

RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE OPERAÇÕES UNITÁRIAS, QUE ENVOLVEM ESTÁGIOS DE EQUILÍBRIO, USANDO O OCTAVE

Cid M. G. Andrade - cid@deq.uem.br

Universidade Estadual de Maringá – Departamento de Engenharia Química
Av. Colombo 5790
87020-900 – Maringá – PR

Resumo: *Os processos de separação, operações unitárias, que podem ser modelados por estágios com equilíbrio de fases, são amplamente utilizados em indústrias químicas. Os livros clássicos de ensino de graduação utilizam métodos gráficos para a solução do modelo. Aqui propõe-se a resolução numérica, através de ferramenta computacional. Como alternativa aos softwares comerciais temos os livres. O termo Software Livre refere-se à liberdade dos usuários executarem, copiarem, distribuírem, estudarem, modificarem e aperfeiçoarem o software. Este trabalho apresenta a solução numérica, através do programa Octave (que é um software livre) de um problema clássico obtido da literatura, para cada uma das operações unitárias: destilação binária, extração líquido-líquido e absorção. A aplicação do Octave mostrou-se simples, inclusive no tamanho físico dos programas gerados, e eficiente, principalmente na entrada e saída dos dados.*

Palavras-chave: *software livre, operações unitárias, octave, solução numérica*

1. INTRODUÇÃO

Os processos de separação, que podem ser modelados utilizando a hipótese de estágios de equilíbrio como: destilação, extração e absorção, representam pelo menos a metade, em termos de gastos energéticos, das operações unitárias nas indústrias químicas. Essa hipótese básica adotada nestes modelos é que as fases que deixam os estágios, ou estágios teóricos, encontram-se em equilíbrio termodinâmico entre si. As equações que modelam este processo são as de balanço de massa, de energia e as relações de equilíbrio. Os livros didáticos clássicos para o ensino de graduação em operações unitárias usam, ainda, em sua maioria, métodos gráficos para a resolução destes modelos. Estes métodos combinam elegância e simplicidade, além de servirem como excelente ferramenta de visualização da solução. Sendo assim, continuam muito úteis. Porém, do ponto de vista prático e de eficiência numérica, os algoritmos de cálculo implementados em computadores são preferíveis.

O uso de ferramentas computacionais em ciência e engenharia tem aumentado devido ao aumento muito rápido na velocidade de processamento dos computadores e o surgimento de pacotes computacionais, para cálculos numéricos, muito fáceis de usar. Dentre os pacotes computacionais matemáticos comerciais destacam-se: o Matlab® e o Maple®. Como uma opção a estes pacotes de código fechado temos os de código aberto, como os “similares”: Octave e o Máxima. Estes programas são softwares livres. O termo software livre refere-se à liberdade dos usuários executarem, copiarem, distribuírem, estudarem, modificarem e aperfeiçoarem o software.

O objetivo deste trabalho é a resolução numérica de um problema clássico obtido da literatura para cada uma das operações unitárias: destilação binária, extração líquido-líquido e absorção. Para tal utilizamos o software Octave que é uma linguagem de alto nível basicamente voltada para a computação numérica, EATON (1997). Seu elemento básico de

entrada e saída de dados é uma matriz que não requer dimensionamento, que resulta numa economia de tempo para a programação em relação a linguagens convencionais como o Fortran e o C. Este software, o Octave pode ser obtido gratuitamente na internet no sítio: <http://www.octave.org/>.

Em ANDRADE (2000), temos a resolução de problemas semelhantes usando-se o Matlab®.

2. OPERAÇÕES UNITÁRIAS BASEADAS EM ESTÁGIOS DE EQUILÍBRIO

As operações unitárias baseadas em estágios de equilíbrio são aquelas onde a hipótese básica adotada nestes modelos é que as fases que deixam os estágios, ou estágios teóricos, encontram-se em equilíbrio termodinâmico entre si. As equações que modelam este processo são as de balanço de massa, de energia e as relações de equilíbrio. Aqui abordaremos a resolução de problemas de destilação binária, extração líquido-líquido e absorção.

2.1 Destilação binária

A destilação consiste na vaporização de um líquido, ou de uma mistura de líquidos, seguida de imediata condensação dos vapores produzidos. Abordaremos aqui, colunas de destilação binárias onde a diferença entre a temperatura entre o fundo e o topo é a pequena.

