapor. Essa etapa ajuda na troca térmica na coluna, aumentar a corrente de vapor, na qual se obtêm o produto desejado, e diminuir o número de pratos necessários. Para o cálculo dessa razão, utiliza-se a equação 16, onde La é a vazão que retorna para a torre e D a vazão que é coletada.

$$R = \frac{La}{D} \quad (16)$$

Como a curva de operação da zona de retificação depende da razão de refluxo, quanto menor seu valor, maior será a inclinação da reta. Entretanto, a reta de operação não pode ultrapassar a curva de equilíbrio, pois não seria possível a separação dos componentes, fazendo-se necessário saber qual a razão mínima de refluxo do projeto. O número de pratos quando se opera com essa condição de refluxo tende a infinito e graficamente está mostrando na Figura 6. Na figura, a linha roxa é a curva de operação e a linha azul a curva de equilíbrio.

Figura 6 - Diagrama de McCabe-Thiele na condição de razão mínima de refluxo



Fonte: Malavazi, 2014.

Segundo McCabe (2005) e conforme visto na Figura 6, a razão mínima de refluxo pode ser calculada utilizando a equação 17, em que x_D é a vazão do componente mais volátil no destilado e x' e y' são as coordenadas onde a curva de operação toca a curva de equilíbrio. Esse ponto é chamado de ponto de estrangulamento.

$$\frac{R_{min}}{R_{min}+1} = \frac{x_D - y'}{x_D - x'} \quad (17)$$

2.4.6 Número mínimo de pratos

Ao contrário do que ocorre na razão mínima de refluxo, pode-se calcular o número de pratos quando há uma razão de refluxo total, ou seja, tudo que é obtido na parte superior da coluna retorna ao equipamento. Nesse caso, o tamanho da coluna é o menor possível, pois as inclinações das retas de operações para ambas zonas do torre de destilação tornam-se 45°.

Além de poder ser feito graficamente utilizando a metodologia de McCabe-Thiele, pode-se utilizar a equação 18 para esse cálculo, em que x_D é a composição do componente mais leve na corrente de saída da torre, x_w é a composição do mesmo componente na corrente de fundo e α é a volatilidade relativa dos componentes.

$$N_{\min} = \frac{\ln\left(\frac{x_D \cdot (1-x_W)}{x_W \cdot (1-x_D)}\right)}{\ln\alpha} - 1 \quad (18)$$

2.5 Método de Fenske-Underwood e Gilliland

Ao contrário do método de McCabe-Thiele, o método de FUG é utilizado para misturas com mais de 2 componentes na alimentação da torre. Segundo Seader e Henley (2011), o método FUG é um método aproximado para resolver esse tipo de projeto de destiladores para mistura de multicomponentes. Entretanto, é um bom método para estudos paramétricos para determinar condições ótimas de separação. Metodologias mais rigorosas são bem mais trabalhosas de serem resolvidas manualmente e computacionalmente, visto que necessitam de uma determinação rigorosa de pressão, temperatura, vazões, balanço de massa e de energia, entre outros. Como exemplo de uma metodologia rigorosa, pode-se citar as equações de MESH.

Segundo McCabe et al (2005), a separação desse tipo de mistura é bem mais complexa do que misturas binárias, devido a mudança de temperatura em cada estágio da torre, fazendo com que a volatilidade dos componentes seja variável. Ou seja, um componente leve pode ser mais volátil que a volatilidade relativa média em um ponto da torre, mas pode não ser em outro ponto. Diferentemente em composições binárias, nas quais o componente leve vai ser sempre o componente mais volátil da mistura. Portanto, para resolução desse tipo de método é muitas vezes utilizados softwares para se fazer as interações necessárias de forma a determinar as variáveis envolvidas.

“Os dois componentes cujas composições são especificadas no destilado e no resíduo são designados componentes-chave, o mais volátil dos quais é o componente-chave leve, e o menos volátil é o componente chave pesado.” (De Azevedo e Alves, 2013). Além disso, os demais componentes são denominados de componente não chave, caso seja mais volátil que o componente chave leve, é o componente não chave leve. O mesmo raciocínio é usado para nomear os componentes não chave pesado.

Nesse método, calcula-se o número mínimo de pratos utilizando a equação de Fenske, a razão de refluxo mínima utilizando a equação de Underwood e o número de pratos ideais utilizando

a correlação de Gilliland. É possível se obter, também, com a metodologia o prato ideal para a alimentação e a composição de todos os componentes nas correntes de topo e fundo.

Ainda segundo De Azevedo e Alves (2013), para simplificação dos cálculos andar por andar entende-se que não há componentes de volatilidade intermediária entre os componentes chave. Isso faz com que os componentes mais voláteis apareçam apenas na corrente de destilado, enquanto os menos voláteis estejam presentes apenas na corrente de resíduo.

2.5.1 Equação de Fenske

O primeiro passo no projeto de uma torre de destilação para mistura com mais de dois componentes, é calcular a temperatura nas duas extremidades do equipamento (corrente de topo e de fundo). Para isso, utiliza-se a composição de cada componente e, utilizando a Equação de Antoine (equação 1). A composição é analisada com base na volatilidade dos itens, ou seja, componentes pesados estão presentes apenas na corrente de resíduo, enquanto componentes mais voláteis estão presentes apenas na corrente de topo. Os componentes-chave são calculados a partir da composição desejada no projeto. Com esses dados, calcula-se então o somatório das temperaturas tanto para as composições de topo e de fundo.

O coeficiente de distribuição é definido como o equilíbrio entre vapor e líquido de uma mistura. Cada componente possui um coeficiente de distribuição baseado na pressão de vapor do mesmo e a pressão total do sistema. Pode-se observar na equação 19 a definição para o coeficiente de distribuição. “O fator K depende fortemente da temperatura devido a mudança na pressão de vapor, mas o valor relativo de K para dois componentes depende moderadamente da temperatura” (McCabe, 2005). Além disso, o fator do coeficiente de distribuição pode ser utilizado para o cálculo da volatilidade relativa entre dois componentes, sendo a razão entre os valores de K .

$$K_i = \frac{P_i^*}{P} \quad (19)$$

A equação de Fenske permite calcular o número mínimo de pratos no caso em que a razão de refluxo é total. Sendo um componente A o componente mais volátil e um componente B o menos volátil, a equação é escrita de forma na equação 18. N_{min} é o número de andares de equilíbrio incluindo o ebulidor.

$$N_{min} = \frac{\ln \frac{(x_A/x_B)_{dest}}{(x_A/x_B)_{res}}}{\ln \alpha_{AB}} \quad (20)$$

Conforme dito anteriormente, a volatilidade relativa muda conforme a temperatura varia ao longo da torre. Dessa forma, calcula-se um valor médio entre a volatilidade dos componentes na corrente de topo e na corrente de fundo. “Porém, em muitos casos e para simplificar, podemos admitir que a volatilidade relativa tem o mesmo valor em todos os andares da coluna.” (De Azevedo e Alves, 2013).

2.5.2 Equação de Underwood

O método de Underwood é aplicado para uma mistura com X componentes quando a torre estiver operando em condições de razão mínima de refluxo, ou seja, quando o número de pratos ideais tender a infinito. As equações de Underwood são representadas pelas Equações 21 e 22.

$$\sum_{i=1}^X \frac{z_{iF} \cdot \alpha_{i,HK}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 - q \quad (21)$$

$$\sum_{i=1}^X \frac{x_{iD} \cdot \alpha_{i,HK}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 + R_{min} \quad (22)$$

“Uma vez que a equação 21 é uma equação de grau X , das X raízes escolhe-se o valor de θ que seja menor que $\alpha_{LK,HK}$, mas que seja maior que 1.” (De Azevedo e Alves, 2013).

Através da razão mínima de refluxo, sabe-se a razão de refluxo real desejada, multiplicando pelo fator escolhido pelo engenheiro. Esse valor geralmente varia de 1,2 a 1,5.

2.5.3 Correlação de Gilliland

Através do número de pratos mínimo e a razão de refluxo mínima, utiliza-se a correlação empírica de Gilliland para se determinar o número ideal de pratos. A correlação é feita utilizando o gráfico de Gilliland ou através da equação 23.

$$\frac{N-N_{min}}{N+1} = 0,75 - 0,75 \cdot \left(\frac{R-R_{min}}{R+1}\right)^{0,5668} \quad (23)$$

Outro ponto bastante importante no projeto é calcular a localização ótima para a alimentação da mistura. Para isso, utiliza-se a correlação empírica de Kirkbride (equação 24). Nessa equação, W é a corrente de resíduo, enquanto D é a corrente de destilado. Além disso, F encontrado no como referência em z se refere a corrente de alimentação. Fazendo a razão entre o número de pratos de cada zona e trocando esse valor no número de pratos total, obtêm-se o andar ideal para alimentação.

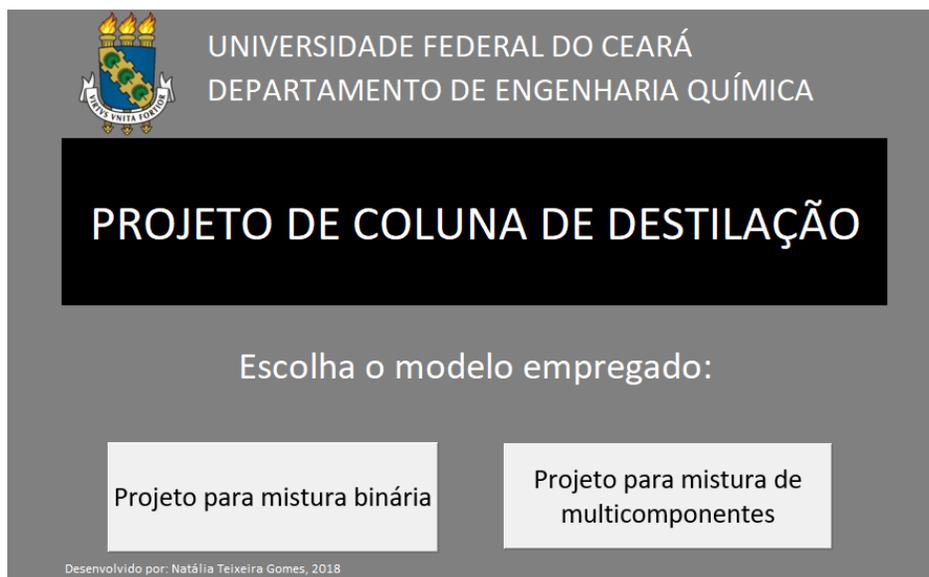
$$\frac{N_{retif}}{N_{esgot}} = \left[\frac{z_{HK,F}}{z_{LK,F}} \cdot \left(\frac{x_{LK,W}}{x_{HK,D}}\right)^2 \left(\frac{W}{D}\right) \right]^{0,206} \quad (24)$$

3. METODOLOGIA

Os métodos de McCabe-Thiele e FUG (ou *shortcut*) foram utilizadas no desenvolvimento de um projeto didático de uma coluna de destilação utilizando o Excel. No desenvolvimento do programa, apenas as células que são de importância para inserir os dados iniciais estão desbloqueadas, de forma a não alterar as fórmulas utilizadas. Além disso, existem validações de dados para que o usuário coloque apenas valores fisicamente condizentes. Por exemplo, em casos de composição molar, o valor a ser inserido deve estar entre 0 e 1. Outra vantagem do programa é que existe um banco de dados em que o sistema acessa os valores das constantes para Equação de Antoine e a temperatura de ebulição dos componentes envolvidos no processo, mostrando esses valores na tabela de equilíbrio termodinâmico. Dessa forma, o trabalho do usuário de buscar esses valores em bibliografias especializadas é desnecessário, facilitando o projeto. O banco de dados possui 468 componentes, os quais o usuário da planilha consegue visualizar quando vai preencher os dados iniciais para o projeto.

