

PACOTE COMPUTACIONAL EM EXCEL PARA ANÁLISE, PROJETO, E CORREÇÃO DO MÉTODO McCABE-THIELE EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO BINÁRIA

Sara Regina Osipi – sara.osipi@gmail.com

Aluizio Torres da Silva Jr. – aluiziotsj@gmail.com

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

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

Sérgio Henrique Bernardo de Faria – sergio@deq.uem.br

Departamento de Engenharia Química – Universidade Estadual de Maringá

Av. Colombo 5790, Bloco D-90

87020-900 - Maringá - Paraná

***Resumo:** A destilação é um processo de separação muito conhecido, e muito utilizado nas indústrias. A visualização dos conceitos nos processos de separação é uma necessidade, pois o aluno de engenharia química deve ser capaz de entender as mudanças de variáveis e seus efeitos numa operação unitária. O Excel é um software amplamente utilizado e de fácil acesso para os estudantes, em comparação com alguns simuladores comerciais, e se torna uma ferramenta adequada para a modelagem e o ensino. O objetivo deste trabalho é apresentar um pacote computacional didático, desenvolvido em Excel e VBA, e composto por duas planilhas. A primeira se baseia em métodos simplificados para cálculo do número de pratos teóricos, balanço de massa, refluxo mínimo e diâmetro da coluna. A segunda, em um cálculo comparativo do projeto de uma coluna quando a razão entre as correntes líquida e vapor é constante, e quando são utilizadas equações modificadas que consideram as diferenças reais. As planilhas permitem a visualização e o entendimento dos conceitos envolvidos no processo de destilação binária, podendo ser utilizadas como ferramentas de apoio no estudo/análise deste processo, tanto em sala de aula, quanto no exercício profissional dos futuros engenheiros.*

***Palavras-chave:** destilação binária, Excel, dimensionamento, planilha.*

1 INTRODUÇÃO

A destilação, como processo binário, tem pouca aplicação industrial, mas seus fundamentos são aplicáveis a outras operações unitárias similares, como adsorção e absorção, e também em processos multicomponentes reais.

Na indústria, engenheiros frequentemente têm que fazer cálculos rápidos para visualização de tamanho de uma coluna ou a influência das variáveis do processo. Isso só é possível com o conhecimento da relação entre estas variáveis e os conceitos envolvidos na destilação.

Nesse sentido, vários autores contribuíram para o desenvolvimento de cálculos referentes ao dimensionamento de colunas de destilação, destacando-se os métodos gráficos de McCabe-Thiele e Ponchon-Savarit (McCABE *et al.*, 1985/2001; MOTTA LIMA & PEREIRA, 1999).

Neste contexto, este trabalho teve como objetivo a elaboração de um pacote computacional didático, desenvolvido em Excel e VBA, e composto por duas planilhas. A primeira planilha didática tem a finalidade de facilitar os cálculos de refluxo mínimo, balanço de massa, número de pratos teóricos e diâmetro aproximado de colunas de destilação para sistemas binários cuja volatilidade relativa possa ser considerada constante.

Por outro lado, o objetivo da elaboração da segunda planilha didática foi desenvolver um programa em EXCEL, a partir das equações de McCabe-Thiele e de equações baseadas nas de McCabe-Thiele acrescidas de um termo de correção para as equações das retas de operação, a fim de compensar as razões líquido/vapor no ponto de alimentação que diferem destas razões no topo e no fundo da coluna.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste item, será apresentada uma breve descrição/apresentação das metodologias utilizadas na elaboração das planilhas didáticas desenvolvidas no trabalho. Maiores detalhes podem ser obtidos a partir das referências apresentadas em cada sub-item.

