



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

ANTONIO CARLOS ROCHA BEZERRA JUNIOR

DESENVOLVIMENTO DE APLICAÇÃO WEB EM DJANGO COMO
FERRAMENTA DE AUXÍLIO PEDAGÓGICO PARA O ENSINO DE OPERAÇÕES
COM ESTÁGIOS

FORTALEZA

2023

ANTONIO CARLOS ROCHA BEZERRA JUNIOR

DESENVOLVIMENTO DE APLICAÇÃO WEB EM DJANGO COMO FERRAMENTA DE
AUXÍLIO PEDAGÓGICO PARA O ENSINO DE OPERAÇÕES COM ESTÁGIOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Graduação em Engenharia Química do
Centro de Tecnologia da Universidade Federal
do Ceará, como requisito parcial à obtenção do
grau de bacharel em Engenharia Química.

Orientadora: Prof^ª. Andréa da Silva Pereira.

FORTALEZA

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Sistema de Bibliotecas
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

B469d Bezerra Junior, Antonio Carlos Rocha.

Desenvolvimento de aplicação web em django como ferramenta de auxílio pedagógico para o ensino de operações com estágios / Antonio Carlos Rocha Bezerra Junior. – 2023.
56 f. : il. color.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Química, Fortaleza, 2023.

Orientação: Profa. Dra. Andréa da Silva Pereira.

1. Engenharia química. 2. Aplicação web. 3. Django. 4. Operações com estágios. 5. Educação tecnológica. I. Título.

CDD 660

ANTONIO CARLOS ROCHA BEZERRA JUNIOR

DESENVOLVIMENTO DE APLICAÇÃO WEB EM DJANGO COMO FERRAMENTA DE
AUXÍLIO PEDAGÓGICO PARA O ENSINO DE OPERAÇÕES COM ESTÁGIOS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao
Curso de Graduação em Engenharia Química
do Centro de Tecnologia da Universidade
Federal do Ceará, como requisito parcial à
obtenção do grau de bacharel em Engenharia
Química.

Aprovada em: 27/11/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof^a. Dr^a. Andréa da Silva Pereira (Orientadora)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Daniel Vasconcelos Goncalves
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Ivanildo Jose da Silva Junior
Universidade Federal do Ceará (UFC)

A Deus. Sem ele nada seria possível.

A minha noiva e aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, em primeiro lugar, a Deus por me guiar, fortalecer minha fé e me conceder força e sabedoria durante todo o processo do meu TCC.

Agradeço de coração à minha noiva Larice pelo apoio e amor incondicionais durante toda a jornada do meu TCC. Também expresso minha profunda gratidão aos meus pais, que sempre estiveram ao meu lado, me incentivando e me proporcionando todo suporte necessário.

A Prof^a. Dr. Andréa da Silva Pereira, pela orientação inestimável.

Aos professores participantes da banca examinadora Prof. Dr. Daniel Vasconcelos Goncalves e Prof. Dr. Ivanildo Jose da Silva Junior pelo tempo, pelas preciosas sugestões e colaborações.

RESUMO

O progresso contínuo da engenharia tem sido intrinsecamente ligado ao avanço tecnológico. A interseção entre essas duas áreas impulsiona inovações e transformações em diversos setores. Nesse contexto, a engenharia química destaca-se como uma disciplina fundamental, desempenhando papel crucial na concepção e otimização de processos industriais. O ensino dessa disciplina é de suma importância para formar profissionais aptos a enfrentar os desafios da indústria. O uso da tecnologia no processo de ensino é uma ferramenta essencial para proporcionar uma formação mais prática e alinhada com as demandas do mercado. O desenvolvimento dessa aplicação, que é explorada em detalhes ao longo desse trabalho, surge como resposta a essa necessidade, visando facilitar a análise e simulação de cenários de projeto industrial. Ao permitir ajustes em parâmetros e validar diferentes hipóteses, ela oferece uma abordagem prática e interativa para os alunos. A aplicação, disponível online de forma gratuita, é capaz de realizar o projeto de múltiplos equipamentos, proporcionando uma experiência acessível a estudantes e professores. Sua validação, realizada por meio de problemas de projeto de equipamentos de operações com estágios, confirma sua precisão e utilidade no contexto educacional. Assim, essa ferramenta não apenas representa um avanço na integração entre tecnologia e ensino, mas também contribui para a formação de profissionais mais preparados e capacitados para enfrentar os desafios da engenharia química no cenário industrial contemporâneo.

Palavras-chave: Engenharia Química; Aplicação Web; Django; Operações com Estágios; Educação Tecnológica; Simulação de Processos Industriais

ABSTRACT

The continuous progress of engineering has been intrinsically linked to technological advancement. The intersection between these two areas drives innovations and transformations in various sectors. In this context, chemical engineering stands out as a fundamental discipline, playing a crucial role in the design and optimization of industrial processes. The teaching of this discipline is of paramount importance to educate professionals capable of facing the challenges of the industry. The use of technology in the teaching process is an essential tool to provide a more practical education aligned with market demands. The development of this application, explored in detail throughout this work, emerges as a response to this need, aiming to facilitate the analysis and simulation of industrial project scenarios. By allowing adjustments to parameters and validating different hypotheses, it offers a practical and interactive approach for students. The application, available online for free, can undertake the design of multiple pieces of equipment, providing an accessible experience for students and teachers. Its validation, conducted through problems related to the design of mass transfer unit operations equipment, confirms its accuracy and utility in the educational context. Thus, this tool not only represents an advancement in the integration of technology and education but also contributes to the training of professionals better prepared and equipped to face the challenges of chemical engineering in the contemporary industrial scenario.

Keywords: Chemical Engineering; Web Application; Django; Mass Unit Operations; Technological Education; Industrial Process Simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema de uma coluna de destilação fraccionada	19
Figura 2 – Menu principal	45
Figura 3 – Página para cálculo da destilação Flash	46
Figura 4 – Dados do problema 4.1 com resultado	48
Figura 5 – Dados de entrada do problema 4.2	50
Figura 6 – Resultado do problema 4.2	50
Figura 7 – Resultado gráfico do problema 4.2	51
Figura 8 – Dados do problema 4.3 com resultado	52
Figura 9 – Dados do problema 4.4 com resultado	53

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Capacidade de inundação em uma coluna de pratos	37
---	----

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Condições de Alimentação	32
Tabela 2 – Equações para cada condição de alimentação	33
Tabela 3 – Valores para espaçamento em função do diâmetro da coluna	38
Tabela 4 – Comparação dos resultados do aplicativo e gabarito do problema 4.1	49
Tabela 5 – Comparação dos resultados do aplicativo	51
Tabela 6 – Comparação dos resultados do aplicativo	52
Tabela 7 – Comparação dos resultados do aplicativo	54

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- A.C Antes de Cristo
- MIT Instituto de Tecnologia de Massachusetts
- PBL Aprendizagem Baseada em Problemas
- PR Equação de Peng-Robinson
- SRK Equação de Soave-Redlich-Kwong

LISTA DE SÍMBOLOS

a	Correção para a atração molecular
α	Correção empírica
b	Correção para o volume ocupado pelas moléculas
K	Relação de K-Value
P_c	Pressão crítica
P	Pressão
R	Constante dos gases ideais
T_c	Temperatura crítica
T	Temperatura
V_m	Volume molar
x	Fração molar na fase líquida
y	Fração molar na fase vapor
γ	Coefficiente de Atividade
ϕ	Coefficiente de Fugacidade
ω	Fator acêntrico

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
2	OBJETIVOS	15
2.1	Objetivo Geral	15
2.2	Objetivos Específicos	15
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	15
3.1	Aprendizagem Baseada em Problemas	15
3.2	As Operações com Estágios	16
3.3	Destilação	17
3.3.1	<i>Fundamentos da Destilação</i>	17
3.3.2	<i>Colunas de Destilação</i>	18
3.3.3	<i>Condensador</i>	19
3.3.4	<i>Refrervedor</i>	20
3.3.5	<i>Efeitos termodinâmico</i>	20
3.3.6	<i>Equilíbrio líquido-vapor</i>	21
3.3.7	<i>Equações de Estado</i>	23
3.3.8	<i>Entalpia</i>	24
3.3.9	<i>Pressão de vapor</i>	26
3.3.10	<i>Ponto de bolha</i>	26
3.3.11	<i>Destilação Flash</i>	27
3.3.12	<i>Método de Fenske-Underwood e Gilliland</i>	28
3.3.13	<i>Absorção</i>	29
4	METODOLOGIA	31
4.1	Equação de Fenske para o número de estágios mínimo	31
4.2	Equação de Underwood	32
4.3	Correlação de Gilliland	33
4.4	Número de estágios reais	35
4.5	Cálculo do diâmetro da coluna	36
4.6	Cálculo da altura da coluna	39
5	DESENVOLVIMENTO DA APLICAÇÃO WEB	40
5.1	Objetivos do Aplicativo	40
5.2	Descrição Funcional	40
5.3	Implementação Técnica	41

5.4	Benefícios Educacionais	42
5.5	Desenvolvimento da ferramenta.....	43
6	RESULTADOS.....	47
6.1	Calculadora Destilação Flash	47
6.2	Calculadora McCabe - Thiele.....	49
6.3	Calculadora FUG.....	51
6.4	Calculadora Absorção	53
7	CONCLUSÃO.....	54
	REFERÊNCIAS.....	56

1 INTRODUÇÃO

A trajetória da humanidade tem uma ligação intrínseca com o progresso das disciplinas científicas e da engenharia. Desde os albores da civilização, os seres humanos demonstraram incessante interesse em desvendar os segredos da física, química, biologia, matemática e outras esferas do conhecimento científico. Nesse contexto, o papel crucial desempenhado pelos engenheiros reside em converter esses conhecimentos em produtos e resultados concretos que beneficiem a sociedade.

Nessa busca contínua de exploração científica e tecnológica, os engenheiros químicos desempenham um papel essencial (MCCABE, SMITH, HARRIOTT, 1993). Sua tarefa é conceber processos industriais que transformem matérias-primas brutas em produtos úteis, abrangendo desde o desenvolvimento de fármacos e novos materiais até a produção de compostos químicos fundamentais para diversas aplicações. É incumbência do engenheiro químico assegurar que esses processos sejam eficazes, seguros, viáveis economicamente e capazes de atender às necessidades dos consumidores.

Entretanto, abordar esses processos como uma entidade única e indivisível representa um desafio, e, em última análise, é desnecessário. Na realidade, os processos industriais devem ser tratados como uma sequência de atividades interdependentes, em que cada etapa básica complementa a outra para formar o produto final (CREMASCO, 2012). As operações com estágios desempenham um papel vital na engenharia química, representando o cerne desse estudo.

Este trabalho tem por finalidade aprofundar nosso entendimento nos fundamentos teóricos e nas aplicações práticas dos equipamentos industriais envolvidos no transporte e manipulação de fluidos, abrangendo uma análise detalhada de dispositivos como coluna de destilação e absorção.

Este domínio de estudo frequentemente serve como ponto de partida para o dimensionamento de equipamentos industriais pelos engenheiros químicos.

Portanto, o foco deste trabalho recai sobre o desenvolvimento de uma aplicação web, concebida como uma ferramenta educacional destinada a realizar cálculos automatizados relacionados ao dimensionamento de equipamentos industriais envolvidos nas operações com estágios, permitindo aos estudantes se liberarem da memorização de fórmulas e se concentrarem na análise de cenários de projeto.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Desenvolver uma aplicação Web que servirá de repositório para códigos Python desenvolvidos durante a graduação em Engenharia Química.

2.2 Objetivos Específicos

Desenvolver uma ferramenta gráfica e analítica que auxilie no dimensionamento de equipamentos da indústria química.