Em relação ao tipo de metodologia aplicado no projeto, o usuário terá a opção de escolher a partir do tipo de mistura a ser separada, mistura binária ou com multicomponentes, conforme layout da Figura 7. Ao se selecionar misturas binárias, a aba para o cálculo utilizando o método de McCabe-Thiele irá abrir. O mesmo acontece se for selecionado mistura de multicomponentes, porém utilizando o método *shortcut*.

Figura 7 - Layout da Capa da modelagem no Excel.



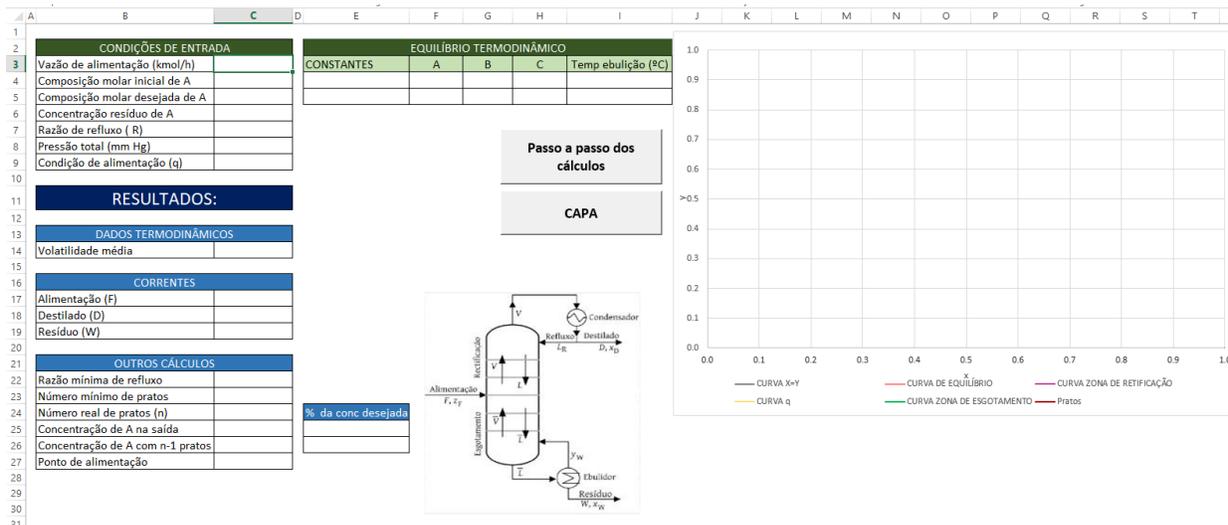
Fonte: autor, 2018.

3.1 McCabe-Thiele

Caso o usuário opte pelo projeto para uma mistura com dois componentes na entrada, será utilizada a metodologia de McCabe-Thiele, conforme mencionado na seção 2.4.

O usuário insere os dados de entrada da torre de destilação nas tabelas com cabeçalho verde da Figura 8. As condições necessárias são vazão de alimentação em kmol/h, composição molar inicial de A (o componente mais volátil), composição molar desejada de A na corrente do topo, composição de A na corrente de fundo, razão de refluxo, pressão total em mmHg e condição de alimentação conforme Tabela 1. Além disso, é necessário inserir os componentes na tabela de equilíbrio termodinâmico para que a modelagem busque as constantes utilizadas na Equação de Antoine e a temperatura de ebulição dos mesmos. Quando todos os dados são inseridos de forma correta, os resultados aparecem nas tabelas com cabeçalho azul e o gráfico de McCabe-Thiele é plotado do lado direito da Figura 8.

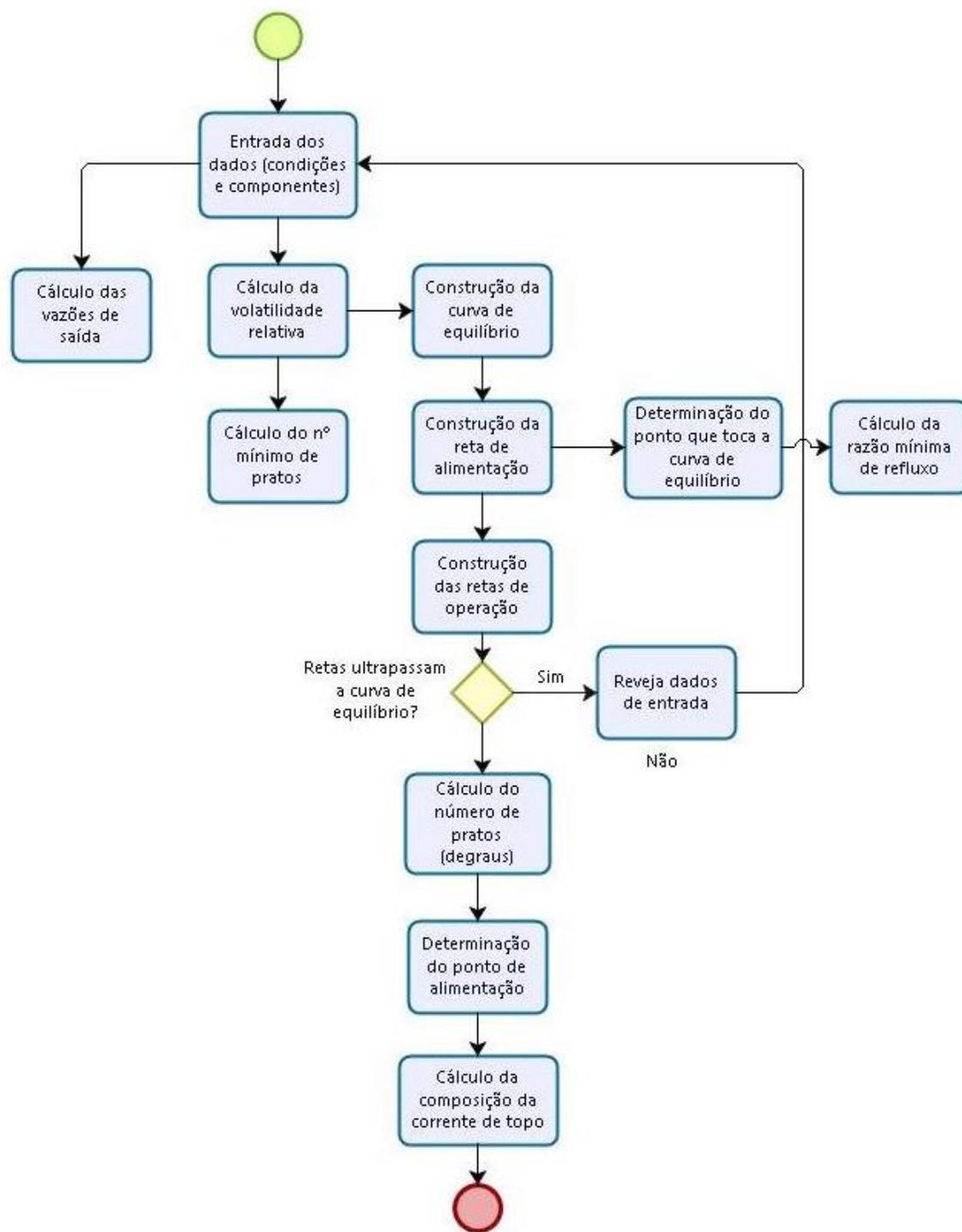
Figura 8 - Layout da página de dados



Fonte: autor, 2018

O procedimento de cálculo utilizado está representado pelo fluxograma de processo da Figura 9. Nota-se que o processo se inicia no ponto verde e vai seguindo diversos passos para a conclusão do projeto. Além disso, alguns passos são divididos em dois, pois o mesmo valor encontrado é utilizado para dois cálculos diferentes. Um exemplo disso é o cálculo da volatilidade média, que é utilizado tanto para a construção da curva de equilíbrio no gráfico, quanto para o cálculo de número de pratos mínimos. O processo se encerra no ponto vermelho da Figura 9.

Figura 9 - Processo de resolução utilizando McCabe-Thiele.



Fonte: autor, 2018

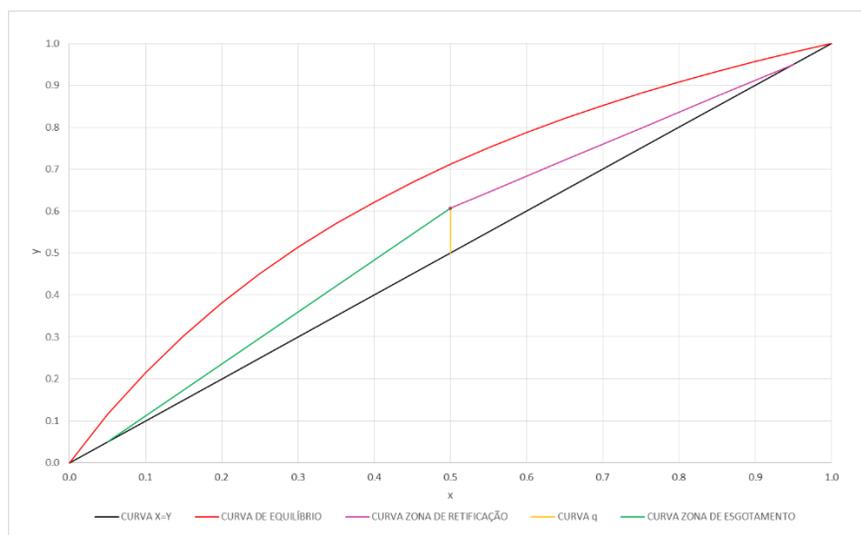
No início do processo da Figura 9, calculou-se a volatilidade relativa dos componentes. Para isso, utilizou-se a Equação de Antoine, para o cálculo da pressão dos componentes *A* e *B* em diversas temperaturas, iniciando com a temperatura de ebulição do componente mais volátil até a temperatura de ebulição do outro componente. Com os valores da pressão, a volatilidade relativa em cada temperatura é calculada, através da equação 5. No fim, é feito uma média com todas as volatilidades, dando o resultado final.

Paralelamente e utilizando os dados de entrada, foi realizado o balanço mássico global do sistema torre, ebulidor e condensador. A corrente de entrada é a de alimentação e as correntes de saída são de destilado e de resíduo. Resolvendo um sistema com duas incógnitas, utilizando as Equações 7 e 8, encontra-se as correntes na tabela da Figura 8.

Para o preenchimento da tabela de outros cálculos, fez-se necessário o desenho do diagrama de McCabe-Thiele. Utilizou-se, então, a equação 6 e a volatilidade relativa para desenhar a curva de equilíbrio com x variando de 0 a 1. Em seguida, plotou-se a diagonal, na qual x é igual a y , variando de 0 a 1. Para a curva de alimentação, utilizou-se o valor de q inserido pelo usuário como variável de entrada e a equação 15. Importante ressaltar que, em caso de a alimentação ser líquido no ponto de bolha, ou seja, q igual a 1, a equação 15 não é utilizada, pois a curva é uma reta vertical partindo do valor de x de alimentação até a tocar a curva de equilíbrio. Portanto, x é considerado constante e é utilizado a equação 6 (equação da curva de equilíbrio) para se encontrar o valor de y .