2.1 Método gráfico de McCabe-Thiele

Este método aplica-se somente a pequenas variações de temperatura (diferença entre topo e fundo de 10 a 50 °C), pois considera que as entalpias do sistema sejam aproximadamente constantes ao longo da coluna. Desta forma, as vazões molares de líquido e de vapor permanecem constantes em cada seção (seções de retificação e seção de esgotamento). Na prática, este método consiste na aplicação das considerações acima para o cálculo/análise da destilação de misturas binárias, utilizando-se o diagrama (curva) de equilíbrio do sistema em questão. (McCABE *et al.*, 1985/2001; MOTTA LIMA & PEREIRA, 1999)

2.2 Método de Matrizes de Amundson para o cálculo do número teórico de pratos

Um método simples e puramente algébrico para o cálculo do número teórico de pratos de uma coluna de destilação binária com volatilidade aproximadamente constante é o método de AMUNDSON (1946), que se baseia em propriedades e relações entre matrizes e sistemas lineares. CHEN (1991) propôs um sistema de equações que descreve este cálculo, de forma que, seguindo uma determinada linha de operação (retificação ou esgotamento), é possível determinar o número de pratos a partir das raízes da matriz elaborada com os parâmetros do problema. Para maiores informações sobre a metodologia, recomenda-se a leitura do trabalho de CHEN (1991).

2.3 Método de Brown-Souders para cálculo do diâmetro da coluna

Este método, explicitado em equações e nomogramas por ZOMOSA (1983), consiste na relação entre a velocidade de vapor permitida e a taxa de vapor ascendente na coluna, resultando na sua área. A partir desta relação, e de parâmetros como densidades de líquido e de vapor e razão de refluxo, pode-se explicitar o diâmetro.

2.4 Método gráfico de McCabe-Thiele modificado

A partir da derivação das equações do método de McCabe-Thiele para a seção de esgotamento e para a seção de retificação, e considerando que a razão L/V acima do prato de alimentação difere da razão de topo, e que a razão L/V abaixo do prato de alimentação difere da razão de base, DECHMAN (1964) verificou que a mais simples, e talvez a mais precisa modificação, seria assumir que a razão L/V varia linearmente com x para o intervalo envolvido. A nova relação das retas de operação pode ser obtida adicionando-se um termo às equações do método gráfico de McCabe-Thiele.

3 PROGRAMAS DIDÁTICOS

3.1 Planilha de cálculos simplificados (Métodos de Amundson e de Brown-Souders)

A planilha desenvolvida em Excel possui quatro botões de comando. Um botão fornece as instruções sobre as variáveis necessárias em cada rotina e sobre o programa como um todo. Os demais botões são usados para iniciar as rotinas de cálculo do refluxo mínimo, do balanço de massa e do diâmetro aproximado da coluna, já que o cálculo do número de pratos é automático. As células passíveis de mudança são destacadas na cor alaranjada e comentários explicativos aparecem quando são selecionadas, enquanto que as células automaticamente calculadas pelo programa têm uma cor de fundo azul.

Para calcular o refluxo mínimo, o usuário deve entrar com os valores de volatilidade relativa, concentração molar de topo e de entrada, em termos do componente mais volátil, e fração líquida da alimentação. Este cálculo é iniciado pelo clique no botão respectivo, e é feito utilizando o suplemento Solver; portanto, é necessário que haja sua instalação prévia.

As variáveis necessárias para a solução do balanço de massa são a taxa molar de entrada e as composições molares de entrada (alimentação) e de saída (topo e fundo). Serão calculadas as correntes de saída da coluna de destilação.

O número de estágios/pratos é calculado a partir das três concentrações citadas acima, do parâmetro n , que representa o número a ser multiplicado pelo refluxo mínimo anteriormente calculado, e da fração líquida da alimentação.

O cálculo do diâmetro aproximado da coluna de destilação utiliza os dados do balanço de massa realizado. É necessário inserir as densidades médias de vapor e de líquido dos dois componentes e clicar no botão “Calcular”.