Implementação dos métodos de dimensionamento

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 Aprendizagem Baseada em Problemas

A Aprendizagem Baseada em Problemas (PBL) é uma abordagem pedagógica inovadora que coloca o estudante no centro do processo educacional. Essa metodologia propõe que os alunos trabalhem em grupos para resolver desafios complexos, em contrapartida à abordagem passiva de receber informações (DUCH, GROH, ALLEN, 2001). O que diferencia o PBL dos métodos de ensino tradicionais é que os problemas apresentados não têm uma solução única e definitiva.

Segundo Hmelo-Silver, Duncan, Chinn (2007), a utilização do PBL pode levar a uma retenção de conhecimento pelos alunos até 14% maior em comparação com métodos de ensino convencionais. Além disso, essa metodologia estimula o envolvimento dos alunos e promove o desenvolvimento de habilidades de comunicação interpessoal e inteligência emocional, pois eles enfrentam situações incertas e imprevisíveis.

Essa abordagem modifica o objetivo da aprendizagem, expandindo-o além da aplicação pura de equações e cálculos. O foco passa a ser a análise crítica das diversas alternativas possíveis para um projeto específico. Isso resulta na criação de avaliações desafiadoras e cativantes que estimularam a criatividade dos alunos e exigem uma compreensão aprofundada dos conceitos estudados na disciplina.

No entanto, as extensas tarefas de dimensionamento dos equipamentos são difíceis de serem replicadas manualmente, o que justifica a necessidade de ferramentas computacionais que permitem a comparação eficaz de diferentes cenários de projeto em tempo hábil.

Sendo assim, o aplicativo desenvolvido neste projeto se apresenta como uma ferramenta educacional centrada na validação de hipóteses e na automação de processos de cálculo. Entretanto, para tirar pleno proveito do aplicativo, o estudante ainda precisa possuir uma compreensão sólida dos conceitos e dos equipamentos estudados na disciplina, de forma a fundamentar as análises críticas que direcionarão suas decisões de projeto.

A base teórica e matemática utilizada na elaboração dos algoritmos do aplicativo será minuciosamente discutida e explicada nas próximas seções.

3.2 As Operações com Estágios

Operação com estágios é toda unidade do processo na qual os materiais passam por transformações em seu estado físico ou químico, e que pode ser projetada com base em princípios físico-químicos comuns.

Essa definição fundamental implica que cada equipamento industrial pode ser considerado uma unidade elementar do processo, com as condições de entrada e saída claramente definidas. Neste contexto, nosso foco de estudo recai sobre o conjunto de operações com estágios.

Dentro deste campo de estudo, examinamos os equipamentos que desempenham um papel crucial no transporte massa. Isso inclui dispositivos como destiladores e absorvedores. Esses aparelhos desempenham um papel de importância vital em várias indústrias, abrangendo a indústria química, petroquímica, farmacêutica e de alimentos.

A obtenção de uma compreensão profunda dessas operações com estágios é imperativa para os engenheiros químicos, uma vez que elas representam os blocos essenciais que possibilitam o funcionamento eficaz de diversas instalações industriais.

3.3 Destilação

3.3.1 Fundamentos da Destilação

A separação de misturas é um dos desafios fundamentais enfrentados em diversas indústrias, incluindo a química, farmacêutica e petroquímica. Entre as várias operações com estágios empregadas para essa finalidade, a destilação se destaca como uma das mais antigas, remontando a 1200 A.C. e inicialmente utilizada na produção de bebidas alcoólicas.

A destilação tem como objetivo separar uma mistura em duas ou mais correntes, com composições distintas, aproveitando a diferença de volatilidade entre os componentes. Esse processo envolve a manipulação da temperatura do sistema de forma a criar fases de vapor e líquido coexistentes. Através de múltiplos contatos entre essas fases, ocorre a transferência de massa. No entanto, vale ressaltar que a destilação, especialmente quando se trata da separação de componentes com volatilidades semelhantes, requer um alto consumo de energia (SEADER, HENLEY, 2011).

Um princípio fundamental na destilação é que, ao aquecer uma mistura de componentes, a fase vapor terá uma concentração mais elevada do componente mais volátil, enquanto a fase líquida terá uma concentração mais alta do componente menos volátil. Inversamente, o resfriamento de uma mistura aquecida levará a uma concentração maior do componente menos volátil na fase líquida em relação ao vapor (HOLLAND, 1997).

Além da temperatura, a transferência de massa desempenha um papel crucial na destilação, pois a separação ocorre através do contato entre as fases vapor e líquida. Para otimizar esse processo, é necessário maximizar o contato entre as duas fases, especialmente em casos de misturas com volatilidades similares.

A destilação pode ser realizada de duas maneiras principais: batelada ou contínua. No processo de batelada, o vapor formado é continuamente retirado e condensado para produzir o destilado, sendo frequentemente utilizado em laboratórios quando altos níveis de pureza são essenciais. No entanto, em operações industriais, o método contínuo é predominante. Nesse caso, a mistura líquida é constantemente alimentada em uma coluna de destilação. Durante esse processo, as altas vazões são comuns, e a presença de refluxo é utilizada para aprimorar a eficiência do processo (SEADER, HENLEY, 2011).

Dada a importância histórica e prática da destilação, seu estudo e modelagem oferecem uma ampla variedade de métodos. Isso varia desde abordagens simples, como o método de McCabe-Thiele, que é um método gráfico amplamente utilizado para misturas

binárias, até métodos mais rigorosos, como o método de Wang Henke ou o algoritmo de Newton-Raphson. Esses métodos mais complexos envolvem a resolução simultânea de equações de balanço de massa, energia e equilíbrio líquido-vapor. Eles geralmente requerem o uso de computadores, ao contrário dos métodos mais simples, que são resolvidos analiticamente.

Embora a destilação seja frequentemente conduzida sob a suposição de que não há reações químicas ocorrendo, em casos onde essa suposição é inválida, é necessário considerar a cinética das reações e como ela afeta a transferência de massa e energia no processo.

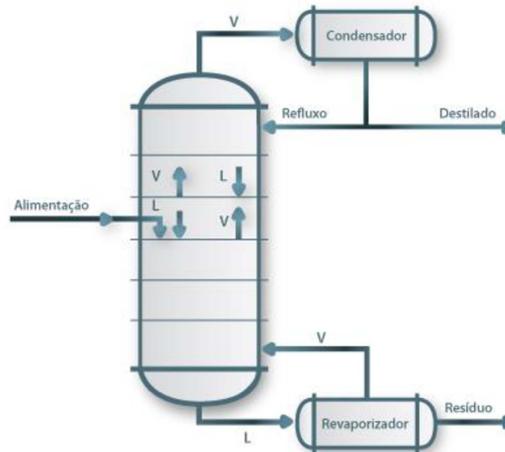
3.3.2 Colunas de Destilação

Na indústria, onde se busca eficiência e viabilidade econômica, o equipamento de destilação mais amplamente empregado é conhecido como coluna de destilação. Essas colunas desempenham um papel fundamental ao aumentar a área de contato entre líquido e vapor, possibilitando a transferência de massa. Esse aumento na área de contato é essencial devido às altas vazões de alimentação e à produtividade necessária nas indústrias químicas. A maneira como esse contato é facilitado depende do tipo de coluna, que pode ser de pratos ou de recheio. Nas colunas de recheio, a transferência de massa ocorre continuamente ao longo da coluna, pois são preenchidas com materiais específicos projetados para maximizar o contato entre as fases líquida e vapor. Por outro lado, as colunas de pratos possuem pratos com orifícios que permitem o contato entre vapor e líquido, sendo este o tipo de coluna mais prevalente.

Em termos gerais, as colunas de destilação consistem em uma torre onde ocorre a transferência de massa. Essas torres são divididas em duas zonas: a zona de retificação, também chamada de zona de enriquecimento, onde os componentes mais voláteis têm maior concentração na fase vapor do que na fase líquida, e a zona de esgotamento, conhecida como zona de stripping, onde os componentes menos voláteis predominam na fase líquida em relação à fase vapor. Além disso, as colunas de destilação incluem um refeedor parcial, que faz parte da corrente de fundo entrar em ebulição e retornar à coluna, e um condensador, onde o vapor no topo da coluna é condensado e reintroduzido na coluna em uma razão de refluxo. Assim, o funcionamento das colunas de destilação ocorre normalmente em um regime de contracorrente, com o líquido condensado no topo fluindo em direção ao fundo, onde encontra o vapor ascendente ao longo da coluna.

A Figura 1 ilustra os componentes de uma coluna de destilação descritos anteriormente.

Figura 1: Esquema de uma coluna de destilação



Fonte: FCTUC Departamento de Engenharia Química (2007)

No que diz respeito à determinação das dimensões da coluna de destilação, três fatores principais exercem influência sobre o seu cálculo: a vazão de alimentação, as concentrações desejadas nas saídas do topo e do fundo, e a volatilidade relativa dos componentes envolvidos. A vazão de alimentação está diretamente associada à capacidade física da coluna, enquanto a concentração nos pontos de entrada e saída influencia a necessidade de uma área de transferência de massa expandida. Além disso, a volatilidade relativa dos componentes desempenha um papel crucial, indicando a dificuldade em separar esses componentes. No setor petroquímico, onde a matéria-prima é composta por uma ampla variedade de componentes com volatilidades relativas semelhantes, e onde altas taxas de produção são requeridas, as colunas de destilação podem atingir alturas consideráveis, chegando a dezenas de metros

3.3.3 Condensador

Para garantir que as composições dos componentes mais voláteis estejam em conformidade com as especificações desejadas, um trocador de calor é empregado, geralmente condensando completamente o vapor. Em seguida, o condensado é retirado da coluna com a composição almejada, enquanto o restante retorna ao processo de destilação. A seleção do fluido refrigerante no trocador de calor depende das particularidades do projeto, levando em consideração aspectos como a corrosão e a carga térmica requerida, sendo comumente feito com o uso de água de resfriamento (SCHASCHKE, 2014).

Trocadores de calor podem adotar várias geometrias, mas, devido à alta carga térmica necessária em processos de destilação, os trocadores do tipo casco-e-tubos são frequentemente utilizados.

Quanto à localização do condensador em relação à coluna de destilação, uma prática comum é instalá-lo no solo para facilitar a manutenção e reduzir os riscos associados à operação, com o líquido sendo bombeado de volta à coluna (TREYBAL, 1980).

3.3.4 Refervedor

O refervedor, em contraste com o condensador, tem a função de elevar a temperatura da mistura da base, garantindo que a composição de saída dos componentes menos voláteis atenda às especificações desejadas. Em um processo de refervura, geralmente, parte da mistura retorna à coluna, enquanto o restante é retirado. Refervedores podem ser projetados de várias maneiras e podem utilizar trocadores de calor ou resistências elétricas, dependendo das necessidades do processo. Além disso, refervedores podem operar de forma parcial ou total, com base na fração de líquido vaporizada. Quando toda a mistura líquida é vaporizada, o refervedor é considerado total. Quando apenas uma fração da mistura é vaporizada, ele é classificado como parcial e é equivalente a um estágio ideal em colunas de pratos. Assim como o condensador, para evitar problemas operacionais, o refervedor também é posicionado no chão (SCHASCHKE, 2014).

3.3.5 Efeitos termodinâmico

A análise das propriedades termodinâmicas de um sistema desempenha um papel fundamental em processos químicos, fornecendo informações essenciais sobre o comportamento das fases líquida e vapor. Isso é crucial não apenas para o dimensionamento adequado de colunas de destilação, mas também para evitar possíveis falhas no processo.

Para projetar uma coluna de destilação com eficiência, é necessário obter informações detalhadas sobre o comportamento das fases ao longo de vários estágios. Isso envolve a combinação de estudos experimentais e o uso de modelos matemáticos, conhecidos como equações de estado. Essas equações relacionam variáveis como temperatura, volume e pressão do sistema para fornecer as informações necessárias (SEADER, HENLEY, 2011).