O problema

Exemplo adaptado do exemplo 1.1 do BLACKADDER & NEDDERMAN (1982). Uma mistura molar de 60% de benzeno e 40% de tolueno deve ser separada por destilação contínua, para produzir um destilado contendo 95% de moles de benzeno e um produto de base contendo 90% de moles de tolueno. A alimentação entra como vapor saturado, e a coluna é equipada com um condensador total que retorna o líquido em seu ponto de ebulição como refluxo para a coluna. Obter o número de pratos para uma razão de refluxo igual a 3.5. São fornecidos os dados de equilíbrio para o sistema benzeno-tolueno:

Tabela 1 - Dados de equilíbrio para o sistema benzeno-tolueno

X	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
Y	0.0	0.21	0.38	0.51	0.62	0.71	0.79	0.85	0.91	0.95	1.0

Equacionamento

Balanço de massa total:

$$F = B + D \quad (1)$$

Balanço de massa pelo componente mais volátil:

$$Fz = Bx_b + Dx_d \quad (2)$$

Balanço de massa na seção de retificação:

$$y_{n+1} = \frac{L_R}{D + L_R} x_n + \frac{D}{D + L_R} x_d \quad (3)$$

Balanço de massa na seção de esgotamento:

$$y_{m+1} = \frac{L_R + F}{L_R + D} x_m + \frac{F - D}{L_R + D} x_b \quad (4)$$

onde: F: vazão da alimentação;

D: vazão do destilado;

B: vazão do produto de fundo;

L_R : vazão do líquido;

x_a : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil na alimentação;

x_d : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil no destilado;

x_b : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil no produto de fundo;
 x_n : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil na seção de retificação;
 x_m : concentração, na fase líquida, do componente mais volátil na seção de esgotamento;
 y_{n+1} : concentração, na fase vapor, do componente mais volátil na seção de retificação;
 y_{m+1} : concentração, na fase vapor, do componente mais volátil na seção de esgotamento.

Algoritmo para a solução

Os dados de equilíbrio foram ajustados como um polinômio de quarta ordem. No primeiro laço de controle “while”, através da iteração entre as equações de balanço de massa e a de equilíbrio (o polinômio ajustados), partindo-se da concentração de saída do topo até a concentração da alimentação, chega-se ao número de pratos da seção de retificação. A seguir as concentrações são redefinidas e inicia-se o segundo laço do “while”, até a concentração da base, obtendo-se assim o número de pratos na seção de retificação.

O programa para a solução do problema

```

xb=0.1;
xd=0.95;
xa=0.6;
x=[0 .1 .2 .3 .4 .5 .6 .7 .8 .9 1];
y=[0 .21 .38 .51 .62 .71 .79 .85 .91 .95 1];
ye=y;
p=polyfit(y,x,4);
prr=0;
yr=0.95;
xcr=1;
while xcr>=0.6
    xcr=polyval(p,yr);
    yr=0.78.*xcr+.21;
    prr=prr+1;
end
pre=0;
ye=yr;
xce=xcr;
while xce>=0.1
    xce=polyval(p,ye);
    ye=1.15.*xce-0.0155;
    pre=pre+1;
end
pratos=prr+pre
prr =4
pre =4
pratos =8
  
```

Figura 1 – Listagem do programa no Octave para o cálculo do número de pratos para uma coluna de destilação, com a resposta gerada na seqüência.

2.2 Extração líquido-líquido

Operação unitária envolvendo duas fases líquidas, que consiste em promover o contato entre a solução líquida e um solvente apropriado, solvente de extração, imiscível com a solução capaz de dissolver preferencialmente um ou mais componentes da solução tratada.

O problema

Exemplo obtido de PAVLOV et al (1981), exemplo 8.7. Em um extrator em contracorrente de ação contínua se submete ao tratamento com benzeno puro águas fenólicas com o objetivo de se extrair o fenol. Determinar a quantidade necessária de solvente e o número de estágios teóricos, se em uma hora são tratadas 10 m³ de água. O conteúdo de fenol na água é inicialmente 8 kg/m³ e no final 0.5 kg/m³. O conteúdo de final de fenol no benzeno é de 25 kg/m³ e a temperatura dos líquidos é igual a 25 °C.

Tabela 2 - Dados de equilíbrio para o sistema

Fenol na água (kg/m ³)	Fenol no benzeno (kg/m ³)
0.426	0.974
1.59	4.37
5.74	46.7

Equacionamento

Balço de massa total para n etapas de extração:

$$G_F + G_S = G_R + G_E \quad (5)$$

Balço de massa para o componente que se pretende extrair:

$$G_F x_F + G_S y_S = G_R x_R + G_E y_E \quad (6)$$

Quando pode-se desconsiderar a solubilidade mútua entre o solvente primário e o agente extrator, a quantidade do solvente puro primário G_A e o secundário G_C em todas as etapas serão iguais então:

$$G_A (X_F - X_R) = G_C (Y_E - Y_S) \quad (7)$$

Assim, a equação de operação será:

$$Y_{n+1} = \frac{G_A}{G_C} (X_n - X_F) + Y_E \quad (8)$$

Algoritmo para a solução

Os dados de equilíbrio são relacionados via o ajuste de um polinômio de terceira ordem, o laço de controle “while” faz a iteração entre o polinômio ajustado e a equação de operação até a concentração final. O número de iterações é o número de estágios.

O programa para a solução do problema

```
clear
X=[0 0.426 1.59 5.74];
Y=[0 0.974 4.37 46.7];
p=polyfit(Y,X,3);
Xi=8;
Xf=0.5;
Yf=25;
Yi=0;
Ga=10;
Gc=Ga*((Xi-Xf)/(Yf-Yi));
Yn=Yf;
Xn=Xi;
e=0
while Xn>=0.5
    Xn=polyval(p,Yn)
    Yn=(Ga/Gc)*(Xn-Xf)+Yi
    e=e+1
end
e=8
```

Figura 2 – Listagem do programa no Octave para o cálculo do número estágios teóricos num extrator líquido-líquido, com a resposta gerada na seqüência.