A linha de operação para zona de retificação inicia-se no ponto em que x é a concentração de saída do componente *A* na corrente de topo e y é igual a x . Para se encontrar os demais pontos utilizado de forma a traçar a reta, utiliza-se a equação 11. Quando essa reta encosta na curva de alimentação (ou linha q), é então determinado o ponto de alimentação na torre e o início da zona de esgotamento. Da mesma maneira, a linha de operação para a zona de esgotamento inicia no ponto de alimentação e finaliza no ponto em que x é a concentração de *A* na corrente de fundo da torre de destilação e y é igual a x . Com as curvas plotadas, o diagrama de McCabe-Thiele fica representado conforme Figura 10. Importante observar se o ponto em que as retas se encontram não está acima da curva de equilíbrio, pois nesse caso, a separação não é possível.

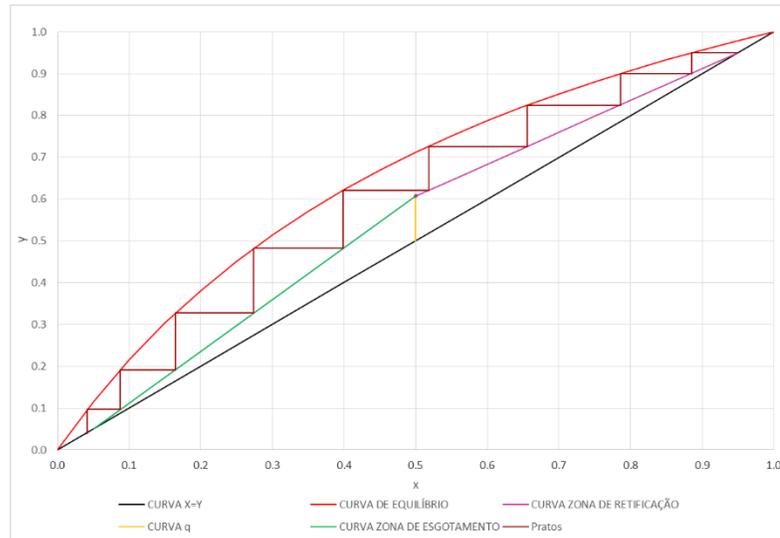
Figura 10 - Exemplo de diagrama de McCabe-Thiele



Fonte: autor, 2018.

Através do gráfico gerado conforme Figura 10, o número de pratos pode ser determinado através da construção do diagrama de degraus, conforme mencionado na seção 2.4.4. Em termos de modelagem, primeiro determinou-se, o coeficiente angular e linear das duas retas de operação e utilizou-os, assim como a equação da curva de equilíbrio, equação 6, para se determinar as linhas verticais e horizontais que formam os degraus. Na linha horizontal, considera-se o y como constante e calcula-se o valor de x em que esse valor de y toca a curva de equilíbrio. Na linha vertical, utiliza-se o valor de x , encontrado no passo anterior, para se achar o valor de y que foi determinado pelas equações das retas de operação. Um importante ponto a ser observado é que foi utilizado uma formatação condicional para que o sistema saiba qual área da torre está sendo calculado o y da curva de operação, zona de retificação ou zona de esgotamento. Para isso, utilizou-se o valor do ponto de alimentação como referência na condicional. O modelo consegue projetar o número de pratos até num máximo 50, devido a tabela para concentração em cada prato está limitado a esse valor. Entretanto, tal configuração de coluna está viável para fins didáticos. A Figura 11 representa um diagrama de McCabe-Thiele com os degraus.

Figura 11 - Diagrama de McCabe-Thiele com degraus



Fonte: autor, 2018.

O prato em que ocorre a alimentação é determinado pelo número do degrau em que o ponto em que as retas de operação e da condição de alimentação se tocam. No caso do exemplo plotado na Figura 11 o prato de alimentação é o 5°. Na simulação, foi utilizado a função condicional para se determinar o prato de alimentação. Quando o valor de x é menor que a composição de A na alimentação (determinado pelo condição inicial inserida pelo usuário), o número do prato é referenciado na tabela de resultados.

O cálculo para o número mínimo de pratos foi feito através da equação 18 e pode ser feito após se encontrar o valor da volatilidade média, conforme fluxograma da Figura 9. Para a razão mínima de refluxo, calculou-se o ponto em que a curva da condição de alimentação toca a curva de equilíbrio, pois será quando o número de pratos irá tender a infinito. Esse ponto possui as coordenadas x' e y' utilizadas na equação 17.

Além de calcular as variáveis necessárias para o projeto de uma coluna de destilação, a modelagem fornece ao usuário qual será a concentração de saída do componente A caso a torre possua o número de pratos necessários. Como o número de pratos é sempre um número inteiro, pois não se pode ter pratos parciais, foi adicionado o resultado da concentração caso a torre possua $n - 1$ pratos, onde n é o número de pratos para atingir a concentração desejada ou mais.

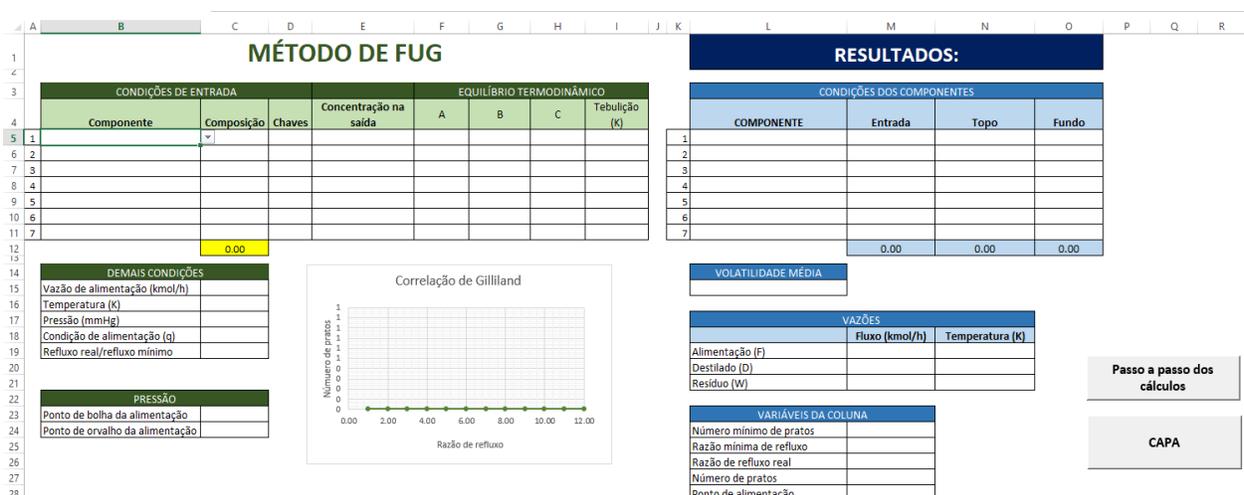
Foi desenvolvido também um memorial de cálculo para que o usuário consiga visualizar todos os passos necessários na construção do diagrama de McCabe-Thiele e, por consequência, o projeto de uma coluna de destilação, conforme mostrado no Apêndice A. É interessante que, além da explicação didática, o usuário pode acessar aos valores utilizados na construção do diagrama, caso haja alguma dúvida.

3.2 Fenske-Underwood e Gilliland

Caso o projeto para a torre de destilação contenha mais de 2 componentes, o aluno escolhe a opção para o projeto de multicomponentes. Diferentemente de McCabe-Thiele em que se faz necessário a análise em gráfico, Fenske, Underwood e Gilliland desenvolveram equações numéricas para o projeto de multicomponentes.

A Figura 12 representa o layout da página inicial para o projeto de torre de destilação utilizando o método de FUG. O usuário entra com os dados nas tabelas verdes e os resultados são plotados nas tabelas azul. A Figura 13 está representando o processo de cálculo para tal método.

Figura 12 - Layout da página para projeto utilizando o método de FUG



Fonte: autor, 2018.

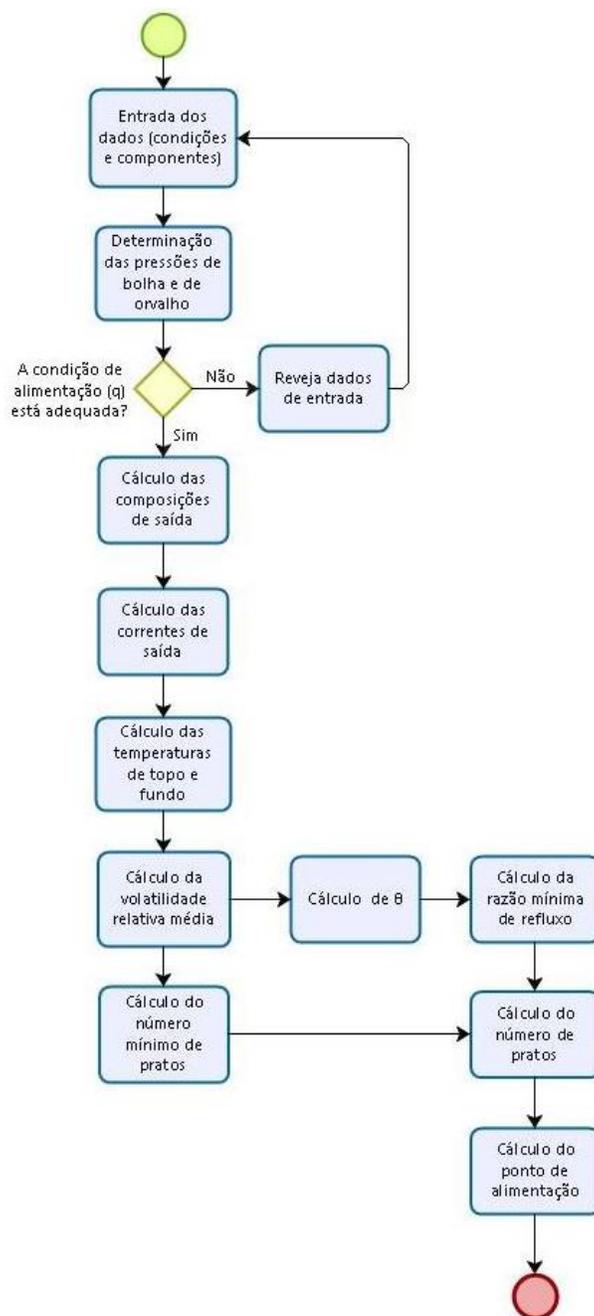
Para o preenchimento correto dos dados, é necessário que o usuário defina quais serão os componentes-chave leve e chave pesado e suas composições molares nas correntes de topo e de fundo, respectivamente. Da mesma forma que foi feito para McCabe-Thiele, existe uma validação de dados para que os valores possuam sentido fisicamente. O componente chave leve não deve ser o último componente adicionado na tabela, assim como o componente chave pesado não deve ser o primeiro, visto que os mesmos devem estar presentes tanto na corrente de topo, quanto na corrente de fundo. Ambos devem estar no meio dos componentes e os componentes estarem organizados na tabela em ordem crescente de volatilidade. Os componentes-chave devem possuir volatilidade adjacentes. Isso se faz necessário, pois para o cálculo da metodologia e a aplicação no sistema, não se pode ter componentes que possuam volatilidade intermediária, ou seja, esteja entre o componente-chave leve e o componente-chave pesado. Foi utilizado a validação de dados para que essas condições sejam atendidas, entretanto, é de extrema importância que o usuário tenha um conhecimento prévio do projeto para que os resultados gerados sejam condizentes com o necessitado.

Na Figura 13 está representado o processo de cálculo para o método de FUG. Observou-se que o processo é mais linear que McCabe-Thiele. Entretanto, como a temperatura não é considerada constante ao longo da torre, fez-se necessário o uso de equações iterativas para a resolução dos problemas. Essas interações são encontradas tanto para o cálculo das temperaturas de topo e fundo quanto para o cálculo do θ , parâmetro utilizado na equação de Underwood.