Além de dados experimentais e equações de estado, a análise energética é essencial no projeto de colunas de destilação. Diversas variáveis influenciam o equilíbrio de energia em

uma coluna de destilação, sendo a entalpia uma das mais significativas. A manipulação da temperatura na coluna é fundamental, pois afeta as propriedades físicas de cada componente, incluindo a pressão de vapor, o que, por sua vez, influencia a transferência de massa entre as fases.

3.3.6 Equilíbrio líquido-vapor

O equilíbrio líquido-vapor é um conceito fundamental em processos de separação, como a destilação. Compreender as relações termodinâmicas que governam o equilíbrio entre as fases é essencial para o projeto e operação eficiente de unidades de destilação. O equilíbrio líquido-vapor é influenciado por variáveis como pressão, temperatura e composição e é descrito por uma série de equações e conceitos termodinâmicos.

Equações Fundamentais do Equilíbrio Líquido-Vapor:

- Equação de Raoult: A Equação de Raoult é um modelo simples que descreve o comportamento do equilíbrio entre as fases em misturas ideais. Ela relaciona a pressão de vapor de um componente em uma mistura com sua fração molar na fase líquida e sua pressão de vapor no estado puro.

$$P_i^S = x_i P_i^* \quad (3.1)$$

- Coeficiente de Fugacidade: O coeficiente de fugacidade (ϕ) é uma medida da não idealidade de uma mistura. Ele expressa a relação entre a fugacidade de um componente na mistura e sua pressão no estado puro.

$$\phi_i = \frac{f_i}{P_i} \quad (3.2)$$

- Relação de K-Value: A relação de K-Value (K_i) é a razão das frações molares de um componente na fase vapor (y_i) e na fase líquida (x_i). É um indicador-chave do equilíbrio líquido-vapor.

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V} \quad (3.3)$$

- Parâmetro de Não Aleatoriedade: O parâmetro de não aleatoriedade (α_{ij}) descreve a influência de diferentes componentes na mistura na mistura líquida. É essencial para entender o comportamento das fases em sistemas não ideais.

$$\alpha_{ij} = \frac{\phi_i^L \phi_j^V}{\phi_i^V \phi_j^L} \quad (3.4)$$

Essas equações são essenciais para relacionar as composições da fase líquida e da fase vapor, o que é fundamental para o projeto de colunas de destilação. Além disso, o conhecimento das propriedades termodinâmicas dos componentes de uma mistura é crucial para a compreensão do equilíbrio líquido-vapor.

Exemplos de Equações de Estado:

- Equação de Peng-Robinson: A equação de Peng-Robinson é um modelo de equação de estado amplamente utilizado para estimar as propriedades termodinâmicas dos componentes de uma mistura. Ela considera a pressão, a temperatura, o volume molar, o fator de compressibilidade e parâmetros específicos para cada componente.

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b)} \quad (3.5)$$

- Equação de Soave-Redlich-Kwong: A equação de Soave-Redlich-Kwong é outro modelo de equação de estado utilizado para descrever o comportamento de sistemas líquido-vapor. Ela também considera a pressão, a temperatura, o volume molar e parâmetros específicos para cada componente.

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m(V_m + b)} \quad (3.6)$$

Além das equações de estado, o estudo energético é crucial para entender o equilíbrio líquido-vapor em colunas de destilação. O balanço de energia é fundamental para calcular as quantidades de calor trocadas entre as fases líquida e vapor ao longo da coluna.

O modelo UNIFAC é um exemplo de modelo de contribuição por grupo amplamente utilizado. Ele separa o coeficiente de atividade de cada componente em uma parte combinatória e uma parte residual.

$$\ln\gamma_i = \ln\gamma_i^c + \ln\gamma_i^r \quad (3.7)$$

Compreender as equações e conceitos termodinâmicos associados ao equilíbrio líquido-vapor é essencial para o projeto, otimização e operação eficaz de colunas de destilação em uma variedade de aplicações industriais. Visto a sua importância, será comentado de forma mais aprofundada as equações de estado.

3.3.7 Equações de Estado

No campo da engenharia química e da termodinâmica, as equações de estado desempenham um papel fundamental na previsão do comportamento de substâncias e misturas. Uma equação de estado é uma ferramenta matemática que relaciona as propriedades de uma substância, como pressão, temperatura, volume molar e composição, a fim de descrever seu comportamento termodinâmico. Isso é especialmente útil quando não é possível obter um grande conjunto de dados experimentais para cada sistema químico.

A equação de estado de Van der Waals, desenvolvida a partir de conceitos de repulsão e atração entre moléculas, é uma das primeiras equações a considerar fenômenos como condensação e evaporação. Essa equação é representada da seguinte forma:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad (3.8)$$

Nesta equação, P é a pressão, R é a constante dos gases ideais, T é a temperatura, v é o volume molar, a é uma correção para a atração molecular e b é uma correção para o volume ocupado pelas moléculas.

No entanto, a equação de Van der Waals deu origem a várias outras equações de estado mais precisas que são amplamente utilizadas na indústria química. Duas delas são a equação de Soave-Redlich-Kwong (SRK) e a equação de Peng-Robinson (PR). A equação de SRK é definida da seguinte maneira:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha(T)}{v(v+b)+b(v-b)} \quad (3.9)$$

Aqui, além de a e b , também introduzimos α , uma correção empírica que leva em consideração a temperatura.

Da mesma forma, a equação de Peng-Robinson é expressa como:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a\alpha(T)}{v(v+b)+b(v-b)} \quad (3.10)$$

Onde a , b e α são definidos por:

$$a = 0.45724 \left(\frac{R^2 T_c^2}{P_c} \right) \quad (3.11)$$

$$b = 0.0778 \left(\frac{RT_c}{P_c} \right) \quad (3.12)$$

$$\alpha = [1 + (0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2)(1 - \sqrt{T_r})]^2 \quad (3.13)$$

Nessas equações, T_c e P_c representam a temperatura crítica e a pressão crítica da substância, respectivamente, e ω é o fator acêntrico da substância.

Essas equações de estado são essenciais para descrever o comportamento de substâncias e misturas em diferentes condições termodinâmicas. Elas permitem prever propriedades termodinâmicas, como pressão de vapor, fugacidade, coeficientes de atividade e muito mais, desempenhando um papel crucial no projeto e na operação de processos industriais na área da engenharia química. Além disso, modelos mais complexos, como os modelos de contribuição por grupo, também podem ser aplicados para sistemas não ideais, levando em consideração a estrutura molecular das substâncias.

3.3.8 *Entalpia*

A entalpia é uma propriedade termodinâmica fundamental, especialmente relevante em processos de destilação, nos quais ocorre uma constante mudança de fases e há um consumo significativo de energia. A entalpia é uma medida da energia total de um sistema, levando em consideração tanto a energia interna quanto o trabalho realizado sob pressão constante. Seu cálculo é essencial para o projeto e operação eficiente de colunas de destilação, bem como para uma variedade de processos na engenharia química.

Para descrever a entalpia de um sistema, usamos a seguinte equação:

$$H = U + PV \quad (3.14)$$

Nesta equação, H representa a entalpia, U é a energia interna do sistema, P é a pressão e V é o volume. A entalpia considera a energia térmica, mas também leva em conta o trabalho realizado pelo sistema quando ele expande ou contrai sob pressão constante.

Em sistemas de gases ideais, a entalpia é simplificada e depende apenas da temperatura. No entanto, em gases reais, essas simplificações não podem ser aplicadas. Nesse caso, usamos funções de afastamento para descrever as diferenças entre a entalpia de um gás ideal e um gás real. Essas funções são geralmente determinadas por meio de equações de estado termodinâmico.

Uma equação importante que descreve a relação entre a entalpia de um sistema e o fator de compressibilidade (Z) é a seguinte:

$$\frac{H^\circ - H}{RT} = \int_V^\infty \left[T \left(\frac{\partial Z}{\partial T} \right)_V \right] \frac{dV}{V} + 1 - Z \quad (3.15)$$

Nesta equação, H° é a entalpia para gases ideais, H é a entalpia do sistema real, R é a constante dos gases ideais, T é a temperatura e V é o volume. O termo $\left(T \frac{\partial Z}{\partial T} \right)_V$ representa a taxa de variação do fator de compressibilidade com a temperatura a volume constante.

Além disso, a entalpia para gases ideais pode ser calculada através da seguinte expressão:

$$H^\circ = \int_{T_{ref}}^T C_p dT \quad (3.16)$$

Nesta equação, C_p é o calor específico a pressão constante, e a entalpia é obtida pela integração do calor específico em relação à temperatura.

O cálculo e compreensão da entalpia é necessária para a análise termodinâmica de sistemas, particularmente em processos como a destilação, obtendo assim eficiência energética neste processo.

3.3.9 Pressão de vapor

A pressão de vapor é uma propriedade fundamental em processos termodinâmicos e é especialmente importante no estudo de colunas de destilação e separação de componentes. Ela se refere à pressão exercida por um componente em um sistema sob uma pressão externa específica, e desempenha um papel crucial na determinação da tendência de um componente em mudar de fase, ou seja, de passar do estado líquido para o estado vapor e vice-versa.

A relação entre a pressão de vapor (P_{sat}) e a temperatura (T) de um componente é frequentemente descrita pela equação de Antoine, que é derivada a partir de dados experimentais. A equação de Antoine é expressa da seguinte forma:

$$\ln(P_{sat}) = A - \frac{B}{T-C} \quad (3.17)$$

Nesta equação, P_{sat} é a pressão de vapor do componente, T é a temperatura em kelvin, e A , B , e C são constantes experimentais da equação de Antoine.

É importante destacar que os coeficientes A , B , e C da equação de Antoine são específicos para cada substância e são determinados com base em dados experimentais em faixas de temperatura específicas. Portanto, para realizar cálculos precisos da pressão de vapor em diferentes temperaturas, é necessário usar os coeficientes adequados para a faixa de temperatura de interesse.

3.3.10 Ponto de bolha

O ponto de bolha é um conceito crucial na destilação e em processos de separação envolvendo misturas de componentes. Ele representa a temperatura na qual a primeira bolha de vapor é formada em uma mistura contendo dois ou mais componentes. Determinar o ponto de bolha é fundamental em métodos rigorosos para o dimensionamento de colunas de destilação e outras operações de separação, uma vez que permite identificar as condições nas quais ocorre a mudança de fase da fase líquida para a fase vapor.

O ponto de bolha é calculado com base em uma equação que relaciona as composições dos componentes na fase líquida ($x_{i,j}$) e os coeficientes de distribuição ($K_{i,j}$) dos componentes entre as fases líquida e vapor. A relação fundamental para o ponto de bolha pode ser expressa da seguinte forma:

$$\sum_{i=1}^C K_{i,j} x_{i,j} = 1 \quad (3.18)$$

Nesta equação, C representa o número de componentes na mistura, $K_{i,j}$ é o coeficiente de distribuição do componente i entre as fases líquida e vapor na etapa j , e $x_{i,j}$ é a fração molar do componente i na fase líquida na etapa j .

É importante destacar que a relação mencionada é não linear em relação à temperatura, o que significa que a temperatura de equilíbrio, na qual a primeira bolha de vapor é formada, não pode ser calculada diretamente em uma única iteração. Portanto, é comum resolver essa equação iterativamente, ajustando gradualmente a temperatura até que a condição seja atendida e a primeira bolha de vapor apareça.

O ponto de bolha fornece informações valiosas sobre as condições nas quais a separação eficaz dos componentes de uma mistura ocorre e é uma ferramenta fundamental para a obtenção de produtos purificados em processos de destilação.

3.3.11 Destilação Flash

A destilação flash é um processo de separação amplamente utilizado na indústria química e de petróleo, caracterizado por sua operação em um único estágio. Esses vasos separadores desempenham um papel fundamental na separação de diferentes fases de uma mistura, e sua configuração pode variar, dependendo das necessidades específicas do processo. Geralmente, os vasos de destilação flash podem ser classificados quanto à sua configuração, sendo encontrados em formatos vertical ou horizontal, e também podem ser bifásicos, para separar gás e líquido, ou trifásicos, quando a separação envolve gás, líquido e óleo.

