



Anais do XXXIV COBENGE. Passo Fundo: Ed. Universidade de Passo Fundo, Setembro de 2006.
ISBN 85-7515-371-4

EXCEL COMO FERRAMENTA DIDÁTICA DE APOIO NA ANÁLISE DE PROCESSOS DE FLASH & DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTES

Oswaldo Curty da Motta Lima – oswaldo@deq.uem.br

Daniel Tait Vareschini – mfdom@ibest.com.br

Vinicius Oliveira Uemura – vininiusou@gmail.com

Maria Angélica Simões Dornellas de Barros – angelica@deq.uem.br

Universidade Estadual de Maringá – Departamento de Engenharia Química

Avenida Colombo 5790, Bloco D-90

87020-900 – Maringá, Paraná

Resumo: Os processos de flash e destilação têm como objetivo a separação dos componentes de uma determinada mistura. Para misturas com mais de dois componentes, podem ser utilizados métodos rigorosos de cálculo, normalmente trabalhosos, estando, atualmente, associados à utilização de pacotes comerciais. Neste contexto, este trabalho procurou utilizar uma metodologia baseada em métodos de cálculo simplificados, sugerida pela literatura, o que permite uma análise preliminar de diferentes configurações de projeto ou operacionais, na busca de melhores condições do processo de destilação desejado. Para implementação desta metodologia, foi utilizado o software EXCEL como ferramenta computacional didática de apoio, em função da sua disponibilidade, facilidade de manuseio e, principalmente, potencialidade de trabalho. Desta forma, a utilização do EXCEL permite que os conceitos envolvendo a separação de misturas multicomponente sejam melhor trabalhados, proporcionando uma melhor fixação do assunto e uma maior capacidade de ação ao enfrentar novos problemas, tanto em sala de aula, quanto no exercício profissional.

Palavras-chave: Destilação; Flash; Multicomponente; Excel

1. INTRODUÇÃO

Separações/destilações *flash*, muito comuns na indústria, particularmente no refino de petróleo, são processos normalmente realizados em tambores/vasos isolados termicamente, nos quais ocorre a separação de uma mistura líquida/vapor em uma fase líquida em equilíbrio termodinâmico com uma fase vapor. Mesmo quando algum outro método de separação pode ser usado, não é incomum se utilizar um “pré-*flash*” para adequar as correntes alimentadas em uma coluna de destilação.

Cálculos em *flash* binário fazem uso de técnicas gráficas, permitindo uma fácil visualização e uma compreensão adequada do processo. No entanto, estes métodos quase sempre se tornam

inconvenientes e cansativos quando da análise de diferentes configurações operacionais, e no caso de *flash* multicomponente. Neste caso, o problema se torna mais complexo, devido a presença de mais de dois componentes nos produtos de topo e fundo.

Colunas de destilação multicomponente são equipamentos de ampla utilização na indústria química, sendo, por isso, parte importante do currículo da disciplina de Operações Unitárias em cursos de Engenharia. No entanto, o ensino do tópico de destilação se baseia na destilação binária, devido a facilidade na fixação de conceitos, no que diz respeito a separação de apenas dois componentes. Porém, existem diferenças fundamentais entre as duas operações que devem ser entendidas completamente para se projetar um sistema multicomponente de forma correta.

Estas diferenças envolvem o uso de regras de fases para especificar as condições termodinâmicas de equilíbrio, pois, em destilação multicomponente, um componente pode ser o mais volátil em uma parte da coluna mais não necessariamente em outra parte, sendo que os componentes de interesse no topo de uma coluna multicomponente não apresentam necessariamente as maiores composições.

Para contornar os problemas relativos as diferentes combinações de componentes e suas composições no projeto/análise de colunas multicomponentes, utilizou-se, neste trabalho, um método simplificado (método rápido ou “short-cut method”), que faz uso das metodologias desenvolvidas por FENSKE (1932), para determinar o número mínimo de estágios em refluxo total, UNDERWOOD (1948), para a determinação do refluxo mínimo, ERBAR & MADDOX (1961), para a determinação do número de estágios ideais e KIRKBRIDE (1944), na determinação do prato de alimentação.