2.3 Absorção

É uma operação de transferência de massa do tipo gás-líquido. Consiste na retirada de um ou mais componentes de uma mistura de gases pelo contato direto com o líquido. A operação contrária, isto é, retirar os componentes mais voláteis de uma mistura líquida por meio de um gás que se faz passar através de uma solução líquida recebe o nome de “stripping” e tem a mesma fundamentação.

O problema

Exemplo adaptado da aplicação 4, do Cap. 3 do GOMIDE (1988). Um óleo não-volátil de peso molecular 300, contendo 2.54 mol% de propano, deve ser submetido a um *stripping* com vapor de água de 1.4 kg/cm² e 138°C numa coluna de pratos aquecida internamente de modo a ser realizada operação essencialmente isotérmica. A coluna será alimentada com 4 mol de vapor vivo por 100 mol de óleo desnudado. Calcular o número de placas necessárias para reduzir o teor do propano no óleo a 0.05 mol%. A relação de equilíbrio para o propano no óleo tratado pode ser admitida a seguinte: $y=33.4x$ (x e y são as frações molares do propano e do óleo no gás respectivamente).

Equacionamento

Balanco de massa para o soluto numa posição n até o topo:

$$Y_{n+1} = \frac{L}{G} X_n + \frac{GY_T - LX_T}{G} \quad (9)$$

Equação para o equilíbrio de fases:

$$Y_n = f(X_n) \quad (10)$$

onde: L: vazão do líquido;

G: vazão do vapor;

X_n: concentração do soluto na solução líquida;

X_T: concentração do soluto na solução líquida no topo;

Y_n: concentração do soluto no vapor, no estágio n;

Y_T: concentração do soluto no vapor no topo.

Algoritmo para a solução

Converte-se os dados de equilíbrio para frações molares, a seguir ajusta-se estes dados para um polinômio de quarta ordem. No laço de controle “while” faz-se uma iteração entre a equação de balanço de massa e a de equilíbrio, partindo-se da concentração no topo até a concentração da base, o número de iterações é o número de placas.

O programa para a solução do problema

L=100;

G=4;

Xb=0.0005;

Yb=0;

Yt=0.638;

x=[0.0005 0.001 0.002 0.004 0.006 0.008 0.01 0.012 0.014];

y=33.4*x;

```

X=x./(1-x);
Y=y./(1-y);
n=4;
p=polyfit(Y,X,n);
Xt=0.026;
X=0.026;
pl=0;
while X>=0.0005
    Ya=(L/G)*X+(G*Yt-L*Xt)/G;
    X=polyval(p,Ya);
    pl=pl+1;
end
pl=7

```

Figura 3 – Listagem do programa no Octave para o cálculo do número de placas, com a resposta gerada na seqüência.

3. CONCLUSÕES

A utilização do Octave mostrou-se simples, inclusive no tamanho físico dos programas gerados, e eficiente principalmente na entrada e saída dos dados.

Assim, o Octave apresenta-se como uma ótima ferramenta na resolução de problemas básicos de operações unitárias que envolvem estágios de equilíbrio.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDRADE, C. M. G. Utilização do Matlab na Resolução de Problemas de Operações Unitárias que envolvem Estágios de Equilíbrio. In: International Conference on Engineering and Computer Education, 2000, São Paulo. Anais.

BLACKADDER, D. A.; NEDDERMAN, R. M. *Manual de Operações Unitárias*. São Paulo, Hemus, 1982.

EATON, J. W. GNU Octave. Network Theory Limited, USA, 1997.

GOMIDE, R. *Operações Unitárias. 4º Volume: Operações de Transferência de Massa*. São Paulo, Edição do Autor, 1988.

PAVLOV, K. F. *Problemas y Ejemplos par el Curso de Operaciones Básicas y Aparatos em Tecnologia Química*. URSS, Editorial Mir, 1981.

THE UNIT OPERATIONS PROBLEM RESOLUTION, THAT INCLUDE EQUILIBRIUM STAGE, USING OCTAVE

Summary: *The separation's processes, unit operations, that can be modelling by fases equilibrium are extensive utilized in chemistry industry. The classical chemical books of teaching's graduation use graphic methods for the model's solution. Here it's proposed the numerical solution through computational tool. As alternative for the commercial software we have the free software. The termination "free software" is a matter of the users' freedom*

to run, copy, distribute, study, change and improve the software. This work presents the numerical solution, through the Octave program (that is a free software) from a classical problem of literature, for each one of the unit operations: binary distillation, liquid-liquid extraction and absorption. The Octave application looks simple, also in the physical size of the generated program, and efficient, essentially in the input and output of the data.

Palavras-chave: *software livre, unit operations, octave, numeric solution*