Um vaso separador de destilação flash é composto por quatro zonas de separação distintas, cada uma desempenhando um papel crucial no processo de separação. Essas zonas são classificadas como:

1. **Seção de Separação Primária:** Nesta seção, ocorre o primeiro estágio de separação da mistura. A mistura composta por líquido e vapor entra no vaso separador com velocidade significativa e choca-se com os defletores instalados na seção. Os defletores têm a função de redirecionar a mistura para o fundo do vaso, promovendo a separação inicial entre as fases. Grande parte da separação inicial ocorre nessa zona.

2. **Seção de Acumulação:** Conforme a separação primária ocorre, o líquido resultante começa a se acumular na parte inferior do vaso. Nesse momento, as bolhas de gás dispersas no líquido começam a se desprender e a subir em direção ao topo do vaso. Para uma separação eficaz, é geralmente recomendado que o líquido permaneça no vaso separador por um tempo de residência médio, que normalmente é de aproximadamente 5 minutos.

3. **Seção de Separação Secundária:** Nesta seção, ocorre a separação das gotículas que foram arrastadas pelos gases na etapa de separação primária. Isso ocorre devido à ação da força gravitacional, que faz com que as gotículas se dirijam para o fundo do vaso. Quanto menor for a turbulência experimentada pelo gás nessa seção, mais eficaz será a separação.

4. **Seção de Aglutinação:** A seção de aglutinação representa o último estágio do processo de separação, projetado para lidar com as gotículas que não foram separadas nas etapas anteriores. Essa seção geralmente está localizada próxima à saída do gás. Nessa fase, as gotículas menores que permanecem em suspensão têm a oportunidade de coalescer e se fundir, depositando-se no fundo do vaso. Para facilitar esse processo, muitas vezes são utilizados dispositivos conhecidos como extratores de névoa, que contribuem para a separação das gotículas menores.

Em resumo, a destilação flash é um processo de separação eficaz que se baseia em um único estágio de separação, onde diferentes fases de uma mistura são separadas em um vaso separador. As diversas zonas do vaso desempenham papéis específicos na separação das fases, resultando em produtos finais de alta qualidade. Esse processo é fundamental em uma variedade de aplicações industriais, incluindo a indústria petroquímica, e desempenha um papel crucial na separação e purificação de componentes.

3.3.12 Método de Fenske-Underwood e Gilliland

O método de Fenske-Underwood e Gilliland, frequentemente referido como método FUG, é uma abordagem simplificada amplamente utilizada no projeto de colunas de destilação que lidam com misturas multicomponentes. Ele é especialmente valioso para estimar o dimensionamento da coluna e o ponto ideal de alimentação, tornando o processo de projeto mais acessível. A principal vantagem desse método reside em sua simplicidade, quando comparado a outras técnicas mais complexas, que exigem a resolução simultânea de equações de balanço de massa, energia e equilíbrio líquido-vapor (conhecidas como MESH), juntamente com a necessidade de uma grande quantidade de dados e cálculos detalhados.

O método FUG é composto por três equações fundamentais, cada uma desempenhando um papel importante no projeto da coluna de destilação:

1. **Equação de Fenske:** Esta equação é usada para determinar o número mínimo de estágios requeridos na coluna. Ela leva em consideração a volatilidade relativa constante ao longo da coluna e as vazões molares de líquido e vapor, que são assumidas como constantes.

2. **Equação de Underwood:** A equação de Underwood é aplicada para encontrar a razão mínima de refluxo necessária para o processo de destilação. Ela também se baseia na premissa de uma volatilidade relativa constante e vazões molares constantes.

3. **Correlação de Gilliland:** Esta correlação auxilia no cálculo do número de estágios necessário na coluna e do valor real do refluxo. Ela considera tanto a volatilidade relativa constante quanto as vazões molares constantes.

Para aplicar o método FUG de forma eficaz, é crucial definir dois componentes-chave da mistura: o componente leve (LK ou "light-key"), que é o componente principal a ser obtido no destilado, e o componente pesado (HK ou "heavy-key"), que é o componente principal a ser obtido no condensado. O componente pesado deve ter uma volatilidade menor do que o componente leve. Além disso, é necessário fornecer informações sobre a distribuição da concentração de cada um desses componentes nas correntes de destilado e fundo.

Embora o método FUG simplifique significativamente o projeto de colunas de destilação multicomponentes, é importante destacar que ele é baseado em premissas simplificadoras, como a volatilidade relativa constante. Em situações onde essas premissas não são adequadas, outros métodos mais rigorosos, como o MESH mencionado, podem ser necessários. No entanto, o método FUG continua sendo uma ferramenta valiosa para fornecer uma estimativa inicial do projeto de colunas de destilação de misturas complexas.

3.3.13 *Absorção*

A absorção é uma operação unitária amplamente empregada na indústria química e de processos. Ela se baseia na transferência de massa de uma corrente gasosa para uma corrente líquida, na qual um ou mais componentes preferencialmente são transferidos para o líquido quando essas duas fases entram em contato. Quando a transferência de massa ocorre na direção oposta, temos uma operação de dessorção ou esgotamento, na qual componentes da corrente líquida são removidos utilizando uma corrente gasosa.

Essas operações são frequentemente utilizadas em conjunto, onde o solvente líquido usado na absorção é regenerado na operação de esgotamento para ser reutilizado no processo

de absorção. Ambas as operações são essenciais em diversas aplicações industriais, como na purificação de gases, na remoção de poluentes atmosféricos e na separação de componentes específicos de uma corrente gasosa.

Os equipamentos projetados para realizar as operações de absorção e esgotamento têm a finalidade de promover o contato íntimo entre as fases líquida e vapor, permitindo uma transferência eficiente de massa. Entre os principais tipos de equipamentos utilizados, destacam-se:

Colunas de Pratos: Nas colunas de pratos, o líquido escoar sobre cada prato, e em seguida, é direcionado para o prato imediatamente abaixo por meio de um downcomer. O gás ou vapor, por sua vez, flui de baixo para cima através de aberturas em cada prato, borbulhando através da coluna de líquido no prato. Esse escoamento contracorrente entre as fases é fundamental para a eficiente transferência de massa. As colunas de pratos são amplamente utilizadas em operações de absorção e esgotamento.

Colunas Empacotadas: Nas colunas empacotadas, os pratos são substituídos por seções de recheio, que podem ser randômicos ou estruturados. O líquido flui de cima para baixo sobre a superfície do recheio na forma de filmes finos ou gotículas, enquanto o vapor flui em contracorrente através do recheio molhado. Esse tipo de coluna é especialmente eficaz quando se busca uma grande área de contato entre as fases para facilitar a transferência de massa.

Torres de Aspersão: As torres de aspersão são equipamentos nos quais o líquido é aspergido sobre a corrente gasosa que flui para cima. São indicadas quando o soluto é altamente solúvel no líquido, permitindo atingir a separação desejada em apenas um ou dois estágios, com uma queda de pressão mínima.

Colunas de Borbulhamento: As colunas de borbulhamento consistem em torres verticais parcialmente preenchidas com líquido, no qual o gás ou vapor é borbulhado. Essas colunas geram uma elevada queda de pressão devido à coluna de líquido presente em seu interior. No entanto, elas geralmente conseguem atingir a separação desejada em apenas um ou dois estágios de equilíbrio. São indicadas quando o soluto possui baixa solubilidade no líquido ou quando há reações químicas lentas que exigem um maior tempo de residência.

Independentemente do tipo de equipamento utilizado, a força motriz que impulsiona o escoamento é a gravidade terrestre. Isso implica em algumas limitações em relação à transferência de massa, e conseqüentemente, grandes colunas são frequentemente necessárias para alcançar altos níveis de separação.

A absorção desempenha um papel fundamental em inúmeras aplicações industriais, contribuindo para a purificação de produtos químicos, o controle de poluentes atmosféricos e a

separação de componentes valiosos de correntes gasosas. Seu correto dimensionamento e a escolha do equipamento adequado são essenciais para garantir a eficiência do processo e a conformidade com as especificações desejadas.

4 METODOLOGIA

4.1 Equação de Fenske para o número de estágios mínimo

A Equação de Fenske é uma importante ferramenta utilizada na engenharia química para determinar o número mínimo de estágios necessários em uma coluna de destilação. Essa equação leva em consideração as propriedades físicas dos componentes presentes na mistura e suas interações durante o processo de destilação.

A equação é baseada na volatilidade relativa dos componentes da mistura, que é calculada através dos coeficientes de distribuição (K) e das temperaturas de saturação (T_{sat}). A volatilidade relativa (α) é definida como a razão entre os coeficientes de distribuição de dois componentes diferentes.

$$\alpha_{LK,HK} = \frac{K_{LK}}{K_{HK}} \quad (4.1)$$

A volatilidade relativa média ($\alpha_{\overline{LK,HK}}$) é calculada a partir das volatilidades relativas dos componentes superior (topo) e inferior (fundo).

$$\alpha_{\overline{LK,HK}} = \left(\alpha_{LK,HK-fundo} \cdot \alpha_{LK,HK-topo} \right)^{0.5} \quad (4.2)$$

Com base na volatilidade relativa média e nas composições dos componentes leve (X_D) e pesado (X_B), é possível determinar o número mínimo de estágios (N_{min}) necessários para alcançar a separação desejada.

$$N_{min} = \frac{\log\left(\frac{X_D(LK) \cdot X_B(HK)}{X_B(LK) \cdot X_D(HK)}\right)}{\log(\alpha_{\overline{LK,HK}})} \quad (4.3)$$

A Equação de Fenske permite determinar o número mínimo de estágios para alcançar uma separação eficiente dos componentes da mistura.

4.2 Equação de Underwood

O cálculo da razão mínima de refluxo (R_{min}) é fundamental no projeto de colunas de destilação e requer a consideração de várias propriedades termodinâmicas e condições de alimentação. A equação de Underwood é uma ferramenta essencial para calcular essa razão mínima de refluxo. Para isso, utilizamos a composição de cada componente na mistura, as volatilidades relativas e a razão entre a diferença de entalpias do vapor saturado e a alimentação, pela entalpia de vaporização. As duas equações fundamentais para o cálculo da razão mínima de refluxo são as seguintes:

$$\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,HK} * x_{i,F}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 - q \quad (4.4)$$

$$\sum_{i=1}^C \frac{\alpha_{i,HK} * x_{i,D}}{\alpha_{i,HK} - \theta} = 1 + R_{min} \quad (4.5)$$

Onde:

- q é a condição de alimentação, uma variável extremamente importante não só para o cálculo da vazão de vapor e líquido na coluna, como também na quantidade de vapor requerida no refeedor juntamente com a parcela de condensado necessária no condensador.

- θ é um parâmetro que varia de acordo com o estado da mistura na alimentação.

Existem 5 condições de alimentações possíveis para uma alimentação. Na Tabela 1 encontram-se as condições.

Tabela 1: Condições de Alimentação

Estado da Mistura	q
Vapor superaquecido, acima do ponto de orvalho	<0
Vapor no ponto de orvalho	0
Mistura parcialmente vaporizada	0 ~ 1
Líquido em ponto de bolha	1
Líquido subresfriado, abaixo do ponto de bolha	>1

Fonte: elaborada pelo autor.

Isso faz com que, para cada estado descrito na Tabela 1, seja necessária uma equação específica no cálculo da condição de alimentação.

Tabela 2: Equações para cada condição de alimentação

Estado da Mistura	q
Vapor superaquecido, acima do ponto de orvalho	$-\frac{C_{p,v}(T_f - T_{po})}{\Delta H_{vap}}$
Vapor no ponto de orvalho	$\frac{0}{\Delta H_{vap}} = 0$
Mistura parcialmente vaporizada	$\frac{(1 - f)\Delta H_{vap}}{\Delta H_{vap}}$
Líquido em ponto de bolha	$\frac{\Delta H_{vap}}{\Delta H_{vap}} = 1$
Líquido subresfriado, abaixo do ponto de bolha	$\frac{\Delta H_{vap} + C_{p,l}(T_f - T_{po})}{\Delta H_{vap}}$

Fonte: elaborada pelo autor.