Deste modo, para que a solução pudesse ser apresentada de forma rápida e eficiente, implementou-se os cálculos envolvidos em EXCEL, aproveitando sua potencialidade para tornar o procedimento mais didático, de forma a permitir a exploração de um maior número de alternativas para o problema em questão, proporcionando uma busca mais eficiente pela melhor solução.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Destilação *flash*

Na solução de um problema de destilação *flash* multicomponente, deve-se resolver simultaneamente as equações de operação e de equilíbrio, determinando-se a vazão e a composição de cada corrente de saída do vaso de *flash*, a partir dos balanço de massa.

2.2 Destilação multicomponente - Método rápido

Método rápido

O método rápido, citado em MOTTA LIMA & BARROS (2005), e também chamado de método pseudobinário, BLACKADDER & NEDHERMAN (2005), supõem, como aproximação inicial, que o fracionamento de uma mistura multicomponente é fundamentada na separação de dois componentes. O componente de interesse do produto de topo passa a ser chamado de chave leve (CL), e o componente de interesse do produto de fundo é chamado de chave pesada (CH). Outra consideração do método é que os componentes mais voláteis do que o chave leve aparecem somente no destilado e os componentes menos voláteis que o chave pesada, somente no produto de fundo. A coluna é analisada como se fosse uma coluna que separasse uma mistura binária dos dois componentes chaves (CL e CH).

Temperaturas de topo e fundo

A composição do vapor que deixa o prato superior de uma coluna, no caso de uma corrente líquida de destilado, tem a mesma composição do líquido; sendo assim, a temperatura de topo

da coluna é determinada encontrando-se o ponto de orvalho na composição do destilado. Por outro lado, para a temperatura de fundo da coluna, é determinado o ponto de bolha na composição do produto de fundo.

Para uma substância com fração molar x no líquido, a fração molar y no vapor com o qual está em equilíbrio será igual a $K \cdot x$, sendo K a constante de equilíbrio do sistema. Quando o líquido está em seu ponto de ebulição, a pressão de vapor total é igual a pressão ambiente e $\Sigma(K \cdot x) = 1$, não havendo gás inerte. Essa relação é usada para determinar o ponto de bolha de uma mistura, em uma dada pressão, por tentativa e erro. Já o ponto de orvalho pode ser determinado pela utilização do critério inverso, ou seja, $\Sigma(y/K) = 1$. (BLACKADDER & NEDHERMAN, 2005).

Constante de equilíbrio

A constante de equilíbrio foi determinada utilizando-se as condições de temperatura e pressão da coluna, a partir das equações deduzidas por MCWILLIAMS (1973) para os hidrocarbonetos do nomograma de De Priester, sendo prevista a implementação de novos componentes em uma nova versão do programa.

Número mínimo de estágios (N_m) para refluxo total

O número mínimo de estágios teóricos (N_m) é determinado pela equação de FENSKE (1932), equação 1, aplicada para os dois componentes chave (CL e CH) da coluna. O refluxo total é uma condição limite na qual todo o vapor condensado no topo da coluna retorna a mesma, e não somente uma fração deste, como acontece na operação normal. O refluxo é necessário para manutenção do fluxo descendente de líquido na torre, garantindo o processo de condensação.

$$N_m = \frac{[(x_{ID} \cdot D / x_{hD} \cdot D) / (x_{hB} \cdot B / x_{IB} \cdot B)]}{\log(\alpha_{l,av})} \quad (1)$$

Na equação (1), os sub-índices B e D são relativos às condições na base e no topo da torre de destilação, respectivamente, e, quando acompanhados do segundo sub-índice h ou l, referem-se aos componentes chave pesada e chave leve, respectivamente.