3.2 Planilha de cálculos (Método de McCabe-Thiele Modificado)

A partir da planilha desenvolvida, o usuário inicia com dados de entrada do componente mais volátil (composição molar da alimentação, do topo e da base), vazão mássica de alimentação, ou do topo, ou da base, massa molecular de ambos componentes, volatilidade relativa, razão de refluxo e fração líquida na alimentação. Em seguida, a planilha irá calcular as massas moleculares médias e as composições mássicas da alimentação, topo e base. Estes dados serão necessários para a realização do balanço de massa da coluna de destilação.

Para o próximo passo, o usuário irá inserir os respectivos calores específicos para a base, alimentação (líquido e vapor) e topo. Após, irá digitar o calor latente da base, do vapor (prato de alimentação) e do topo. As temperaturas referentes às correntes de alimentação, base e topo também devem ser inseridas. Estes dados serão necessários para o balanço de energia da coluna de destilação.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Planilha de cálculos - Métodos de Amundson e de Brown-Souders

O exemplo testado foi o mesmo descrito por AMUNDSON (1946) apud CHEN (1991), que é uma destilação binária benzeno/tolueno, cuja alimentação possui fração molar de 0,40 em termos de benzeno e é alimentada em seu ponto de bolha. A especificação de topo é de 0,995 e a de fundo de 0,005, em termos de fração molar de benzeno. A razão de refluxo é de 1,75 vezes a razão mínima, o valor da volatilidade relativa é 2,439 (dados obtidos a partir dos fornecidos por CHEN, 1991), e vazão molar de alimentação de 400,0 kmol/h.

A razão de refluxo mínima encontrada pelo programa foi de 1,714, e o número de pratos das seções de retificação e esgotamento foram de 9,54 e 9,91, totalizando 19 pratos, já que o

programa soma o número de prato e depois arredonda para cima. As vazões de destilado e de produto de fundo foram de 159,6 e 240,4 kmol/h, respectivamente. Com as densidades aproximadas do vapor, 2,878 kg/m³, e do líquido, 871,7 kg/m³, o valor encontrado para o diâmetro aproximado foi de 1,456 m. A planilha preenchida e com os valores calculados pode ser visualizada na Figura 3. O número de pratos foi idêntico ao encontrado por CHEN (1991).

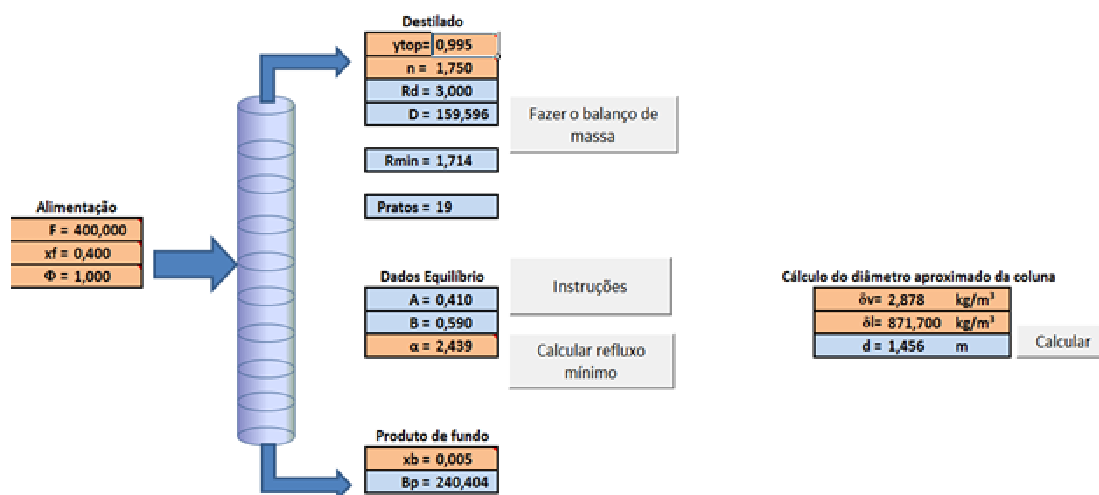


Figura 1 - Resultados da planilha para o exemplo de CHEN (1991).