Assim, resolvendo o sistema de equações acima, é possível encontrar a razão mínima de refluxo e, com a razão de refluxo especificada pelo projeto, encontrar a vazão real.

$$R_{\text{projeto}} = \frac{R_{\text{real}}}{R_{\text{min}}} \quad (4.6)$$

4.3 Correlação de Gilliland

A correlação de Gilliland é um método essencial no projeto de colunas de destilação, usado para determinar o número de estágios ideais necessários na coluna. Esta correlação utiliza informações sobre a razão de refluxo e o número mínimo de estágios para estimar o número ideal de estágios. A seguir, detalharemos como a correlação de Gilliland é aplicada.

Primeiro, é necessário calcular as seguintes grandezas:

1. Parâmetros Intermediários:

- **X**: É um parâmetro intermediário, calculado como:

$$X = \frac{R_{\text{real}} - R_{\text{min}}}{R_{\text{real}} + 1} \quad (4.7)$$

- **Y**: Outro parâmetro intermediário, obtido por:

$$Y = \frac{N - N_{\text{min}}}{N + 1} \quad (4.8)$$

2. Número de Estágios Ideais: O número de estágios ideais é calculado usando a seguinte equação empírica proposta por Gilliland:

$$Y = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54.4X}{11 + 117.2X} \right) \left(\frac{X-1}{X^{0.5}} \right) \right] \quad (4.9)$$

Resolvendo essa equação para N , obtemos o número de estágios ideais necessários para a destilação.

Uma vez conhecido o número de estágios ideais, você pode prosseguir para a determinação do estágio de alimentação. Para isso, você pode usar a equação empírica de Kirkbride, que relaciona o número de estágios de retificação (N_{retif}) e o número de estágios de esgotamento (N_{esgot}) com as composições dos componentes leves e pesados nas correntes de alimentação e destilado, bem como as razões de líquido e vapor nas correntes de destilado e fundo:

$$\frac{N_{\text{retif}}}{N_{\text{esgot}}} = \left[\left(\frac{X_{HK,F}}{X_{LK,F}} \right) \left(\frac{X_{LK,B}}{X_{HK,D}} \right) \left(\frac{B}{D} \right) \right]^{0,206} \quad (4.10)$$

O número de estágios na zona de retificação somado ao da zona de esgotamento deve ser igual ao número de estágios ideais. Portanto, o estágio de alimentação (N_F) pode ser determinado da seguinte forma:

$$N_F = N_{\text{retif}} + 1 \quad (4.11)$$

Com isso, a correlação de Gilliland permite calcular não apenas o número de estágios ideais para a coluna de destilação, mas também o estágio de alimentação, o que é fundamental para o projeto e operação eficiente de colunas de destilação multicomponentes.

4.4 Número de estágios reais

O número de estágios reais em uma coluna de destilação é um parâmetro crucial para avaliar o desempenho do processo de separação. Depois de aplicar o método FUG para encontrar o número de estágios ideais em uma coluna de destilação, é essencial calcular o número de estágios reais para obter uma estimativa mais precisa do sistema.

Para determinar o número de estágios reais, é necessário calcular a eficiência de cada prato na coluna. A eficiência de um prato é uma medida da eficácia da separação que ocorre em cada estágio da coluna. Existem diversos modelos experimentais disponíveis para calcular a eficiência, e um dos mais amplamente utilizados é a correlação de O'Connell. Essa correlação é conhecida por fornecer um bom ajuste para dados experimentais em uma ampla gama de misturas, tornando-a uma escolha popular na indústria de destilação.

A correlação de O'Connell é expressa pela seguinte equação:

$$\log E_o = 1,597 - 0,199 \log \left(\frac{KM_l \mu_l}{\rho_l} \right) - 0,0896 \left[\log \left(\frac{KM_l \mu_l}{\rho_l} \right) \right]^2 \quad (4.12)$$

Nesta equação, E_o representa a eficiência do prato, K é o coeficiente de equilíbrio, M_l é a massa molar do componente líquido, μ_l é a viscosidade do componente líquido, e ρ_l é a densidade do componente líquido.

Uma vez que a eficiência de cada prato tenha sido determinada, podemos prosseguir para o cálculo do número de estágios reais. Utilizando uma média entre as composições de destilado e de condensado, o número de estágios reais (N) é calculado da seguinte forma:

$$N = \frac{N_{\text{ideal}}}{E_o} \quad (4.13)$$

Onde N_{ideal} é o número de estágios ideais, que é encontrado usando métodos teóricos ou gráficos, e E_o é a eficiência do prato conforme calculada pela correlação de O'Connell.

4.5 Cálculo do diâmetro da coluna

Para determinar o diâmetro da coluna, empregamos um método gráfico que leva em consideração a velocidade máxima do gás e o parâmetro de fluxo para diferentes espaçamentos de pratos.

O processo de cálculo envolve várias etapas. Inicialmente, é necessário realizar um balanço molar no estágio de alimentação da coluna. As vazões molares de líquido (L e \bar{L}) e vapor (V e \bar{V}) são fundamentais para esse cálculo, juntamente com a condição de alimentação (q).

As vazões de líquido e vapor que deixam o estágio de alimentação podem ser definidas como segue:

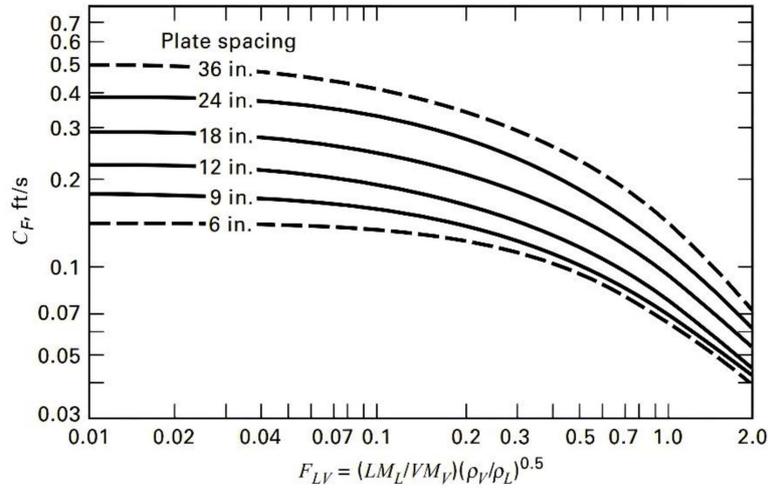
$$\bar{V} = V + (q - 1)F \quad (4.14)$$

$$\bar{L} = L + qF \quad (4.15)$$

O próximo passo é calcular o parâmetro de fluxo (F_{lv}). Com base na escolha do espaçamento de prato, a velocidade máxima do gás é encontrada usando o Gráfico 1, que representa a capacidade de inundação em uma coluna de pratos. A equação para F_{lv} é dada por:

$$F_{lv} = \left(\frac{\bar{L}}{\bar{V}}\right) \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} \quad (4.16)$$

Gráfico 1: Capacidade de inundação em uma coluna de pratos



Fonte: Adaptado de Seader, Henley (2010)

A velocidade máxima do gás ($V_{fg_{m\acute{a}x}}$) é definida por:

$$V_{fg_{m\acute{a}x}} = C_F \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g}} \quad (4.17)$$

No entanto, esse valor de velocidade máxima do gás precisa ser corrigido considerando o sistema e a mistura. Portanto, a velocidade máxima real do gás ($V_{g_{m\acute{a}x}}$) é dada por:

$$V_{g_{m\acute{a}x}} = V_{fg_{m\acute{a}x}} F_l F_{sis} \quad (4.18)$$

Onde F_{sis} varia entre 0,8 e 1, dependendo das propriedades do sistema, e F_l é calculado usando a correlação experimental:

$$F_l = \left(\frac{\sigma_l}{0,02} \right)^{0,2} \quad (4.19)$$

Uma vez que a velocidade máxima do gás tenha sido determinada, podemos calcular a área mínima de contato para a transferência de massa entre as duas fases. Isso é essencial para dimensionar adequadamente o equipamento, levando em conta erros e

inconsistências. O fator de inundação (F_{inund}) para os pratos é definido entre 0,5 e 0,8. A área mínima de contato (A_a) é calculada da seguinte maneira:

$$A_a = \frac{V_{g_{m\acute{a}x}}}{\rho_g(F_{inund}V_f)} \quad (4.20)$$

Com a área ativa mínima determinada, podemos prosseguir com o cálculo do diâmetro da coluna usando a razão de downcomer, que é definida pela equação a seguir:

$$\frac{A_o}{A_a} = \begin{cases} 0,1, & F_{lv} \leq 0,1 \\ 0,1 + \frac{F_{lv}-0,1}{9}, & 0,1 \leq F_{lv} \leq 1,0 \\ 0,2, & F_{lv} \geq 1,0 \end{cases} \quad (4.21)$$

Assim, o diâmetro da coluna (D_t) pode ser calculado da seguinte forma:

$$D_t = \left[\frac{4A_a}{\left(1 - \frac{A_o}{A_a}\right)\pi} \right]^{0,5} \quad (4.22)$$

Para confirmar o diâmetro calculado, é utilizada a Tabela 3, que relaciona o diâmetro da coluna com o espaçamento de prato, permitindo uma verificação prática e uma possível otimização do projeto.

Tabela 3: Valores para espaçamento em função do diâmetro da coluna

Diâmetro da Coluna	Espaçamento
-	0,15
≤ 1	0,5
1 – 3	0,6
3 – 4	0,75
4 – 8	0,9

Fonte: elaborada pelo autor.

O cálculo do diâmetro da coluna é um procedimento complexo e envolve várias variáveis, mas é fundamental para garantir a eficiência e o desempenho adequado de colunas de destilação em processos industriais.

4.6 Cálculo da altura da coluna

Depois de determinar o número de estágios reais necessários para o processo de destilação, o próximo passo é escolher o tipo de prato a ser utilizado, juntamente com suas propriedades físicas, como espessura e material.

A escolha do tipo de prato depende fortemente do tipo de operação a ser realizada e das propriedades dos componentes envolvidos no processo, incluindo considerações sobre corrosão e viscosidade. É fundamental selecionar pratos que sejam adequados para as condições de operação e que proporcionem uma eficiente separação dos componentes desejados.

O cálculo da altura da coluna (H_t) pode ser realizado da seguinte forma:

$$H_t = (N - 1) \cdot H_{\text{espaçamento}} + H_{\text{adicional}} + N \cdot H_{\text{espessura}} \quad (4.23)$$

Onde:

- N é o número de estágios reais, que foi previamente determinado.
- $H_{\text{espaçamento}}$ é a altura entre os pratos ou estágios, que é uma característica específica do tipo de prato escolhido.
- $H_{\text{adicional}}$ representa uma altura adicional no topo e no fundo da coluna. Essa altura adicional é projetada para aumentar a capacidade do fundo da coluna e facilitar a remoção do líquido arrastado no topo.

O cálculo da altura da coluna leva em consideração a distância entre os pratos, a altura adicional no topo e no fundo da coluna e a espessura dos pratos.

5 DESENVOLVIMENTO DA APLICAÇÃO WEB

A criação de uma aplicação web como ferramenta educacional para auxiliar no dimensionamento de equipamentos industriais envolvidos em operações com estágios é um passo significativo em direção ao aprimoramento do processo de ensino e aprendizado na engenharia química.

O aplicativo desenvolvido neste trabalho foi projetado com a intenção de fornecer aos estudantes uma maneira eficiente de realizar cálculos e análises de projeto, permitindo que eles se concentrem mais na compreensão dos conceitos subjacentes e nas implicações práticas de suas decisões.