A volatilidade relativa média $\alpha_{l,av}$, apresentada na equação 1, é calculada a partir das volatilidades relativas do chave leve nas temperaturas de topo e fundo da coluna (ver acima), equação 2. A volatilidade de uma substância numa mistura pode ser definida como p/x , em que p é sua pressão parcial e x , sua fração molar no líquido, sendo a volatilidade relativa (α) definida como a razão entre as volatilidades de dois componentes.

$$\alpha_{l,av} = \sqrt{\alpha_{ID} \cdot \alpha_{IB}} \quad (2)$$

Refluxo mínimo

O método de UNDERWOOD (1968) utiliza os valores médios de volatilidade relativa para determinação do refluxo mínimo, R_m , assumindo vazões constantes em ambas as seções da coluna, assim como ocorre na destilação binária pelo método McCabe-Thiele. As equações de Underwood estão representadas pelas equações 3 e 4, sendo o valor de q (equação 3) determinado pela condição térmica da alimentação (condição termodinâmica do fluido), sendo que pode ser alimentada na destilação como líquido sub-resfriado ou saturado, vapor úmido, saturado ou superaquecido. θ é uma variável das equações 3 e 4, cujo valor é determinado por interação, e deve estar entre o valor da volatilidade relativa do chave leve e a do chave pesada, que é igual a 1.

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_i \cdot x_{iF}}{\alpha_i - \theta} \quad (3)$$

$$R_m + 1 = \sum \frac{\alpha_i \cdot x_{iD}}{\alpha_i - \theta} \quad (4)$$

O sub-índice *i* nas equações (3) e (4) é referente a todos os componente da mistura, pois o valor de *R_m* será determinado pelo somatório.

Correlação de Erbar/Maddox

O método de ERBAR & MADDOX (1961) é utilizado para a determinação do número real de pratos teóricos, *N*, e/ou do refluxo real de operação da coluna, *R*, a partir do refluxo mínimo, *R_m*, e do número mínimo de pratos, *N_m*, conforme mostrado na Figura 1.

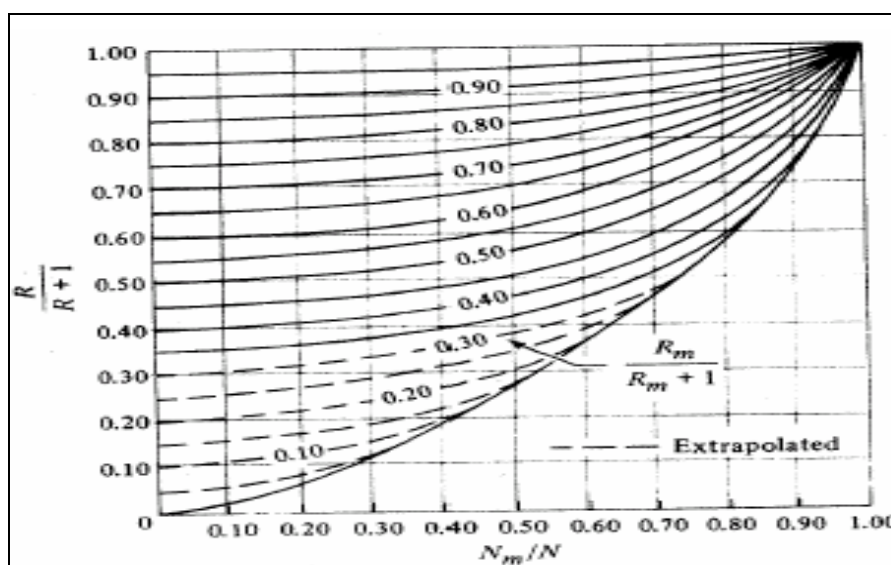


Figura 1 – Correlação de Erbar e Maddox

Em BRANAN (1998), o autor apresenta um ajuste das curvas de Erbar / Maddox, por uma equação polinomial de quinta ordem, equação 5, com as variáveis definidas nas equações 6 e 7, e os parâmetros, determinados a partir do valor da variável *z*, equação 8.