Conforme visto na Figura 12, o primeiro passo no modelo é o cálculo da pressões no ponto de bolha e no ponto de orvalho da mistura que é alimentada na torre. Esse cálculo é de extrema importância para que o valor da condição de alimentação seja condizente com a pressão de entrada. Ou seja, caso a pressão inicial esteja entre as pressões calculadas, entende-se que a alimentação está vaporizada parcialmente, tendo um valor de q entre 0 e 1. Caso a pressão seja igual a pressão do ponto de bolha, o valor de q deve ser 1 e caso seja igual a pressão do ponto de orvalho, q deve ser 0. Para realizar esse cálculo, a simulação calcula a pressão parcial de vapor de cada componente, baseado nas suas constantes termodinâmicas e sua composição molar inicial, através da Equação de Antoine (equação 1) e das equações da pressão parcial para o ponto de orvalho e no ponto de bolha, utilizando as equações 2 e 3, respectivamente. A soma de todas as pressões parciais resulta na pressão total da mistura. Quando são inseridos todos os dados de entrada, a

modelagem também retorna para o usuário qual a condição de alimentação e que valor deve ser de q , de forma a auxiliar no projeto.

Figura 13 - Procedimento de cálculo para o método de FUG



Após a análise da pressão, foi feita uma análise da distribuição dos componentes nas correntes de topo e de fundo, de forma a se calcular as vazões de saída. Os componentes mais voláteis que o componente-chave leve, ou seja, que possui temperatura de ebulição menor do que o de referência, sai completamente na corrente de topo da torre de destilação. O mesmo comportamento acontece para os componentes menos voláteis que o componente-chave pesado, eles saem completamente na corrente de fundo. Em relação aos componentes-chave, o cálculo foi feito baseado na composição que o usuário da modelagem inserir como dados de entrada. Por exemplo, caso ele queira que 95% do componente chave leve saia na corrente de topo, o cálculo para o balanço de massa dessa corrente será baseado em 95% da quantidade mássica de entrada na torre. O mesmo ocorre para o componente-chave pesado na corrente de fundo. O usuário deve inserir qual a composição ele quer que ambos componentes saiam nas suas respectivas correntes de maior concentração. Em seguida, é feito o balanço de massa global da torre, calculando quanto sai em cada extremidade.

A partir da concentração molar de cada componente, calculou-se a temperatura de saída de ambas correntes. Para isso, utilizou-se a Equação de Antoine isolando a variável temperatura. A temperatura foi, então, calculada para cada componente da mistura e a soma foi considerada como a temperatura da corrente como um todo. Entretanto, para esse tipo de cálculo, faz-se necessário o uso de interações para minimizar os erros. A partir da temperatura encontrada, calcula-se a pressão de cada componente, utilizando a Equação de Antoine, e o coeficiente de distribuição. Esse coeficiente foi utilizado para calcular a composição do componente e sua derivada. A soma da derivada é o erro, calculando então a nova temperatura utilizando a equação 24.

$$T_n = T_o - \frac{P(T_n)}{P'(T_n)} \quad (25)$$

Com a temperatura final encontrada em que o erro poderia ser desconsiderado, o coeficiente de distribuição foi calculado para os componentes-chave em ambas as temperaturas utilizando a equação 19. Com os valores de K_i definidos, a volatilidade relativa entre o componente chave leve e o componente chave pesado foi também calculada para ambas temperaturas, sendo a razão entre ambos valores de K . É feito então uma média das volatilidades através da equação 26. Esse passo é de extrema importância, pois a volatilidade é diferente quando se altera a temperatura, portanto, se for utilizado apenas os valores de entrada para o cálculo, o valor para volatilidade relativa média pode ser divergente, causando erros no projeto.

$$\overline{\alpha_{LK,HK}} = \sqrt[2]{(\alpha_{LK,HK})_{\text{fundo}} * (\alpha_{LK,HK})_{\text{topo}}} \quad (26)$$

Com a volatilidade relativa média definida, a equação de Fenske foi utilizada para calcular o número mínimo de pratos para a configuração de mistura inserida pelo usuário da modelagem. Esse equação inclui o refeedor como número de estágio, portanto, para o cálculo do número de pratos no interior da torre, o estágio do refeedor deve ser desconsiderado. O aluno deve se atentar a isso ao se comparar os resultados.

Para o cálculo da razão mínima de refluxo utilizando a equação de Underwood, utilizou-se a equação 21. Entretanto, visto que o lado esquerdo da equação é um somatório, o número de raízes para θ depende do número de componentes na mistura. Uma mistura de “ n ” componentes possui “ n ” raízes. Além disso, não se é possível isolar o θ ao se realizar o cálculo manual, necessitando então de interações. O valor de θ segue uma condição em que ele deve ser maior que 1 e menor que a volatilidade relativa média entre os componentes-chave. Dessa forma, na modelagem, definiu-se o valor de θ como um valor bem próximo de 1 para um valor inicial. Foram feitas então um número máximo de 50 interações para se encontrar o valor de θ . Em casos de erro menor que 0,001%, o valor de θ não é definido. Entretanto, foram feitos vários experimentos validando que as 50 interações são suficientes para esse cálculo. Com o valor de θ definido, foi utilizado a equação 22 para o cálculo da razão mínima de refluxo. Essa equação é mais simples, pois todos os parâmetros inclusos no somatório são conhecidos, fazendo-se necessário apenas isolar o valor de R_{\min} na equação. Esse valor é então multiplicado pela razão de refluxo real pela razão mínima que foi inserida pelo usuário no começo da modelagem.

Por fim, para o número de pratos real e para o ponto de alimentação, são utilizadas as equações 23 e 24. Além da fórmula utilizada, o gráfico da correlação de Gilliland foi desenhado de forma a verificar o comportamento do número de pratos baseado na razão de refluxo. Para o ponto ótimo de alimentação a relação empírica de Kirkbride (equação 24) foi utilizada. Nessa equação é encontrado a razão entre o número de pratos na zona de retificação pelo número de pratos na zona de esgotamento. Entretanto, como sabe-se que o número total de pratos, calculado pela correlação de Gilliland, é a soma de ambos os valores, tem-se duas equações com duas incógnitas, sendo facilmente resolvido o sistema.

Além de ter sido seguido todos os passos mencionados para o projeto de uma coluna de destilação utilizando a metodologia *shortcut* (ou método de FUG), foi desenvolvido na modelagem um memorial de cálculo para que o usuário possa acessar todos os cálculos relacionados ao projeto e os valores obtidos em cada etapa. O passo a passo desse memorial, conforme descrito acima, está representado no Apêndice B deste trabalho.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Validação de dados

De forma a validar se a modelagem retorna valores corretos para o projeto da coluna de destilação, utilizou-se dois exemplos resolvidos de livros que abordam a temática. Um exemplo foi extraído do livro de Warren L. McCabe et al (2005), página 683, para a utilização de McCabe-Thiele. Outro exemplo foi extraído do mesmo livro, página 750, para a metodologia *shortcut*.

Além da resposta nos próprios exemplos dos livros, foi utilizado o *website* Checalc.com como mais uma ferramenta para comparar os valores. Importante lembrar que, apesar de existir programas e *websites* que já realizem esse projeto, o modelo desenvolvido traz a vantagem de ser *offline* e não precisar de conhecimento prévio de programação.

4.2 McCabe-Thiele

O exercício proposto está numerado como 21.2 e possui o seguinte enunciado, conforme McCabe (2005) e tradução pelo autor,

Uma coluna de destilação fracionada contínua está projetada para separar 30.000 kg/h de uma mistura 40% massa de benzeno e 60% massa de tolueno em um produto contendo 97% massa de benzeno e um produto na corrente de fundo contendo 98% massa de tolueno. A razão de refluxo

é de 3,5 mols para 1 mol de produto, respectivamente. Benzeno e tolueno possuem uma volatilidade relativa de 2,5. A alimentação está no seu ponto de bolha à 95°C e 1 atm. (a) Calcule o número de mols nas correntes de topo e de fundo. (b) Determine o número de pratos ideais e a posição de alimentação caso, (i) a alimentação é um líquido no ponto de bolha; (ii) a alimentação é uma mistura de 2/3 de vapor and 1/3 de líquido.

No caso apresentado, o primeiro passo é se atentar que a vazão de entrada e as composições estão em unidade de massa. No projeto os valores já devem estar em unidade de mol, portanto, o usuário deve fazer os cálculos manualmente para inserir na planilha.

Para transformar as composições em fração molar, faz-se necessário dividir pela massa molar dos componentes, sendo 78 g/mol para o benzeno e 92 g/mol para o tolueno. Fazendo então os cálculos para correntes de entrada e saída através das equações 26 e 27. O benzeno é o componente mais volátil da mistura, pois ele sai em maior quantidade na corrente de topo, sendo o componente de referência para os cálculos. Além disso, o cálculo da vazão de entrada é feito dividindo a massa pelo peso molecular médio, levando em consideração as composições de entrada, conforme equação 28.

$$XF = \frac{\frac{40}{78}}{\frac{40}{78} + \frac{60}{92}} = 0,44 \quad (26)$$

$$XD = \frac{\frac{97}{78}}{\frac{40}{78} + \frac{60}{92}} = 0,974 \quad (27)$$

$$XF = \frac{\frac{2}{78}}{\frac{40}{78} + \frac{60}{92}} = 0,024 \quad (28)$$

$$F = \frac{3000 \cdot 100}{\frac{100}{\frac{40}{78} + \frac{60}{92}}} = 34,965 \text{ mol/h}$$

Para o primeiro item do exemplo, considerou-se a alimentação como uma mistura líquida no ponto de bolha. Então, ao se inserir os dados de entrada conforme Tabelas 2 e 3, os valores das constantes termodinâmicas são localizados no próprio Excel e o diagrama de McCabe-Thiele é plotado, conforme Figura 14. O banco de dados extraído do *website* Checalc.com está em inglês,

dessa forma a nomenclatura dos componentes devem ser escritas dessa forma. Caso o usuário não saiba o nome, o mesmo pode ser encontrado pela lista que aparece ao se selecionar a célula.

Tabela 2- Dados de entrada inseridos no sistema

CONDIÇÕES DE ENTRADA	
Vazão de alimentação (kmol/h)	34965
Composição molar inicial de A	0,44
Composição molar desejada de A	0,974
Concentração resíduo de A	0,026
Razão de refluxo (R)	2,50
Pressão total (mm Hg)	760
Condição de alimentação (q)	1

Fonte: autor, 2018.

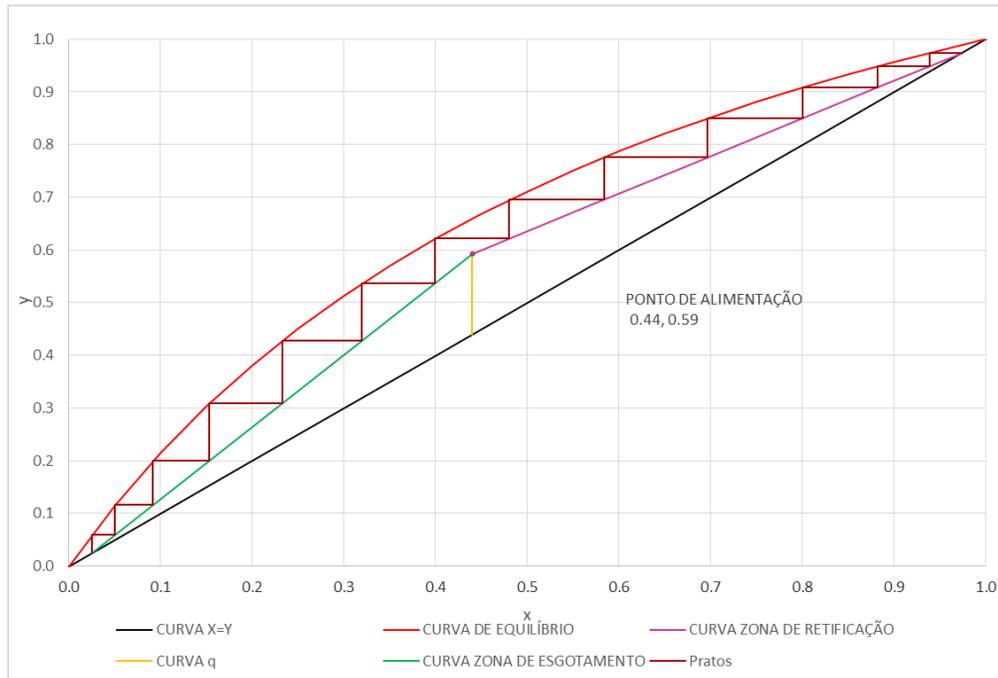
Tabela 3 - Dados de equilíbrio termodinâmico buscados na modelagem

EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO				
CONSTANTES	A	B	C	Temp ebulição (°C)
Benzeno	15,90	2788,51	-52,36	353,30
Tolueno	16,01	3096,52	-53,67	383,80

Fonte: autor, 2018.