4.2 Planilha de cálculos - Método de McCabe-Thiele Modificado

Como exemplo de sua utilização, o programa foi testado na separação de ácido acético e água, conforme exemplo proposto em DECHMAN (1964), no qual se deseja determinar o número de pratos teóricos de uma coluna de destilação com razão de refluxo de 4,02 e uma alimentação na forma de líquido no ponto de bolha, para os seguintes dados:

- vazão e condição da alimentação: 1000 lbm/h, líquido saturado ($\phi = 1$)
- composição da alimentação: 60% molar, ácido acético e 40% molar, água
- composição do destilado: 10% molar, ácido acético
- composição do fundo: 92% molar, ácido acético
- volatilidade relativa: $\alpha = 1,68$
- razão de refluxo externa: 4,02

A planilha proposta fornece, na primeira janela de texto, o resultado do balanço de massa. Para dar continuidade ao procedimento, ela irá calcular uma série de vazões utilizadas nas equações das retas de operação propostas pelo método de McCabe-Thiele e por DECHMAN (1964). Portanto, multiplicando a vazão de topo pela razão de refluxo, a planilha irá encontrar a vazão de líquido de topo (L_D). Somando a esta o valor da vazão de topo, ela encontrará também o valor da vazão de vapor de topo (V_D).

A partir do balanço de energia para a seção de retificação acima do prato de alimentação, a planilha calculará a vazão de vapor acima do prato de alimentação (V_{AF}). Retirando desta vazão de vapor o valor da vazão de destilado, ela encontrará o valor da vazão de líquido acima do prato de alimentação (L_{AF}). Sabendo que a alimentação entra na forma de líquido no ponto de bolha, a vazão de líquido abaixo do prato de alimentação (L_{BF}) é fornecida pela soma de L_{AF} com a vazão de alimentação. O valor da vazão de vapor abaixo do prato de alimentação (V_{BF}), devido às condições de entrada, apresenta o mesmo valor da vazão de vapor acima do prato de alimentação (V_{AF}).

Com o balanço de energia na seção de esgotamento, a planilha irá encontrar também a vazão de vapor de base (V_B). Somada a esta a vazão de base, ela encontrará o valor da vazão de líquido (L_B).

Utilizando as equações das retas de operação para a seção de retificação (ROR) e a de esgotamento (ROE), no caso de refluxo molar constante, o número de pratos teóricos foi de 16 (11 pratos na seção de retificação e 5 pratos, na de esgotamento). Realizando os cálculos com as equações modificadas das retas de operação, para compensar as diferenças entre as razões L/V no prato de alimentação e as razões no topo e na base da coluna, o número de pratos teóricos foi de 14 (9 pratos na seção de retificação e 5 pratos, na de esgotamento).

A utilização da planilha proposta para este problema é mostrado nas Figuras 2 e 3. Estes resultados estão de acordo com os obtidos manualmente/graficamente por DECHMAN (1964) e também se aproximam dos resultados obtidos pelo autor para o método Ponchon-Savarit.