5.1 Objetivos do Aplicativo

O principal objetivo do aplicativo é simplificar o processo de dimensionamento de equipamentos industriais relacionados a operações com estágios. Isso é alcançado por meio da automação de cálculos complexos, que normalmente seriam demorados e suscetíveis a erros se realizados manualmente.

Os objetivos específicos do aplicativo incluem:

- Facilitar o dimensionamento de equipamentos, como torre de destilação e de absorção, por meio da automação de cálculos envolvidos nesse processo.
- Fornecer uma interface de usuário intuitiva e amigável que permita aos estudantes inserir facilmente dados relevantes e receber resultados precisos.
- Permitir a análise de diferentes cenários de projeto, ajustando variáveis e parâmetros para avaliar o impacto nas dimensões e no desempenho do equipamento.
- Promover a compreensão mais profunda dos princípios subjacentes às operações com estágios, uma vez que os alunos podem focar na análise crítica dos resultados e nas implicações das decisões de projeto.

5.2 Descrição Funcional

O aplicativo foi projetado para ser abrangente e versátil, cobrindo várias operações com estágios e equipamentos relacionados à transferência de massa. Abaixo estão as principais funcionalidades do aplicativo:

Seleção de Operação com estágios: Os usuários podem escolher entre diferentes operações com estágios, como colunas de destilação e absorção em suas diferentes equações. A seleção da operação com estágios é o ponto de partida para o dimensionamento do equipamento.

Entrada de Dados: O aplicativo permite aos usuários inserir dados relevantes para o dimensionamento do equipamento, como as substâncias envolvidas no processo, os parâmetros de operação e os critérios de projeto.

Cálculos Automatizados: Com base nos dados fornecidos, o aplicativo realiza cálculos automatizados para determinar as dimensões e as especificações necessárias do equipamento. Isso inclui o cálculo de diâmetros, velocidades, vazões, áreas de superfície e outros parâmetros relevantes.

Análise de Cenários: Os usuários podem ajustar variáveis e parâmetros, permitindo a análise de diferentes cenários de projeto. Isso oferece insights sobre como as mudanças nas condições afetam as dimensões e o desempenho do equipamento.

Resultados Detalhados: O aplicativo fornece resultados detalhados, incluindo as dimensões do equipamento, o desempenho esperado e outras informações relevantes. Isso permite que os alunos compreendam completamente os resultados e as implicações de suas decisões.

5.3 Implementação Técnica

A implementação técnica do aplicativo envolve a criação de uma interface de usuário interativa e a integração de algoritmos de cálculo avançados. O aplicativo é baseado em tecnologias da web, o que o torna acessível a partir de qualquer dispositivo com um navegador da web.

As principais etapas de implementação incluem:

Desenvolvimento Front-End: Isso envolve a criação da interface de usuário do aplicativo, que permite aos usuários inserir dados, fazer seleções e visualizar resultados. O desenvolvimento front-end usa tecnologias web padrão, como HTML, CSS e JavaScript.

Desenvolvimento Back-End: O back-end é responsável por processar os dados inseridos pelos usuários, executar os cálculos necessários e retornar os resultados. Isso requer o desenvolvimento de algoritmos eficientes que implementem os cálculos de dimensionamento. Todo o desenvolvimento foi realizado no Framework Django. Visto que, dentro da engenharia química, as ferramentas são produzidas normalmente em python isso inclui um pacote de extrema importância que é a biblioteca Thermo.

Armazenamento de Dados: Os dados inseridos pelos usuários e os resultados dos cálculos podem ser armazenados temporariamente para facilitar a análise de cenários e a exportação de resultados.

Testes e Depuração: O aplicativo é submetido a testes extensivos para garantir que ele funcione corretamente e forneça resultados precisos e confiáveis. Isso inclui testes de usabilidade, testes de integração, depuração de erros e otimização de desempenho.

Segurança: Garantir a segurança dos dados do usuário é uma consideração fundamental. O aplicativo deve implementar medidas de segurança, como criptografia de dados e autenticação, para proteger as informações inseridas pelos usuários.

Hospedagem e Acesso: O aplicativo é hospedado em um servidor web para que os alunos tenham acesso a ele a partir de qualquer dispositivo com conexão à internet. A hospedagem também envolve a manutenção e o monitoramento contínuo do aplicativo para garantir que ele esteja sempre disponível.

Atualizações e Melhorias: A evolução do conhecimento e das tecnologias pode exigir atualizações e melhorias no aplicativo ao longo do tempo. Isso pode incluir a adição de novas operações com estágios, aprimoramento de algoritmos ou atualização da interface do usuário.

5.4 Benefícios Educacionais

O desenvolvimento e uso deste aplicativo educacional oferece diversos benefícios educacionais, tanto para os alunos quanto para os educadores na área de engenharia química:

Aprendizagem Ativa: O aplicativo promove a aprendizagem ativa, incentivando os alunos a resolver problemas complexos e realizar análises críticas, em vez de memorizar fórmulas. Isso aumenta o envolvimento e a retenção de conhecimento.

Autonomia do Aluno: Os estudantes têm a oportunidade de explorar diferentes cenários de projeto e ajustar variáveis, o que os capacita a tomar decisões de projeto informadas e independentes.

Eficiência de Ensino: A automação de cálculos complexos economiza tempo, permitindo que os educadores se concentrem em conceitos-chave e discussões em sala de aula, em vez de realizar cálculos repetitivos.

Análise Profunda: Os resultados detalhados fornecidos pelo aplicativo permitem que os alunos compreendam completamente as implicações de suas decisões de projeto e analisem a fundo o desempenho do equipamento.

Preparação para a Indústria: Os alunos ganham experiência prática em dimensionamento de equipamentos, uma habilidade valiosa na indústria de engenharia química.

Flexibilidade e Acessibilidade: O acesso à aplicação web a partir de qualquer dispositivo com conexão à internet oferece flexibilidade e acessibilidade a um amplo público de estudantes.

Redução de Erros: A automação de cálculos reduz erros humanos, garantindo resultados precisos e consistentes.

5.5 Desenvolvimento da ferramenta

Esta aplicação foi construída usando três linguagens principais: HTML, CSS e Python, sendo Python a linguagem central de programação. Será explorada detalhadamente a escolha das tecnologias, a justificativa por trás dessas escolhas e o funcionamento geral da aplicação.

O HTML (HyperText Markup Language) e o CSS (Cascading Style Sheets) desempenham um papel fundamental na estrutura e no estilo da página web. No entanto, é importante destacar que, estritamente falando, o HTML e o CSS não são linguagens de programação, mas sim linguagens de marcação e estilo.

O HTML é responsável por definir a estrutura da página, como cabeçalhos, parágrafos, tabelas e formulários. Ele permite a criação de elementos que estruturam o conteúdo da página, tornando-o semanticamente correto. Por exemplo, o HTML define que um texto está em um parágrafo, que um título é um cabeçalho e assim por diante. Essas marcações fornecem significado ao conteúdo, o que é fundamental para a acessibilidade e a interpretação correta pelos navegadores.

O CSS controla a apresentação e o design da página, incluindo cores, fontes, margens e espaçamentos. Ele define como os elementos HTML são exibidos na página, tornando-a esteticamente agradável e amigável para o usuário. O CSS permite separar o conteúdo (HTML) da apresentação (design), facilitando a manutenção e o ajuste do estilo da página.

Embora o HTML e o CSS não sejam linguagens de programação no sentido tradicional, eles são essenciais para criar uma interface de usuário amigável e intuitiva.

A escolha de Python como a linguagem de programação principal para o desenvolvimento desta aplicação é baseada em vários motivos sólidos. Em primeiro lugar, o Python é amplamente utilizado na engenharia química e em muitas áreas da ciência e

engenharia, tornando-o uma escolha natural para essa aplicação. Além disso, a flexibilidade do Python permite a incorporação de novos scripts desenvolvidos por professores e alunos, consolidando todos os recursos em um único ambiente.

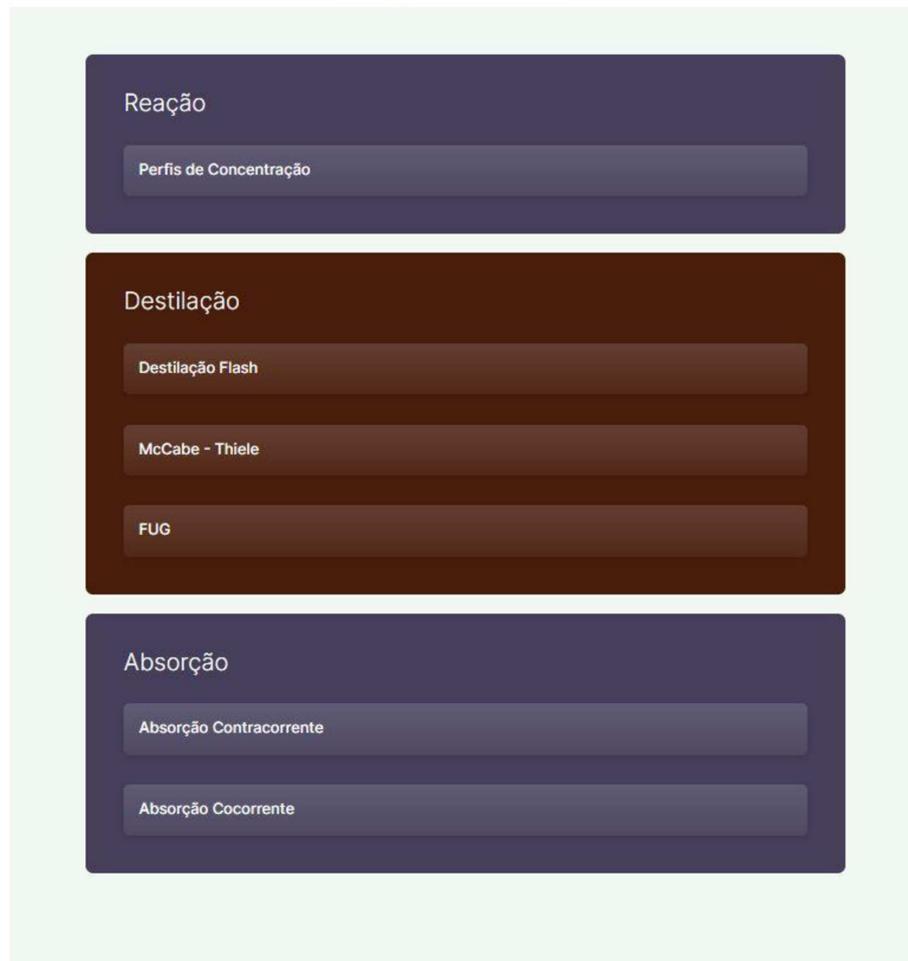
A biblioteca Thermo, que é uma biblioteca Python para cálculos termodinâmicos e termodinâmica aplicada, oferece diversas ferramentas que são essenciais para o dimensionamento de equipamentos industriais. Isso simplifica a implementação de funcionalidades avançadas e a obtenção de dados necessários para o dimensionamento.

O framework Django foi a escolha ideal para o desenvolvimento desta aplicação. Um framework, em termos gerais, é um conjunto de ferramentas, bibliotecas e convenções que simplificam o desenvolvimento de aplicações web. Django é um framework de alto nível para Python que oferece uma ampla gama de recursos e funcionalidades para o desenvolvimento web.

Uma das principais razões para a escolha do Django é que ele já foi projetado para se comportar como um servidor web. Isso significa que ele é capaz de receber solicitações da web e retornar respostas, que geralmente são conteúdo HTML. O Django também disponibiliza várias ferramentas integradas, como autenticação de usuários, administração de conteúdo, geração de mapas do site e segurança contra falsificação de solicitações. Essas funcionalidades são essenciais para uma aplicação web robusta e segura.