O primeiro item do exercício proposto pede as vazões de entrada e de saída na torre de destilação e no item (b) é solicitado o número de pratos ideais e a posição de alimentação. Todos esses resultados e outros que fazem parte de um projeto para uma coluna de destilação está apresentado na Tabela 4, conforme calculado pelo modelo.

Figura 14 - Diagrama de McCabe-Thiele para o exemplo



Fonte: autor, 2018.

Tabela 4 - Resultados encontrados na modelagem

RESULTADOS:		
DADOS TERMODINÂMICOS		
Volatilidade média	2,468	
CORRENTES		
Alimentação (F)	34965	
Destilado (D)	15269,53	
Resíduo (W)	19695,47	
OUTROS CÁLCULOS		
Razão mínima de refluxo	1,43	
Número mínimo de pratos	7	
Número real de pratos (n)	13	% da concentração desejada
Concentração de A na saída	0,975	100,1%
Concentração de A com n-1 pratos	0,949	97,5%
Ponto de alimentação	7	

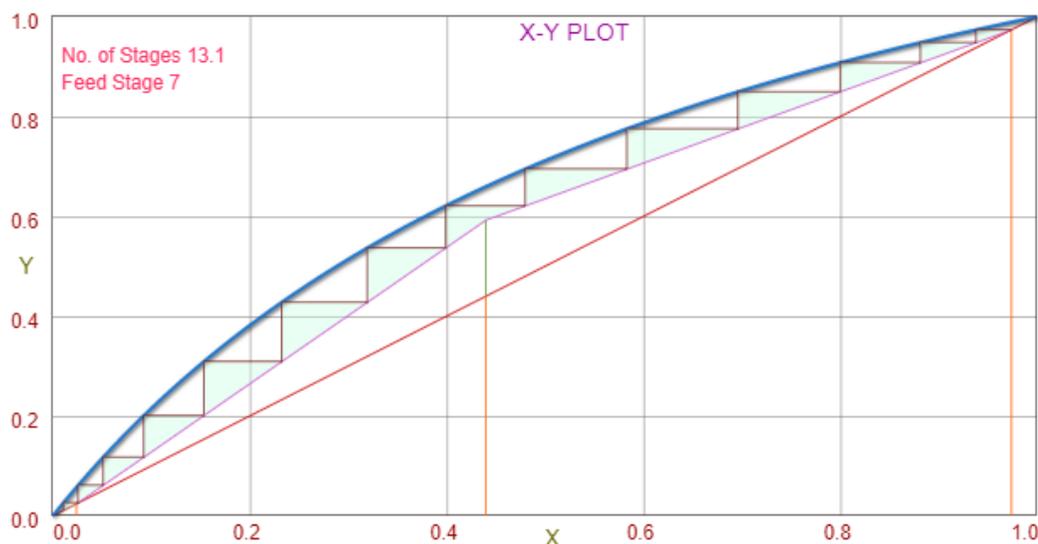
Fonte: autor, 2018.

Com isso, observou-se que, para as condições dada, o número mínimo de prato é 7 e a razão mínima de refluxo 1,43. Além disso, o número de pratos necessários para que se separe a mistura até atingir 0,975 de benzeno na corrente de topo, é de 13 pratos. O prato de alimentação é o sétimo prato. Portanto, os resultados principais para a configuração da torre de destilação nessa condição foi projeto utilizando a modelagem desenvolvida.

Importante ressaltar que, apesar do enunciado oferecer a volatilidade média da mistura, o modelo a calculou utilizando a pressão de entrada e as constantes de equilíbrio, facilitando ainda mais o trabalho do aluno para resoluções de projetos mais complexos. Fazendo os arredondamentos necessários para uma casa decimal, o valor encontrado foi condizente com o enunciado que afirmou que a volatilidade relativa é de 2,5.

Ao se inserir os mesmos resultados no *website* Checalc.com como mais um meio de validação dos dados, obteve-se os resultados da Figura 15. Na qual o número de estágios é 13.1 e o prato de alimentação é o 7º.

Figura 15 - Gráfico plotado para o exemplo no website Checalc.com



Fonte: autor, 2018.

Na Tabela 5 está apresentado os valores para as três resoluções encontradas, para o modelo no Excel, a resolução do livro e a resposta no website. Primeiramente, observa-se que a modelagem

desenvolvida nesse trabalho é a que apresenta os resultados mais complexos para variados projetos de torre de destilação, pois, além de apresentar os valores pedidos no exemplo, apresenta o número mínimo de pratos, a razão mínima de refluxo e a concentração de saída no n -ésimo prato e no prato $n-1$, de forma que o projetista consiga avaliar a % de pureza que sai no prato imediatamente anterior para se atingir a concentração desejada.

Tabela 5 - Resultados das fontes utilizadas e erro

RESULTADO	EXCEL	LIVRO	WEBSITE	% DIFERENÇA LIVRO	% DIFERENÇA SITE
Razão mínima de refluxo	1,43	-	-	-	-
Número mínimo de pratos	7,11	-	-	-	-
Número real de pratos (n)	13,00	12	13,1	8%	-1%
Concentração de A na saída	0,99	-	-	-	-
Concentração de A com n-1 pratos	0,97	-	-	-	-
Ponto de alimentação	7	7	7	0%	0%

Fonte: autor, 2018

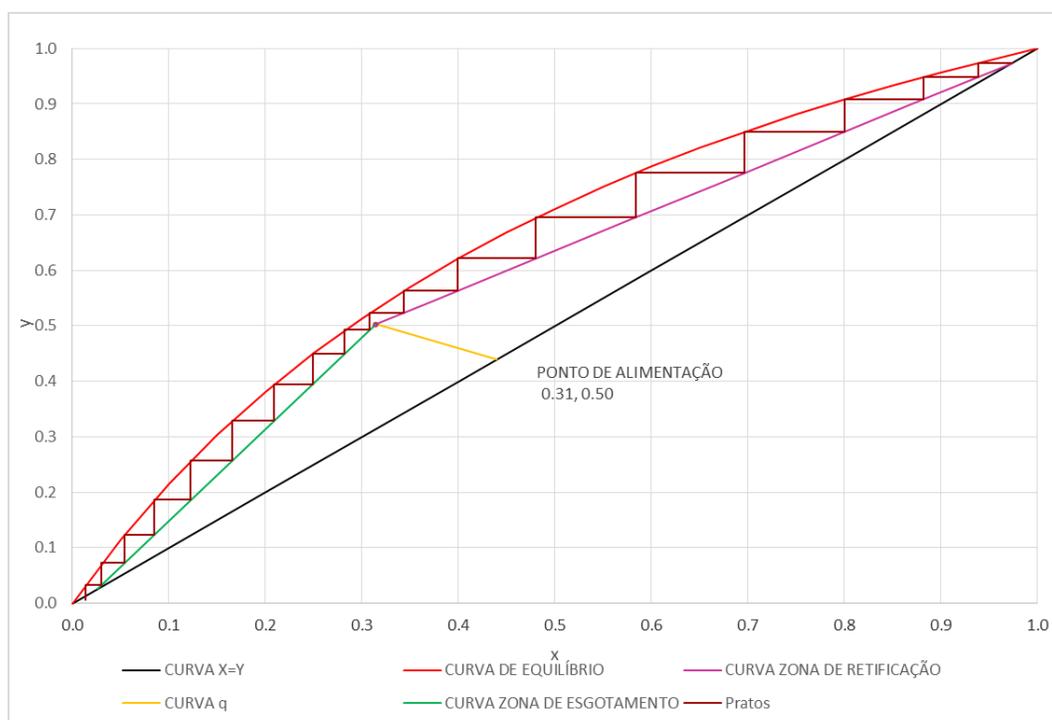
Em relação aos valores, observa-se que o ponto de alimentação está condizente para todos os três métodos calculados, dando um erro de 0%. Para o número real de pratos, houve um erro de 8% da modelagem em relação a resolução do livro e de -1% em relação ao *website* Checalc.com. Para o website, o erro pode ser desconsiderado, visto que o número de pratos deve ser um valor inteiro, pois não se pode colocar parte de um prato na torre de destilação. Apesar de ter sido usado 3 algarismos significativos, essa pequena diferença ocorreu devido alguns arredondamentos na volatilidade relativa, que foi considerada como 2,468, sem adicionar as demais casas decimais. Em relação ao erro para o livro, o fator que pode ter sido considerado é que o diagrama da curva de equilíbrio já havia sido plotado no enunciado da questão, não sendo condizente com o diagrama da modelagem. Essa diferença na curva de equilíbrio faz com que os degraus que determinam os pratos sejam maiores, necessitando de uma quantidade menor até chegar na composição do componente mais volátil na corrente de fundo.

Além disso, o número de pratos calculado, considera o refeedor como um prato, pois o mesmo é considerado como um estágio no processo. Outro ponto que deve ser observado é que

dificilmente a fração molar do componente mais volátil será condizente, com todos os algarismos significativos, como a concentração que foi colocada como variável de entrada. Entretanto, como o número de pratos é um valor inteiro, alguns pequenos ajustes podem ser realizados na entrada ou na concentração desejada, para se obter o valor exato. Na modelagem, foi utilizado a função de arredondamento para sempre se obter um valor fisicamente viável.

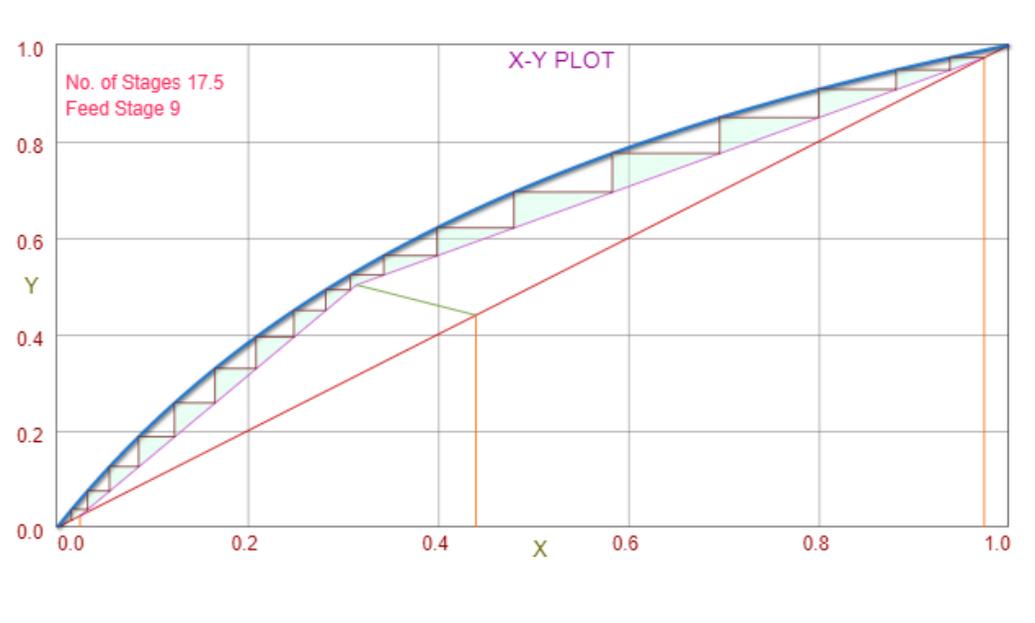
Para o item b, no qual a condição de alimentação é de 1/3 de vapor, o valor de q nas condições de entrada é alterado para esse valor. Com isso, obteve-se o resultado da modelagem desenvolvida na Figura 16 e no Checalc.com na Figura 17. Além disso, os resultados numéricos e comparação com a modelagem estão na Tabela 6.