Coluna de Destilação Binária - McCabe-Thiele

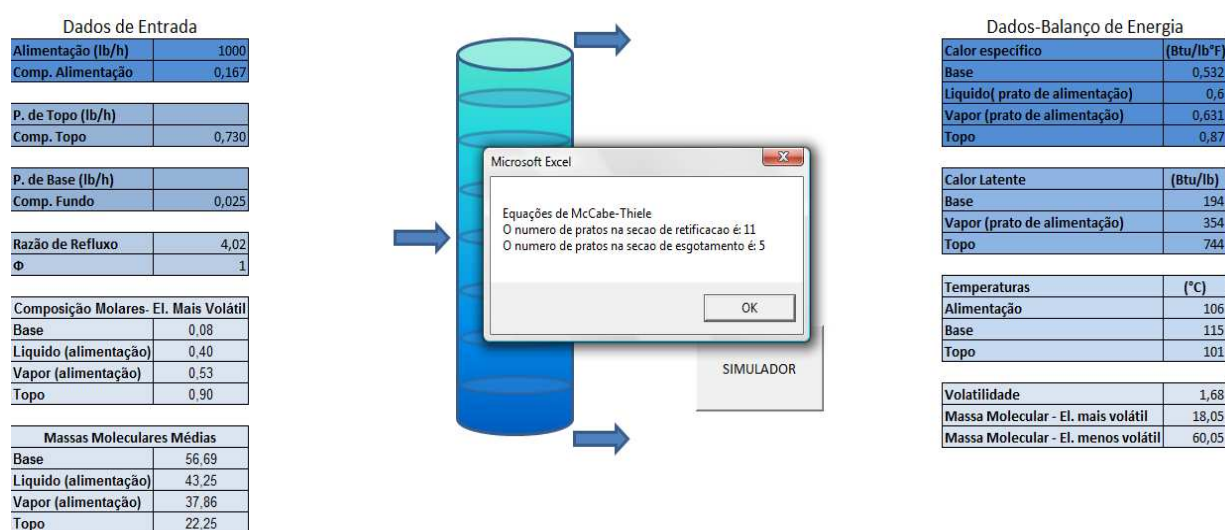


Figura 2 – Resultados da planilha para o exemplo de DECHMAN (1964).

Coluna de Destilação Binária - McCabe-Thiele

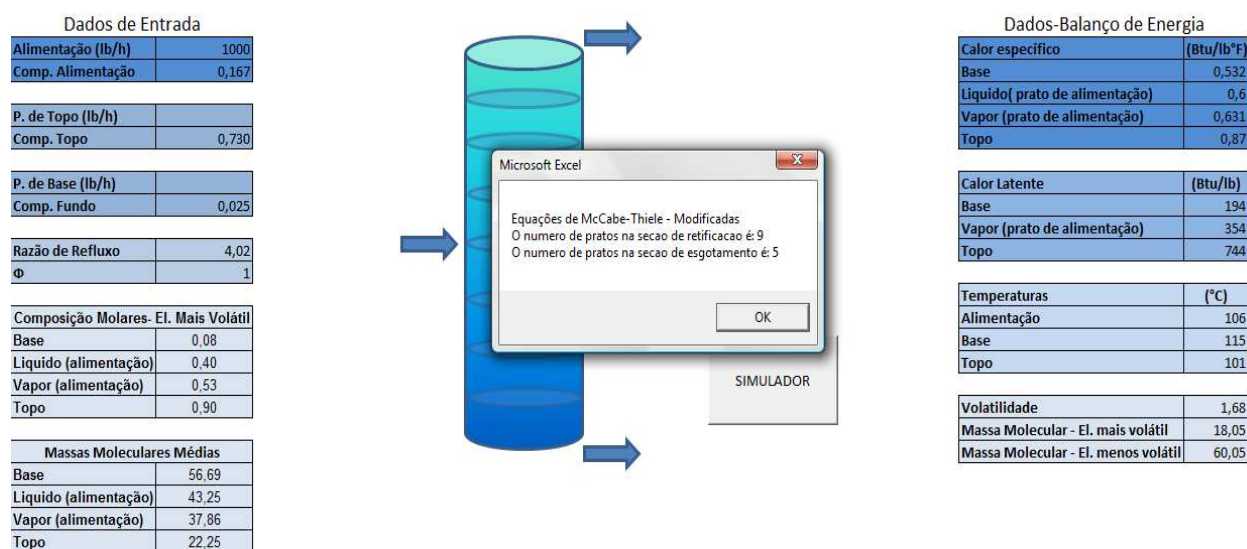


Figura 3 - Resultados da planilha para o exemplo de DECHMAN (1964), aplicando-se as equações modificadas.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

O programa/planilha desenvolvido a partir dos métodos de Amundson e de Brown-Souders permite o cálculo rápido de parâmetros necessários ao projeto de colunas de destilação binária de sistemas cuja curva de equilíbrio pode ser descrita pela volatilidade relativa constante e, também, a visualização e análise do efeito das variáveis sobre o processo, utilizando conceitos simples e puramente algébricos. O exemplo proposto originalmente por CHEN (1991) foi testado e os resultados foram compatíveis com os encontrados pelo autor.