$$y = A + B \cdot x + C \cdot x^2 + D \cdot x^3 + E \cdot x^4 + F \cdot x^5 \quad (5)$$

$$x = \frac{N_m}{N} \quad (6)$$

$$y = \frac{R}{R+1} \quad (7)$$

$$z = \frac{R_m}{R_m+1} \quad (8)$$

Localização do Prato de Alimentação

O prato de alimentação é dado pela equação de KIRKBRIDE (1944), equação 9, juntamente com a equação 10, que apresenta a soma total dos estágios da coluna, sendo o subscrito R relativo à seção de retificação e o subscrito E, à seção de esgotamento.

$$\log \frac{N_R}{N_E} = 0,206 \log \left[\left(\frac{x_{hF}}{x_{lF}} \cdot \frac{B}{D} \right) \left(\frac{x_{lB}}{x_{hD}} \right)^2 \right] \quad (9)$$

$$N_E + N_R = \text{Numero Total de Estágios} \quad (10)$$

3. PROGRAMA DIDÁTICO

Este trabalho traz uma proposta de implementação das metodologias apresentadas para o *flash* e a destilação multicomponentes, a partir do uso do aplicativo Microsoft EXCEL como ferramenta computacional didática.

O usuário deve fornecer ao programa as composições de alimentação dos componentes, especificações de produto de topo e produto de fundo, a condição térmica da alimentação, e a razão de refluxo, Figuras 2 e 3.

A partir do *flash*, segue-se a destilação multicomponente, com a determinação pelo programa dos pontos de orvalho e de bolha, sendo estes identificados, respectivamente, como temperatura de topo e temperatura de orvalho. De posse destas temperaturas, o programa calcula as volatilidades relativas a partir das constantes de equilíbrio.

Como resultado final, o programa retorna, ao usuário, o número mínimo de estágios, o número de estágios reais para a separação desejada (a partir da razão de refluxo real definida pelo usuário), incluindo o refeedor, e o prato de alimentação da coluna de destilação.

4. EXEMPLO – PLANILHA EXCEL

Como exemplo, é apresentada a resolução de um problema de destilação multicomponente com seis componentes, operando a uma pressão de 1,7 atm, refluxo real 1,5 vezes o refluxo mínimo e alimentação de líquido saturado, ERBAR & MADDOX (1961). O componente chave leve é o n-Butano, e o chave pesada, o Isopentano. Neste caso, utilizadas as especificações de quanto se “perde” do CH no topo e do CL, no fundo, as respectivas composições e os demais componentes são apresentados na Figura 2.

Como resultado desta operação, o programa retorna um número mínimo de oito estágios, com doze estágios reais, sendo onze pratos mais o refeedor, e alimentação sendo feita no prato de número seis, contando-se do topo para a base da coluna, Figura 4.

Pode-se observar que a preocupação do usuário é apenas definir os parâmetros iniciais do processo e seguir os passos definidos pelo programa, até os resultados. O usuário ainda pode escolher se quer trabalhar com as composições da alimentação ou das correntes de topo ou base.

Código do Componente	Componente	Código	Componente	Composição (molar)
14	Metano	38	Propano	1,36 %
24	Etileno	i410	Isobutano	14,33 %
26	Etano	n410	n-Butano	16,37 %
36	Propileno	i512	Isopentano	15,66 %
38	Propano	n512	n-Pentano	17,88 %
i410	Isobutano	n614	n-Hexano	34,4 %
n410	n-Butano			%
i512	Isopentano			%
n512	n-Pentano			%
n614	n-Hexano			%
n716	n-Heptano			%
n818	n-Octano			%
n920	n-Nonano			%
n1022	n-Decano			%
0	Residuo			%

Componentes mais Leves (top) | **Componentes mais Pesados** (bottom)

Voltar | Próximo

Figura 2 - Componentes e Composições

Código	Componente
Chave Leve n410	n-Butano
Chave Pesada i512	Isopentano

Especificações de Topo e Fundo

$q = 1$

Pressão (atm) = 1,7012

Refluxo Real = 1,5 vezes o Mínimo

Observação: 1 atm = 760 mmHg = 2116,2 lbf / ft² = 14,7 psi = 0,98692 bar

Topo (D): CL = [] % , CH = 0,9 %

Fundo (B): CH = [] % , CL = 1,19 %

Voltar | Próximo

Figura 3 - Especificações de Topo e Fundo

Como Nm	8,0	logo, o Número de Estágios Reais da Coluna é	12,0	, ou seja,	11,0	Pratos mais o refeedor, com alimentação no prato	6,0
---------	-----	--	------	------------	------	--	-----

Figura 4 - Resultado Final

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

As metodologias utilizadas no programa proposto conduziram aos resultados encontrados para o problema resolvido na literatura citada (item 4).