Figura 16 - Resultado do item (b) plotado no Excel



Fonte: autor, 2018.

Figura 17 - Resultado do item (b) plotado no Checcalc.com



Fonte: autor, 2018.

Tabela 6 - Resultados do item b nas diversas fontes e erro

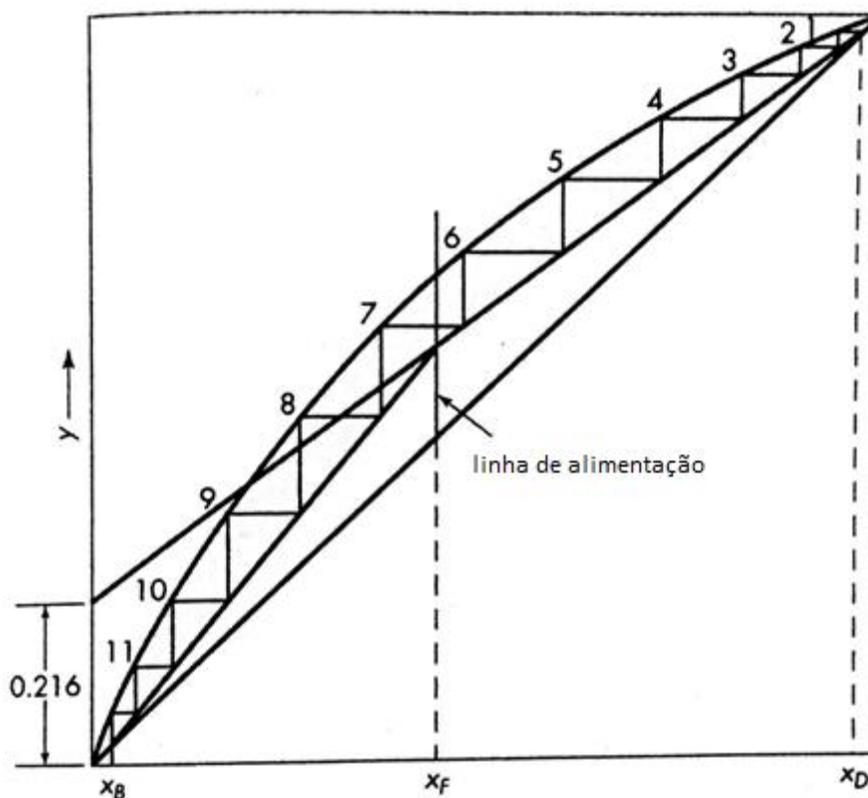
RESULTADO	EXCEL	LIVRO	WEBSITE	% DIFERENÇA LIVRO	% DIFERENÇA SITE
Razão mínima de refluxo	2,17	-	-	-	-
Número mínimo de pratos	7,02	-	-	-	-
Número real de pratos (n)	18,00	12	17,5	33%	3%
Concentração de A na saída	0,99	-	-	-	-
Concentração de A com n-1 pratos	0,97	-	-	-	-
Ponto de alimentação	9	7	9	22%	0%

Fonte: autor, 2018.

Ao se alterar a condição de alimentação o erro do resultado da modelagem em relação ao resultado da resolução no livro foi ainda maior. Pela Figura 18 foi observado que a curva de equilíbrio desenhada na resolução de McCabe está bem distante das linhas de operação, não

necessitando de uma quantidade tão maior de pratos. O mesmo observa-se para o ponto de alimentação, como o número de pratos é menor, no 7º prato a linha de alimentação cruza. Entretanto, em relação ao site, observou-se o comportamento bem similar. A diferença do número de pratos é justificada pelo arredondamento desse valor na modelagem para que se obtenha no mínimo 100% da composição requerida pelo projetista. Para um caso em que se tenha 17 pratos, a concentração de saída no topo é de 0,949, ou seja, 97,5% da requerida, não sendo suficiente. Dessa forma, em casos que a concentração mínima seja de 0,974, como informado, a torra precisa ter 18 pratos, incluindo o refeedor.

Figura 18 - Diagrama de McCabe-Thiele plotado no livro de McCabe



Fonte: McCabe, 2005.

Além disso, é possível observar que, quando se altera a condição de alimentação, as variáveis de projeto mudam bruscamente. Nesse caso, a condição mais adequada para se economizar na construção da coluna de destilação, seria alimentar a mesma com uma mistura

líquida no seu ponto de bolha, visto que o número de pratos diminui em aproximadamente 30% do que se a alimentação for feita 1/3 vaporizada.

Uma das grandes vantagens da modelagem desenvolvida, é a rápida análise desse tipo de mudança quando se altera a condição de alimentação. Se o aluno estiver resolvendo o exercício manualmente, teria que ser desenhado o diagrama de McCabe-Thiele para ambos os casos, demandando muito tempo. Além disso, o aluno pode fazer diversos testes, alterando outras condições de entrada para ver em que impacta no projeto da torre de destilação. Um exemplo clássico de análise é na alteração da razão de refluxo, pois quanto maior for a razão de refluxo, menor o número de pratos necessário para a troca mássica, visto que a angulação das retas de operação diminuem.

4.3 Metodologia de FUG

Para validação do resultado encontrado na modelagem utilizando o método para mistura de multicomponentes, ou método *shortcut*, utilizou-se o exemplo resolvido 22.3 do livro de McCabe (2005), *Unit Operations of Chemical Engineering*, página 750 e tradução pelo autor.

O enunciado traduzido é o seguinte,

Deseja-se destilar uma mistura de 40% n-pentano, 30% n-hexano, 20% n-heptano e 10% n-octano a 1 atm com 95% de n-hexano e 5% de n-heptano na corrente a ser destilada. Qual a razão mínima de refluxo se a alimentação está no ponto de bolha?

Segundo o enunciado, os componentes chaves são n-hexano e o n-heptano, sendo o primeiro o componente chave leve. Dessa forma, foi-se inserido os dados no Excel, conforme Tabela 7 a seguir. Nota-se que existe um somatório para as composições de entrada dos componentes de forma que o usuário sempre coloque um somatório igual 1, visto que a composição deve ser um valor entre 0 e 1.

Tabela 7 - Dados de entrada para modelagem de misturas multicomponentes

	Componente	Composição	Chaves	Concentração na saída	A	B	C	Tebulição (K)
1	n-pentano	0,40			15,83	2477,07	-39,94	309,2
2	n-hexano	0,30	LK	0,95	15,83	2697,55	-48,78	341,9
3	n-heptano	0,20	HK	0,95	15,87	2911,32	-56,51	371,6
4	n-octano	0,10			15,94	3120,29	-63,63	398,8
		1,00						

Fonte: autor, 2018.

O primeiro passo na planilha de cálculo é calcular a pressão do ponto de bolha e do ponto de orvalho para a mistura de entrada, o resultado está na Tabela 8. Apesar da pressão de alimentação ser maior que a pressão do ponto de bolha, o que caracterizaria uma mistura parcialmente vaporizada, a condição de entrada é bem próxima da pressão da mistura no ponto de alimentação, podendo ser considerada como um líquido no ponto de bolha. É importante que o usuário faça essa análise crítica de forma a não distorcer os dados encontrados.

Tabela 8 - Pressão do ponto de bolha e de orvalho da mistura de alimentação em mmHg

PRESSÃO	
Ponto de bolha da alimentação	1529,46
Ponto de orvalho da alimentação	683,11

Fonte: autor, 2018.

Nas Tabelas 9 e 10 representam os resultados encontrados para o projeto da referida coluna de destilação. Na Tabela 9 encontra-se as condições dos componentes nas correntes de entrada e de saída e na Tabela 10 suas respectivas vazões, tais como a volatilidade relativa e as variáveis da coluna.

Tabela 9- Resultados das composições molares de entrada e saída da mistura

CONDIÇÕES DOS COMPONENTES				
	COMPONENTE	Entrada	Topo	Fundo
1	n-pentano	0,400	0,576	0,000
2	n-hexano	0,300	0,410	0,049
3	n-heptano	0,200	0,014	0,623
4	n-octano	0,100	0,000	0,328
		1,00	1,00	1,00

Fonte: autor, 2018.

Tabela 10 - Demais resultados encontrados na modelagem do Excel

VOLATILIDADE MÉDIA	
2,53	
VAZÕES	
	Fluxo (kmol/h)
Alimentação (F)	100
Destilado (D)	69,50
Resíduo (W)	30,50
VARIÁVEIS DA COLUNA	
Número mínimo de pratos	5
Razão mínima de refluxo	0,80
Razão de refluxo real	1,19
Número de pratos	12
Ponto de alimentação	7

Fonte: autor, 2018.

No referido exercício no livro foram encontradas composições similares para os componentes nas correntes de saída, tais como o resultado para a volatilidade relativa e razão de refluxo mínima. Em relação as demais variáveis da coluna, não foi possível comparar devido ao exercício não solicitar para o leitor. Entretanto, foi utilizado também o *website* Checalc.com de

forma a avaliar os demais valores. Os resultados e as comparações estão descritos nas Tabelas 11 e 12.

Tabela 11 - Resultados encontrados para composições em diversas fontes

RESULTADO COMPONENTE	EXCEL		WEBSITE		LIVRO	
	TOPO	FUNDO	TOPO	FUNDO	TOPO	FUNDO
n-pentano	0,09	0,00	0,09	0,00	0,09	0,00
n-hexano	0,89	0,01	0,89	0,01	0,89	0,01
n-heptano	0,01	0,87	0,01	0,87	0,01	0,87
n-octano	0,00	0,10	0,00	0,10	0,00	0,10

Fonte: autor, 2018.

Tabela 12 - Resultados encontrados em diversas fontes

RESULTADO	EXCEL	WEBSITE	LIVRO
Volatilidade média	2,47	2,47	2,48
Número mínimo de pratos	8	8	-
Razão mínima de refluxo	1,345	1,35	1,340
Número de pratos	16	16	-
Ponto de alimentação	9	9	-

Fonte: autor, 2018.

Para ambas comparações, os erros são considerados como praticamente 0, visto que apenas para volatilidade, que o erro é na segunda casa decimal e na razão mínima de refluxo que o erro é na terceira. Com isso, pode-se concluir que o projeto no Excel foi modelado corretamente, sendo satisfatório para o usuário.

Além disso, a planilha desenvolvida pode também colaborar para que o aluno analise os possíveis impactos causados quando se altera algum parâmetro de entrada do projeto. Esse impacto foi observado facilmente no exemplo utilizado para McCabe-Thiele, quando se alterou a condição de alimentação para 1/3 vaporizada, o sistema calculou rapidamente os resultados para a nova condição. Caso esse cálculo fosse feito manualmente, o aluno deveria fazer o diagrama para ambas as condições, gerando uma resolução bem mais trabalhosa e custosa.