A aplicação foi estruturada de acordo com as melhores práticas de desenvolvimento em Python e Django. Ela apresenta um menu principal com recursos que permitem aos usuários escolher o tipo de cálculo que desejam realizar, conforme mostra a Figura 2. Cada tipo de dimensionamento é organizado por categorias na página inicial.

Figura 2: Menu principal



Fonte: elaborada pelo autor.

Quando o usuário seleciona o cálculo que deseja dentre os listados na página inicial, estes são direcionados para uma página onde podem inserir os dados necessários. A Figura 3 mostra a página para cálculo da destilação Flash como exemplo. A aplicação realiza cálculos com base nas informações fornecidas e fornece os resultados na forma de gráficos e/ou números.

Figura 3: Página para cálculo da destilação Flash

Flash

Substância 1
n-butane

Substância 2
n-hexane

Temperatura (°C)
Temperatura (°C)

Composição da substancia 1 na entrada
Composição da substancia 1 na entrada

fração da fase vapor na alimentação
fração da fase vapor na alimentação

Raoult Modificada?
Raoult

Calcular

Fonte: elaborada pelo autor.

Além disso, a aplicação foi desenvolvida com responsividade em mente. Isso significa que ela pode ser acessada por meio de dispositivos móveis, como smartphones e tablets, garantindo a acessibilidade dos alunos e profissionais em diferentes plataformas. A interface se adapta automaticamente ao tamanho da tela do dispositivo, proporcionando uma experiência de usuário consistente.

Com o intuito de assegurar o acesso aberto à ferramenta, todo o código foi liberado gratuitamente em um repositório público no GitHub, uma plataforma de hospedagem de código-fonte. O código-fonte da aplicação encontra-se disponível em <https://github.com/antcarlosrbj/TCC>. E o aplicativo pode ser acessado em <https://tcc.carlosbezerrajr.com>.

6 RESULTADOS

Para validar os resultados gerados pela aplicação, recorreremos a diversas fontes a fim de obter parâmetros de entrada e resultados esperados. Entre essas fontes, incluem-se exemplos resolvidos e problemas com gabarito extraídos dos livros de Azevedo, Alves (2017) e Geankoplis (1993). Os enunciados dos problemas, dados de entrada e gabaritos oficiais serão apresentados a seguir. Ao final de cada seção, cada valor calculado pela aplicação será confrontado com o gabarito fornecido. Destaca-se que todas as unidades dos gabaritos foram convertidas para o Sistema Internacional (S.I.), visando facilitar as comparações entre os valores.

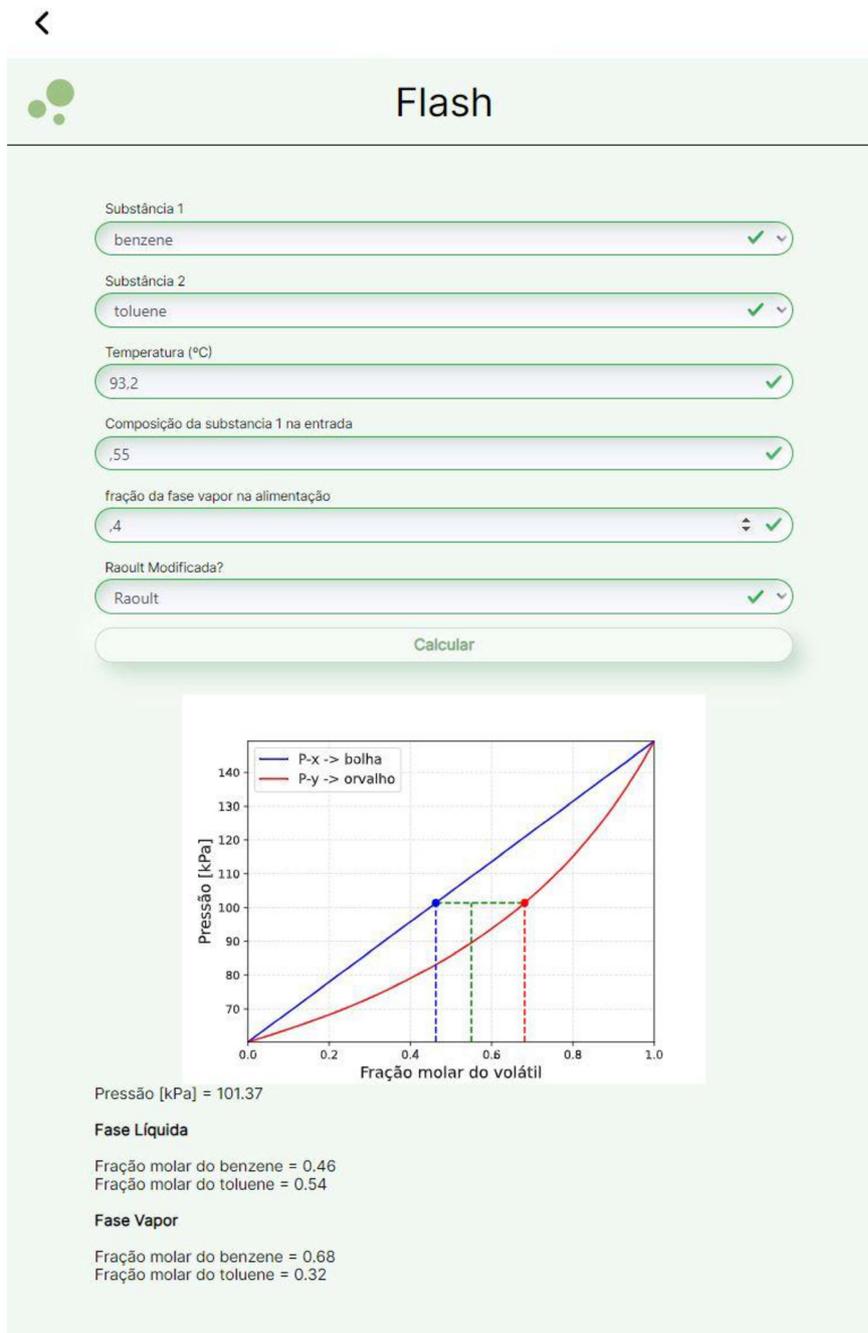
6.1 Calculadora Destilação Flash

Para a validação desta calculadora do aplicativo, foi utilizado um problema adaptado da lista de exercícios da Disciplina de Operações Unitárias III da Escola de Engenharia de Lorena – EEL da Universidade de São Paulo – USP ministrada pela Prof^a. Dr^a. Simone de Fátima Medeiros.

Uma mistura composta por benzeno e tolueno de composição $z_a = 0,55$ em fração molar de benzeno, entra a $30\text{ }^\circ\text{C}$ em um aparato de destilação flash e vaporiza-se 40 % da alimentação. Determinar a composição do vapor e do líquido residual e a temperatura em que se efetiva a separação.

Os dados foram inseridos conforme a Figura 4. A temperatura foi alterada até obter o valor da pressão atmosférica. A Tabela 4 apresenta a comparação entre os resultados gerados pela aplicação e o gabarito do problema.

Figura 4: Dados do problema 6.1 com resultado



Fonte: elaborada pelo autor.

Tabela 4: Comparação dos resultados do aplicativo e gabarito do problema 6.1

Parâmetros	Aplicativo	Gabarito	Diferença
Fração molar do Benzeno (Fase Líquida)	0,46	0,46	0,00%
Fração molar do Tolueno (Fase Líquida)	0,54	0,54	0,00%
Fração molar do Benzeno (Fase Vapor)	0,68	0,68	0,00%
Fração molar do Tolueno (Fase Vapor)	0,32	0,32	0,00%
Temperatura	93,2 °C	93,4 °C	-0,21%

Fonte: elaborada pelo autor.

6.2 Calculadora McCabe - Thiele

Para a validação desta calculadora do aplicativo foi utilizado o Exemplo 4.2 (adaptado) da página 128 do livro Engenharia de Processos de Separação de Azevedo, Alves (2017).

Pretendem-se destilar a 1 atm 100 kmol/h de uma mistura líquida saturada equimolar de benzeno e tolueno, de modo a obter um destilado com 80mol% de benzeno e um resíduo com 8 mol% de benzeno. Determine o número de andares de equilíbrio usando uma razão de refluxo 1.85 vezes superior à razão de refluxo mínima.

Os dados foram inseridos conforme a Figura 5. Obtendo o resultado apresentado na Figura 6. A Figura 5 mostra o gráfico que foi obtida na solução do livro.

Por fim, a Tabela 5 apresenta a comparação entre os resultados gerados pela aplicação e o gabarito do problema.

Figura 6: Dados de entrada do problema 6.2

<

McCabe - Thiele

Substância 1
benzene ✓

Substância 2
toluene ✓

Pressão (kPa)
100 ✓

Composição da substancia 1 na entrada
0,5 ✓

Fração molar do destilado
0,8 ✓

Fração molar do residuo
0,08 ✓

q
1 ✓

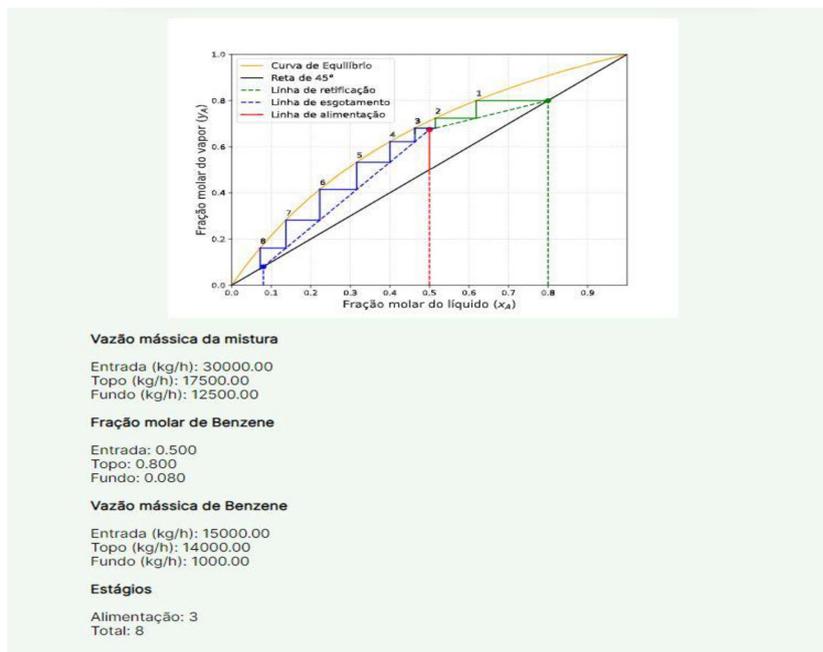
Vazão mássica de alimentação
100 ✓

Razão de reciclo
1,87 ✓

Calcular

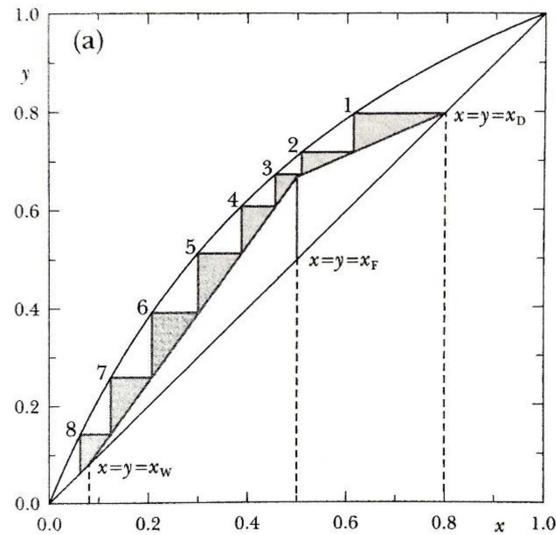
Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 5: Resultado do problema 496.2



Fonte: elaborada pelo autor.