O segundo programa/planilha desenvolvido permite ao usuário uma comparação de resultados a partir das equações do método gráfico tradicional de McCabe-Thiele e das equações de McCabe-Thiele modificadas pela adição de um termo de correção, conforme proposto por DECHMAN (1964). Estas equações foram desenvolvidas para compensar as diferentes razões L/V existentes nos pratos de alimentação, do topo e da base da coluna. Desta forma, quando necessário, o usuário pode realizar o projeto e a análise de colunas de destilação binária a partir das duas metodologias e comparar os resultados obtidos, com uma redução sensível do tempo de cálculo.

Uma diferença/vantagem importante da programação em EXCEL, quando comparada a softwares equivalentes, está na facilidade com que o usuário, mesmo com pouca experiência no uso de planilhas eletrônicas e/ou programação, consegue interagir com o programa, podendo modificar, sem muita dificuldade, tanto a parte estética/visual, como os passos de programação, conforme seus gostos e/ou necessidades.

Finalmente, a utilização do EXCEL/VBA na implementação da metodologias propostas se mostrou uma ferramenta interessante, podendo contribuir de forma significativa para uma melhor fixação deste assunto e maior capacidade de ação dos futuros engenheiros, tanto em sala de aula, quanto, posteriormente, no exercício profissional.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMUNDSON, N. Application of matrices and finite difference equations to binary distillation. **Trans. AIChE**, 42, p. 939, 1946.

BLACKADDER, D. A.; NEDHERMAN, R. M. A Handbook of Unit Operations. London: Academic Press Inc. Ltd., 1971.

CHEN, J. J. J. Amundson's matrix method for binary distillation revisited. **Chem. Eng. Education**, winter 1991, p. 50-52, 1991.

COULSON, J. M.; RICHARDSON, J. F. Tecnologia Química - Volume II: Operações Unitárias. 2ª Ed., Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1968.

DECHMAN, D. A. Correcting the McCabe-Thiele method for unequal molal overflow. **Chemical Engineering**, December 21, p. 79-82, 1964.

FOUST, A. S.; WENZEL, L. A.; CLUMP, C. W.; MAUS, L.; BRYCE ANDERSEN, L. Princípios de Operações Unitárias. 2ª Ed., Rio de Janeiro: LTC Editora, 1982.

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

MOTTA LIMA, O. C.; PEREIRA, N. C. Destilação - Apostila da disciplina Operações Unitárias II. Publicação Interna - DEQ/UEM, Maringá-PR, 1999.

ZOMOSA, A. Quick design of distillation columns for binary mixtures. **Chemical Engineering**, January 24, p. 95-98, 1983.

EXCEL SPREADSHEETS FOR ANALYSIS, PROJECT AND CORRECTION OF McCABE-THIELE METHOD IN BINARY DISTILLATION COLUMNS

Abstract: *Distillation is a separation process widely known and used in industries. The visualization of concepts in the process of separation is a necessity, because the chemical engineering student should be able to understand the changes of variables and their effects on this unit operation. Excel is a software easily accessible to students, compared with some commercial simulators, and becomes a suitable tool for modeling and teaching. The objective of this work is to present an educational computer software, developed in Excel and VBA, and composed of two spreadsheets. The first is based on simplified methods for calculating the number of theoretical plates, mass balance, minimal reflux and diameter of the distillation column. The second, in a comparative design calculation of a column when the ratio between the liquid and vapor streams is constant, and when modified equations are used, which consider the real differences. The spreadsheets allow the visualization and understanding of the concepts involved in the distillation process and can be used as didactic tools in the study of binary distillation process, providing, to future engineers, a better understanding of the subjects and a bigger capacity of action when facing new problems, in classroom, or, later on, in the professional practice.*

Keywords: *binary distillation, Excel, sizing, worksheet.*