5. CONCLUSÃO

Portanto, foi concluído de forma satisfatória o desenvolvimento e análise de uma ferramenta para modelagem de projeto de colunas de destilação de forma didática a fim de ajudar os alunos e professores do curso de engenharia química. A utilização do Excel como *software* mostrou-se adequado para tal modelagem, apresentando resultados condizentes dos exemplos desenvolvidos, tanto quando comparado aos resultados do livro quanto aos resultados do *website* utilizado. Além de trazer simplicidade para o ensino, o Excel mostrou-se como ferramenta prática e versátil.

6. SUGESTÕES

O presente trabalho utilizou apenas dois métodos para projeto de colunas de destilação. Entretanto, como sugestão para os próximos trabalhos, pode-se desenvolver modelagens para os demais processos e equipamentos estudados no curso de engenharia química, bem como outras metodologias para o cálculo de colunas de destilação, por exemplo, as equações de MESH. Tais desenvolvimentos podem ser propostos para os alunos, visto que trariam diferentes dificuldades das encontradas nesse trabalho, incentivando o raciocínio lógico e o conhecimento de programação e de destilação pelo aluno.

Além disso, devido a limitação do tempo e oferta da disciplina, fica como sugestão a validação da planilha junto aos alunos de Operações Unitárias III, através de exercícios propostos em sala de aula e pesquisas de satisfação da modelagem.

REFERÊNCIAS

BELTRAN, Maria Helena Roxo. **Destilação: a arte de “extrair virtudes”**. Química nova na escola, 1996. Disponível em < <http://qnesc.sbq.org.br/>>. Acessado em: 1 de maio de 2018.

CARVALHO, Julia Savant; DE MOURA, Luiz Fernando. **Método de McCabe-Thiele reverso para simulação de unidade de destilação multicomponente**. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA, 8., 2009, Uberlândia. São Paulo: UFScar. Disponível em: <<http://www.cobeqic2009.feq.ufu.br/>>. Acessado em: 15 de abril de 2018.

DE AZEVEDO, Edmundo Gomes; ALVES, Ana Maria. **Engenharia de Processos de Separação**. 3. ed. Portugal: Instituto Superior Técnico, 2013.

FERREIRA, M.C.; VIEIRA, F.T. **Diagnóstico do uso de softwares computacionais no ensino de Engenharia Química**. In: Semana da Engenharia Química da Universidade Federal do Espírito Santo, 5., 2017, Vitória. Vitória: UFES. Disponível em: < <http://www.proceedings.blucher.com.br/>>. Acessado em: 18 de abril de 2018.

JUNGES, J. J. **Avaliação de políticas de operação de colunas de destilação em batelada**. 2010. 37 f. Monografia (Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2010.

KISS, Anton Alexandru. **Advanced Distillation Technologies: Design, Control and Applications**. 1.ed. Nova Jersey: John Wiley and Sons, 2013. 1 p.

MALAVAZI, G. M.; MOTTA LIMA, O. C. **Método McCabe-Thiele determinação da razão de refluxo no projeto e operação de colunas com saída lateral na seção de retificação**. In: Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 10., 2014, Vassouras. Maringá: UEM. Disponível em: < <http://www.proceedings.blucher.com.br/>>. Acessado em: 1 de maio de 2018.

MARANGONI, Cintia. **Implementação de uma estratégia de controle com ação distribuída em uma coluna de destilação**. 2005. 104 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2005.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C. HARRIOT, P. **Unit Operation of Chemical Engineering**. 7. ed. Nova Iorque: Mc Graw Hill, 2005.

MONTORO, S. R. **Operações Unitárias Experimental II**. Notas de aula – Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia de Lorena – USP, Lorena, 2013. Disponível em: <<https://sistemas.eel.usp.br>>. Acessado em: 22 de abril de 2018.

MORIIZUMI, Alessandro. **Aplicação da metodologia de McCabe-Thiele na modelagem de uma coluna de destilação utilizando o software Excel**. 2012. 37 f. Monografia (Graduação em Engenharia Química) – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, 2012. Disponível em: <<http://bibliotecas2.eel.usp.br/monografias>>. Acessado em: 21 de fevereiro de 2018.

NETO, O. M. **Desafios da educação em engenharia: formação em engenharia, capacitação docente, experiências metodológicas e proposições**. Brasília: Associação Brasileira de Educação em Engenharia, 2014. Disponível em: <<http://www.ppgpe.eel.usp.br/>>. Acessado em: 22 de abril de 2018.

ORLANDO JÚNIOR, A. E. **Análise de desempenho de coluna de destilação contendo recheio estruturado**. 2007. 1213 f. Tese (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007. Disponível em: <<https://pt.slideshare.net/FbioAlves24/prh13-analisededesempenhodecolunasdedestilacao>>. Acessado em: 22 de abril de 2018.

ROITMAN, V. **Curso de formação de operadores de refinaria**. Petrobrás: Unicenp, Curitiba, 2002. Disponível em: <http://www.ebah.com.br/content/ABAAAUMoAE/operacoes-unitarias-petrobras>. Acessado em: 9 de maio de 2018.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J.; ROPER, D. K. **Separations processes principles**. 3 ed. Nova Jersey: John Wiley and Sons, 2011.

SILVA, A.C. **Destilação com retificação**. Notas de Aulas – Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia de Lorena – USP, Lorena, 2011. Disponível em: <<http://www.dequi.eel.usp.br/~acsilva/Retificacao.doc>>. Acessado em: 2 de maio de 2018.

TREYBAL, R. E. **Mass Transfer Operations**. 3. ed. Nova Iorque: Mc Graw Hill, 1981.

APÊNDICE A – MEMORIAL DE CÁLCULO PARA MCCABE-THIELE

A-1. Passo 1 do memorial de cálculo para McCabe-Thiele (fonte: autor, 2018).

EQUILÍBRIO TERMODINÂMICO				
CONSTANTES	A	B	C	Temp ebulição (°C)
0				
0				

CURVA DE EQUILÍBRIO	
x	y

DADOS TERMODINÂMICOS	
Volatilidade média	

Passo 1 - Curva de equilíbrio:

Através das constantes fornecidas e da temperatura de ebulição, calcula-se a pressão parcial de cada componente em questão em diversas temperaturas, desde a temperatura do componente mais volátil até a temperatura do componente menos volátil, utilizando a lei de Antoine. Após isso, calcula-se a volatilidade relativa para cada temperatura, utilizando a equação 2. Por fim, obtêm-se a média dessas volatilidades.

Lei de Antoine: $\log P^* = A - \frac{B}{C + T}$ (1)

Equação da volatilidade relativa: $\alpha = \frac{P a^*}{P b^*}$ (2)

OBS: esse passo pode não ser necessário, caso o aluno tenha o valor da volatilidade relativa.

Depois de se obter a volatilidade média, utiliza seu valor para os dados da curva de equilíbrio através da equação abaixo e variando o x de 0 a 1:

$$Y = \frac{\alpha \cdot x}{1 + (\alpha - 1) \cdot x}$$
 (3)

A curva é mostrada no gráfico 1, juntamente com a curva diagonal x=y.

1.000
0.900
0.800
0.700
0.600
0.500
0.400
0.300
0.200
0.100
0.000

x

0.000 0.100 0.200 0.300 0.400 0.500 0.600 0.700 0.800 0.900 1.000

— CURVA DE EQUILÍBRIO — CURVA X=Y

[Página Inicial](#) [Próximo](#)

A-2. Passo 2 do memorial de cálculo para McCabe-Thiele (fonte: autor, 2018).

Passo 2 - Curva de alimentação:

A curva de alimentação é que vai determinar em que prato é feita a alimentação dos componentes e é representada pela equação 4.

Curva de alimentação:
$$y = \frac{q}{q-1} \cdot x - \frac{1}{q-1} \cdot z_f \quad (4)$$

Onde z_f é a composição molar de entrada do componente A.

O valor de q na equação depende das condições em que os componentes entram na coluna de destilação, conforme mostrado na tabela 1.

Condições de alimentação	q
Líquido sub-resfriado	>1
Líquido no ponto de bolha	1
Líquido vaporizado parcialmente	$0 < q < 1$
Vapor no ponto de orvalho	0
Vapor superaquecido	<0

Além disso, o primeiro ponto da curva é sempre na reta $x=y$

CURVA q	
x	y

Página Inicial
Voltar
Próximo

A-3. Passo 3 do memorial de cálculo para McCabe-Thiele (fonte: autor, 2018).

Passo 3 - Curvas de retificação e de esgotamento:

A curva de retificação corresponde ao comportamento na zona acima do ponto de alimentação e está representada pela equação 5. Enquanto isso, a curva de esgotamento mostra o comportamento dos componentes na parte inferior da coluna (equação 6)

Curva de retificação:
$$y = \frac{R}{R+1} \cdot x - \frac{1}{R+1} \cdot xd \quad (5)$$

Onde:
xd: é a composição molar de A na corrente destilada.
R: razão de refluxo

Curva de esgotamento:
$$y = \frac{V+1}{V} \cdot x - \frac{1}{V} \cdot xb \quad (6)$$

Onde:
xb: é a composição molar de A na corrente residual.
Vb: razão de boil-up

O primeiro ponto da curva de esgotamento é *xb* e a curva para quando a mesma encontra a curva de alimentação. A curva de retificação inicia nesse ponto e para quando $x = xd$.

DADOS	
x	y
xd	0.00
R	0.00

CURVA ZONA DE ESGOTAMENTO	
x	y
CTE ZONA DE ESGOTAMENTO (y=ax+b)	
a	
b	

CURVA ZONA DE RETIFICAÇÃO	
x	y
CTE ZONA DE RETIFICAÇÃO (y = ax+b)	
a	0.000
b	0.000

Gráfico 3

— CURVA X=Y — CURVA DE EQUILÍBRIO — CURVA ZONA DE RETIFICAÇÃO
— CURVA q — CURVA ZONA DE ESGOTAMENTO

Página Inicial
Voltar
Próximo

A-4. Passo 4 do memorial de cálculo para McCabe-Thiele (fonte: autor, 2018).

PONTO DE ALIMENTAÇÃO		GRÁFICO DE PRATOS					
x	y	ZONA DO PRATO	Prato	x	y	x equilíbrio	y equilíbrio
PRATO DE ALIMENTAÇÃO							
Número de pratos							
CONCENTRAÇÃO DE SAÍDA							
x	y						

Passo 4 - Ponto de alimentação e número de pratos:

Através das constantes das curvas de retificação e de esgotamento, e sabendo que x é a concentração molar de A, encontrou-se o ponto de alimentação, conforme mostrado por um ponto vermelho no gráfico.

Calculou-se também o número de pratos necessários para se obter a concentração desejada e a concentração molar de cada prato, utilizando o método de Sorel-Lewis, seguindo os seguintes passos:

- 1) Partiu-se do ponto $x_d=x_d$ e calculou-se o valor de y utilizando as constantes da curva da zona de retificação;
- 2) Com esse valor de y , calculou-se então o ponto em que ele encontra na curva de equilíbrio;
- 3) Em seguida, com o valor de x encontrado, calculou-se o ponto em que encontra a curva da zona de retificação (novo valor de y);
- 4) O mesmo do passo 2 foi feito com o valor de y encontrado no passo 3 e os passos vão se repetindo.

Importante observar que, a partir do ponto em y se torna menor que o ponto de interseção das curvas de retificação e esgotamento, as constantes da curva de esgotamento devem ser utilizadas para o passo 3. Como é nesse ponto (ou prato) em que ocorre a alimentação, foi visto que o prato de alimentação era quando $y < y$ (interseção).

Os resultados são encontrados abaixo.