Figura 7: Resultado gráfico do problema 6.2



Fonte: Azevedo, Alves (2017)

Tabela 5: Comparação dos resultados do aplicativo e gabarito do problema 6.2

Estágios	Aplicativo	Gabarito	Diferença
Totais	8	8	0,00%
Alimentação	3	3	0,00%

Fonte: elaborada pelo autor.

6.3 Calculadora FUG

Para a validação desta calculadora do aplicativo foi utilizado o Exemplo 5.2 (adaptado) da página 232 do livro Engenharia de Processos de Separação de Azevedo, Alves (2017).

Utiliza-se uma coluna de destilação com um condensador total e um ebulidor parcial para separar, a 1atm, 100 kmol/h de uma mistura gasosa saturada com 40 mol% de benzeno, 30 mol% de tolueno e 30 mol% de cumeno. Pretendem-se recuperar 95% de tolueno no destilado e uma recuperação de 95% de cumeno no resíduo. O refluxo é reciclado para a coluna sob a forma de líquido saturado e os caudais de líquido e de vapor são aproximadamente constantes de prato para prato. As volatilidades relativas são constantes e, considerando o benzeno como referência, são iguais a $\alpha_{benzeno/tolueno} = 2,25$ e $\alpha_{cumeno/tolueno} = 0,21$. Calcule o número de estágios de equilíbrio necessários na operação de refluxo total (N_{min}), a razão de refluxo mínima (R_{min}) e número de andares de equilíbrio (N).

Os dados foram inseridos conforme a Figura 8. A Tabela 6 apresenta a comparação entre os resultados gerados pela aplicação e o gabarito do problema.

Figura 8: Dados do problema 6.3 com resultado

The screenshot shows the 'FUG' application interface. It features a list of input parameters, each with a text field and a green checkmark on the right, indicating that the input is valid. The parameters and their values are:

- Alimentação [mol/h]: 100
- q: 0
- Fração de alimentação do componente não-chave leve: 0,4
- Fração de alimentação do componente chave leve: 0,3
- Fração de alimentação do componente chave pesada: 0,3
- Fração de recuperação do componente chave leve no destilado: 0,95
- Fração de recuperação do componente chave pesada no resíduo: 0,95
- Volatilidade relativa LNK/LK: 2,25
- Volatilidade relativa HK/LK: 0,21

At the bottom of the input section is a 'Calcular' button. Below the button, the results are displayed:

- Número mínimo de estágios = 3,77
- Razão de Refluxo mínima = 0,64
- Número de estágios de equilíbrio = 6

Fonte: elaborada pelo autor.

Tabela 6: Comparação dos resultados do aplicativo e gabarito do problema 6.3

Parâmetros	Aplicativo	Gabarito	Diferença
N_{min}	3,77	3,80	-0,79%
R_{min}	0,64	0,64	0,00%
N	6	6	0,00%

Fonte: elaborada pelo autor.

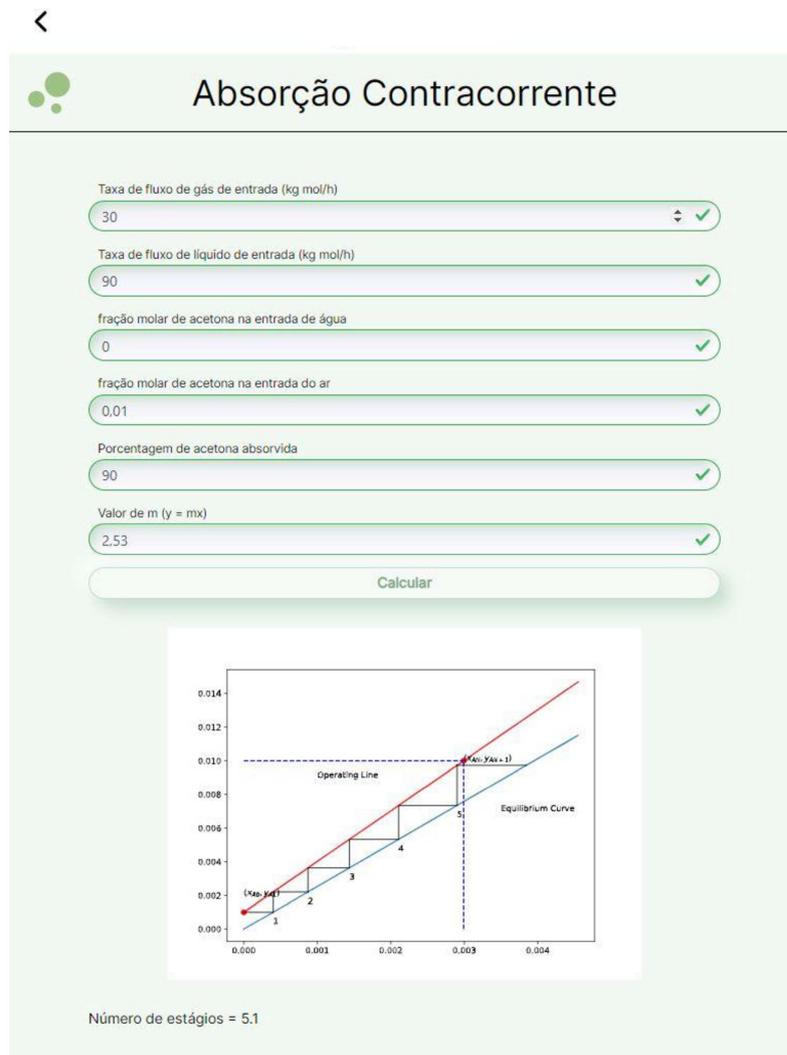
6.4 Calculadora Absorção

Para a validação desta calculadora do aplicativo foi utilizado o Exemplo 10.3-2 (adaptado) da página 591 do livro Transport Processes and Unit Operations de Geankoplis (1993).

Deseja-se absorver 90% da acetona em um gás contendo 1,0 mol% de acetona no ar em uma coluna de estágios em contracorrente. O fluxo total de gás de entrada para a torre é de 30,0 kg mol/h, e o fluxo total de água pura de entrada a ser usado para absorver a acetona é de 90 kg mol H₂O/h. O processo deve operar isotermicamente a 300 K e a uma pressão total de 101,3 kPa. A relação de equilíbrio para a acetona no gás-líquido é $y = 2,53x$. Determine o número de estágios teóricos necessários para esta separação.

Os dados foram inseridos conforme a Figura 9. A Tabela 7 apresenta a comparação entre os resultados gerados pela aplicação e o gabarito do problema.

Figura 9: Dados do problema 6.4 com resultado



Fonte: elaborada pelo autor.

Tabela 7: Comparação dos resultados do aplicativo e gabarito do problema 6.4

Parâmetros	Aplicativo	Gabarito	Diferença
Número de estágios	5,1	5,2	-1,92%

Fonte: elaborada pelo autor.

7 CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo principal o desenvolvimento de uma aplicação web em Django para o dimensionamento de equipamentos industriais, com foco nas operações com estágios. O propósito dessa aplicação foi fornecer uma ferramenta de auxílio pedagógico que permitisse aos alunos aprender de forma prática e interativa os conceitos de dimensionamento de equipamentos industriais relacionados a operações com estágios.

A aplicação desenvolvida desempenha um papel crucial no ensino de operações com estágios, promovendo a aprendizagem ativa, a análise crítica e a autonomia do aluno. Ela oferece uma abordagem baseada em problemas, na qual os alunos podem realizar cálculos de dimensionamento de equipamentos e analisar cenários específicos. Isso resulta em uma compreensão profunda dos conceitos subjacentes e das implicações práticas das decisões de projeto.

No mundo atual, onde a tecnologia desempenha um papel cada vez mais importante na indústria e na educação, a criação de ferramentas educacionais como esta aplicação web é fundamental para preparar os futuros engenheiros químicos para os desafios e oportunidades que encontrarão em suas carreiras. A aplicação web não substitui o conhecimento teórico, mas complementa-o, permitindo que os alunos desenvolvam habilidades práticas e analíticas essenciais.

A acessibilidade e a disponibilidade da aplicação são pontos-chave. A aplicação é gratuita e acessível online, o que atende às expectativas de acessibilidade. Além disso, sua capacidade de se adaptar a diferentes dispositivos, como computadores, notebooks, tablets e celulares, torna-a acessível a um amplo público.

Os exemplos resolvidos e problemas com gabarito demonstraram a precisão da ferramenta em fornecer resultados consistentes. No entanto, algumas melhorias podem ser consideradas para futuros desenvolvimentos. A acessibilidade da aplicação pode ser

aprimorada, com adaptações para pessoas com deficiência visual e recursos como modo de alto contraste, tamanho de fonte ajustável e leitura assistida para cegos.

Além disso, a hospedagem da aplicação pode ser aprimorada para suportar acessos simultâneos, uma vez que o plano atual de hospedagem gratuito pode ter limitações nesse aspecto.

Para trabalhos futuros, algumas sugestões incluem a criação de interfaces interativas de simulação, a inclusão de novos cálculos relevantes para a disciplina e a expansão das páginas educativas, apresentando os cálculos e fluxogramas das rotinas de dimensionamento.

Também seria interessante a aplicação prática da ferramenta em uma turma real da disciplina que envolva o cálculo de operações com estágios para coleta de impressões e validação da experiência ao longo de um semestre.

Por fim, a aplicação pode ser expandida para abranger outras operações com estágios, considerando a variedade de scripts Python disponíveis e inexplorados. Isso proporcionaria um uso valioso para trabalhos anteriormente não utilizados e promoveria a interdisciplinaridade na educação em engenharia química.

Este trabalho visa o uso da tecnologia para aprimorar o ensino de operações com estágios e no desenvolvimento de soluções práticas para desafios complexos na engenharia química. A aplicação desenvolvida é uma ferramenta versátil e valiosa que pode beneficiar ainda mais estudantes e profissionais em sua jornada de aprendizado e prática na engenharia química.

REFERÊNCIAS

AZEVEDO, Edmundo Gomes de; ALVES, Ana Maria. **Engenharia de processos de separação**. 3. ed. Lisboa: IST Press, 2017.

CREMASCO, Marco Aurélio. **Operações unitárias em sistemas particulados e fluidomecânicos**. São Paulo: Blucher, 2012.

DUCH, Barbara; GROH, Susan; ALLEN, Deborah. **The Power of Problem-Based Learning**. Londres: Routledge, 2001.

GEANKOPLIS, Christie. **Transport Processes and Unit Operations**. 3. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1993.

HMELO-SILVER, Cindy; DUNCAN, Ravit Golan; CHINN, Clark. **Scaffolding and Achievement in Problem-Based and Inquiry Learning: A Response to Kirschner, Sweller, and Clark (2006)**. Londres: Educational Psychologist, 2007.

HOLLAND, Charles Donald. **Fundamentals of Multicomponent Distillation**. Nova York: McGraw-Hill, 1997.

FCTUC DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA. **Portal de Engenharia Química: Fundamentos**. Coimbra: Universidade de Coimbra, 2007. Disponível em: <http://labvirtual.eq.uc.pt/siteJoomla/index.php?Itemid=143>. Acesso em: 02 set. 2023.

MCCABE, Warren; SMITH, Julian; HARRIOTT, Peter. **Unit Operations of Chemical Engineering**. 5. ed. Nova York: McGraw-Hill, 1993.

SCHASCHKE, Carl. **Mass Transfer in Multicomponent Mixtures**. Oxônia: Butterworth-Heinemann, 2014.

SEADER; HENLEY, Ernest. **Separation Process Principles**. John Wiley & Sons, 2011.

SOLEN, Kenneth; HARB, John. **Introduction to Chemical Engineering: Tools for Today and Tomorrow**. John Wiley & Sons, 2018.

TREYBAL, Robert Ewald. **Mass-Transfer Operations**. 3. Ed. McGraw-Hill, 1980.

HASS, Joel; HEIL, Christopher; WEIR, Maurice. **Thomas' Calculus**. 14. ed. Londres: Pearson, 2017.