Cabe ressaltar que, apesar do programa ter originalmente um caráter didático, sua utilização permite, de forma rápida e eficiente, quando comparada à solução “manual” dos problemas, a análise de diferentes configurações de *flash* e destilação multicomponentes, inclusive sob os pontos de vista prático e econômico. Desta forma, este tipo de programa proporciona ao usuário dispor melhor do seu tempo, não só no seu aprendizado/formação (sala de aula, exercícios), mas, também, quando da sua atuação profissional.

O aplicativo Microsoft EXCEL se mostrou uma ferramenta de grande valia, pois, além do potencial matemático e lógico, é de fácil utilização e de grande disponibilidade, sendo uma alternativa viável para o desenvolvimento de programas didáticos para os diferentes tópicos das disciplinas de Operações Unitárias dos cursos de Engenharia Química.

6. REFERÊNCIAS

BLACKADDER, D.A.; NEDHERMAN, R.M. **Manual de Operações Unitárias**. São Paulo: Editora Hemus, 2005.

BRANAN, C. **Rules of Thumb for Chemical Engineers: a manual of quick, accurate solutions to everyday process engineering problems**. Houston: Gulf Publishing Company, 2th Ed., 1998.

ERBAR, J.H.; MADDOX, R.N. Latest Score: Reflux vs Trays. **Petroleum Refiner**, p.185, May, 1961.

FENSKE, M., **Ind. Eng. Chem.**, v. 24, p. 482, 1932.

HINES, L.A.; MADDOX, N.R. **Mass Transfer Fundamentals and Applications**. New Jersey: Prentice-Hall, INC., 1985

KIRKBRIDE, C. G., **Petrol. Refiner**, v. 23, n° 9, p. 321, 1944.

McCABE, W.L.; SMITH, J.C.; HARRIOTT, P. **Unit Operations of Chemical Engineering**. Singapore: McGraw-Hill International Book Co., 4th Ed., 1985 e 6th Ed., 2001.

McWILLIAMS, M.L., **Chem. Eng.**, v. 80, n° 25, p.138, Oct. 29, 1973.

MOTTA LIMA, O.C. ; BARROS, M.A.S.D. **Destilação Multicomponente - Apostila/ Notas de Aula de Operações Unitárias II**. Edição Interna, DEQ/UEM, Maringá-PR, 2005.

PERRY, R. H.; CHILTON, C. H. **Manual de Engenharia Química**, 5^a Ed.. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1980.

UNDERWOOD, A.J.V. Fractional Distillation of Multicomponent Mixtures. **Chemical Engineering Progress**, v. 44, p. 603, 1948.

EXCEL AS A DIDACTIC TOOL FOR SUPPORT IN THE ANALYSIS OF MULTICOMPONENT FLASH AND DISTILLATION PROCESSES

Abstract: *Multicomponent flash and distillation is used thoroughly in industrial processes. For mixtures with more than two components, rigorous methods can be used, but they are difficult, being now associated to the use of commercial packages. This work tried to use a simplified methodology suggested by the literature, what allows a preliminary analysis of different design and operational configurations, for a better distillation process. For the implementation of this methodology, it was used the EXCEL as a didactic computational tool, due to its readiness, handling easiness and, mainly, work potentiality. The use of EXCEL allows a better discussion/understanding of multicomponent distillation concepts in classroom, providing, to future engineers, a bigger capacity of action when facing new problems in the professional practice.*

Key-words: *Distillation, Flash, Multicomponent, Excel*