Gráfico 4

— CURVA $x=y$ — CURVA DE EQUILÍBRIO
 — CURVA ZONA DE RETIFICAÇÃO — CURVA q
 — CURVA ZONA DE ESGOTAMENTO — Pratos

Página Inicial Voltar Próximo

A-5. Passo 5 do memorial de cálculo para McCabe-Thiele (fonte: autor, 2018).

CONDIÇÕES DE ENTRADA		OUTROS CÁLCULOS	
xd	0	Razão mínima de refluxo	
xb	0	Número mínimo de pratos	

Passo 5 - Outros cálculos:

Número mínimo de pratos:

O número mínimo de pratos se dá quando a linha de operação é a linha de 45°, ou seja, a linha em que $x=y$. O cálculo do número mínimo de pratos se dá pela equação 7.

$$N = \frac{\ln\left[\frac{x_d \cdot (1 - x_b)}{x_b \cdot (1 - x_d)}\right]}{\ln(\alpha)} - 1 \quad (7)$$

Razão mínima de refluxo:

Quanto menor a razão de refluxo, maior a quantidade de pratos necessárias na torre, entretanto existe uma razão mínima de refluxo em que o número de pratos fica próximo de infinito, o cálculo é feito utilizando a equação 8. Graficamente mostrado no gráfico 5

$$R_{min} = \frac{x_d - y'}{y' - x'} \quad (8)$$

Onde:
 x' : x em que a reta de alimentação toca a curva de equilíbrio
 y' : y em que a reta de alimentação toca a curva de equilíbrio

Gráfico 5

— CURVA X=Y
— CURVA DE EQUILÍBRIO
— CURVA ZONA DE RETIFICAÇÃO
— CURVA ZONA DE ESGOTAMENTO
— CURVA q

Voltar **Página Inicial**

APÊNDICE B – MEMORIAL DE CÁLCULO PARA DESTILAÇÃO SHORTCUT

B-1. Passo 1 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 1 - Pressão de vapor e coeficiente de distribuição:

Através das constantes termodinâmicas fornecidas e da temperatura de alimentação, calcula-se a pressão de vapor parcial de cada componente envolvido utilizando as equações 1 e 2. Essa pressão considera a composição de cada item. O somatório das mesmas geram a pressão total do sistema.

Lei de Antoine:
$$\log P^* = A - \frac{B}{C + T} \quad (1)$$

Pressão de vapor de cada componente:
$$P_i^* = P^* \cdot x_i \quad (2)$$

Pressão do ponto de bolha para cada componente:
$$P_i^* = P^* / x_i \quad (3)$$

Depois de se obter a pressão de vapor de cada componente, calcula-se o coeficiente de distribuição utilizado a equação (3).

$$K_i = \frac{P_i^*}{P} \quad (4)$$

Onde P é a pressão total de alimentação.

O resultado está na tabela ao lado.

Componente	Composição (xi)	Mols	Pressão de vapor	Pressão de vapor da mistura	Coef. De distribuição (Ki)
		0.00			
		0.00			
		0.00			
		0.00			
		0.00			
		0.00			
		0.00			

[Página Inicial](#)

[Próximo](#)

B-2. Passo 2 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 2 - Distribuição dos componentes e correntes

A partir das composições iniciais, calcula-se a composição de topo e fundo de cada componente utilizando os seguintes pontos:

- 1) Os componentes não-chave que são mais voláteis que o componente chave leve, serão levados **completamente** para o topo da coluna;
- 2) Os componentes não-chave que são menos voláteis que o componente chave pesado, serão levados **completamente** para o fundo da coluna;
- 3) O componente chave leve será dividido entre as duas correntes. A composição desejada sai no topo da coluna e o restante no fundo;
- 4) Por fim, o componente chave pesado também é dividido entre as duas correntes. Da mesma forma, sua composição final determinada sai no fundo da coluna e o restante no topo.

Através dessa vazão (ou quantidade de mols), calcula-se a composição de cada componente nas correntes, utilizando a equação 6.

$$x_i = \frac{\text{Mols}(i)}{\text{Mols Total}} \quad (5)$$

Componente	ENTRADA		TOPO		FUNDO	
	Mols	x	Mols	x	Mols	x
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
CORRENTES	0.0		#N/A		#N/A	

Página Inicial

Voltar

Próximo

B-3. Passo 3 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 3 - Temperatura de topo e fundo

Com a composição de topo e fundo de cada componente, calculada no passo 2, estima-se a temperatura para cada um isolando o termo T da equação de Antoine (1).

$$T = \frac{B}{\log P^* + A} - C \quad (1)$$

Como a pressão utilizada é a pressão total, multiplica-se a temperatura encontrada pela composição de topo ou fundo, dependendo de qual corrente está sendo calculada.

$$T_i = T \cdot x_i \quad (6)$$

A temperatura da corrente é a soma para todos os componentes.

Com essa temperatura, utiliza-se novamente a lei de Antoine (1) para encontrar a pressão de vapor. Então, é calculado o erro dado pela pressão utilizada na equação 1 e a pressão encontrada no segundo passo. São feitas então **iterações**, para se encontrar a temperatura no topo e fundo da torre de destilação até que o erro seja desprezível.

Os resultados estão ao lado.

Componente	ENTRADA		TOPO		FUNDO	
	Mols	x	Mols	x	Mols	x
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
	0.00		#N/A	0.00	#N/A	0.00
CORRENTES	0.0		#N/A		#N/A	

Temperatura topo	#DIV/0!
Erro	#DIV/0!

Temperatura fundo	#DIV/0!
Erro	#DIV/0!

Página Inicial

Voltar

Próximo

B-4. Passo 4 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 4 - Volatilidade relativa:

Através das temperaturas encontradas, é então calculado o valor do coeficiente de distribuição utilizando a equação 4 para os componentes chave tanto topo quanto o fundo da coluna.

A volatilidade relativa é calculada para ambos extremos da torre, utilizando o coeficiente de distribuição conforme equação 7.

$$K_i = \frac{P^*}{P} \quad (4)$$

$$\alpha_{LK,HK} = \frac{K_{LK}}{K_{HK}} \quad (7)$$

A volatilidade relativa média é então calculada utilizando a equação 8.

$$\overline{\alpha_{LK,HK}} = \sqrt[2]{(\alpha_{LK,HK})_{fundo} * (\alpha_{LK,HK})_{topo}} \quad (8)$$

Chave		K topo	K fundo
Chave leve	Inserir LK		
Chave pesada	Inserir HK		

Volatilidade relativa	
Topo	
Fundo	

Volatilidade relativa média
#N/A

[Página Inicial](#)

[Voltar](#)

[Próximo](#)

B-5. Passo 5 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 5 - Equação de Fenske:

Através da volatilidade relativa e das composições de saída dos componentes chaves, calcula-se o número mínimo de andares de equilíbrio utilizando a equação de Fenske.

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{\frac{x_{des}}{1-x_{des}}}{\frac{x_{res}}{1-x_{res}}}\right)}{\alpha_{LK,HK}} \quad (9)$$

Onde $x_{(des)}$ é a composição do componente mais volátil (LK) no topo (corrente de destilado)

$x_{(res)}$ é a composição do componente mais volátil (LK) no fundo

Importante lembrar que a equação de Fenske inclui o ebulidor parcial como um andar, portanto para o número de pratos no interior da coluna, é necessário diminuir 1 do resultado encontrado.

Chave		K topo	K fundo
Chave leve	Inserir LK		
Chave pesada	Inserir HK		

Volatilidade relativa	
Topo	
Fundo	

Volatilidade relativa média
#N/A

N min de pratos	
%(LK)dest	#N/A
%(HK)res	#N/A
#N/A	

Página Inicial

Voltar

Próximo

B-6. Passo 6 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 6 - Razão mínima de refluxo (Equações de Underwood)

Para o cálculo da razão mínima de refluxo, é necessário utilizar primeiro a equação 7 para se determinar o θ . Em seguida, utiliza-se a equação 8.

$$\sum_{i=1}^i \frac{z_{iF} \cdot \alpha_{i,HK}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 - q \quad (10)$$

Como não se consegue isolar facilmente o θ da equação, devido as i raízes que se pode obter, o θ deve obedecer a seguinte relação:

$$1 < \theta < \alpha(LK, HK)$$

Dessa forma, chutou-se o valor inicial de θ e foram feitas algumas interações para se determinar seu valor final e utilizá-lo na equação 8.

$$\sum_{i=1}^i \frac{x_{iD} \cdot \alpha_{i,HK}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 + R_{min} \quad (11)$$

Onde z_{iF} é a composição de entrada do componente i

q é a condição de alimentação

x_{iD} é a composição do componente i na corrente de destilado

Por fim, calculou-se a razão de refluxo real utilizando a razão de refluxo em relação ao refluxo mínimo, definido como variável de entrada.

[Página Inicial](#)

[Voltar](#)

[Próximo](#)

Underwood Constante	
Chute inicial	1.00001
Valor máximo	#N/A
1-q	1.0000

RESULTADO	
θ	#N/A
ERRO	#N/A

Componente	x_i (destilado)
	0.000
	0.000
	0.000
	0.000
	0.000
	0.000
	0.000
	0.000

Somatório
#N/A

R _{min}
Refluxo real

#N/A

B-7. Passo 7 do memorial de cálculo para destilação *shortcut* (fonte: autor, 2018).

Passo 7 - Número de pratos (Gilliland) e ponto de alimentação

O número de pratos é calculado utilizando a correlação de Gilliland. Ao saber a razão de refluxo real, pode-se utilizar o gráfico ao lado ou a equação 9.

$$\frac{N - N_{min}}{N + 1} = 0,75 - 0,75 \cdot \left(\frac{R - R_{min}}{R + 1}\right)^{0,5668} \quad (12)$$

Onde:

N: número de andares

N_{min}: número de andares mínimo

R: razão de refluxo

R_{min}: razão de refluxo mínimo

Para calcular a localização ótima do andar de alimentação, utiliza-se a equação 10:

$$\frac{N_{retif}}{N_{esgot}} = \left[\left(\frac{z_{HK,F}}{z_{LK,F}}\right) \cdot \left(\frac{x_{LK,W}}{x_{HK,D}}\right)^2 \cdot \left(\frac{W}{D}\right) \right]^{0,206} \quad (13)$$

Onde N_{retif} + N_{esgot} = Pratos

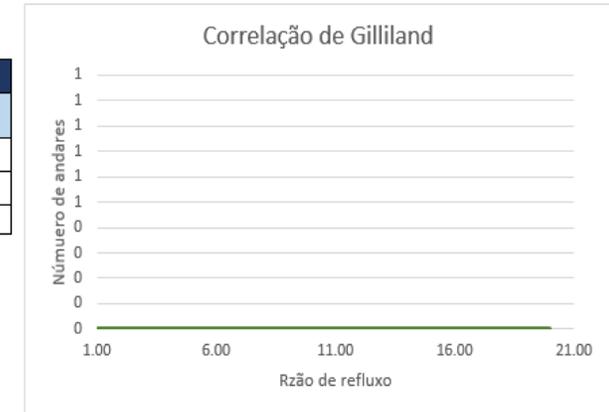
Voltar

Página Inicial

GILLILAND	
DADOS	
Rmin	
Nmin	#VALUE!
R	

Eixos do gráfico	
x	
y	#VALUE!

Pratos #VALUE!



PONTO DE ALIMENTAÇÃO	
Corrente de fundo	#N/A
Corrente de topo	#N/A
x(LK) da corrente de fundo	#N/A
x(HK) da corrente de topo	#N/A
z(LK) de alimentação	#N/A
z(HK) de alimentação	#N/A
Pratos	#VALUE!
Ponto de alimentação	#VALUE!