

USO DE SOFTWARE LIVRE PARA RESOLUÇÃO DE PROBLEMA ENVOLVENDO DESTILAÇÃO POR OSCILAÇÃO DE PRESSÃO

Resumo: O uso de softwares no ensino da Engenharia Química tem se tornado importante no desenvolvimento profissional dos acadêmicos, já que os prepara para análises de processos sem que estes estejam em larga escala. A destilação por oscilação de pressão pode ser usada para separar misturas azeotrópicas que apresentam ponto de mínimo em relação à temperatura de operação, mas são difíceis de serem abordadas devido sua complexidade. No intuito de contribuir para um melhor conhecimento dos processos de destilação por oscilação de pressão, este trabalho aplica um exemplo prático utilizando o software COCO (Cape-Open to Cape-Open). Os resultados encontrados foram conforme esperados e passíveis de discussão. Foi possível concluir a facilidade de uso do software, bem como sua aplicabilidade mesmo que com processos complexos.

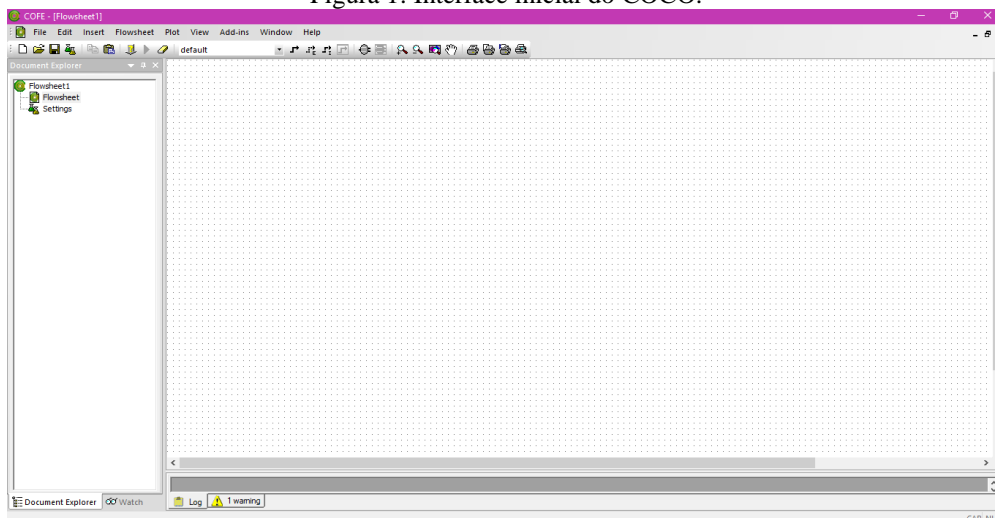
Palavras-chave: Destilação. Software livre. Ensino da Engenharia Química.

1 INTRODUÇÃO

É cada vez mais comum o uso de softwares livres no complemento do ensino da Engenharia Química pois torna didático o entendimento de variados processos. O COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) é uma coleção de componentes de software para a criação de simulações de fluxogramas da Engenharia em estado estacionário. Possui uma variedade de tipos de operações unitárias, como bombas, compressores, expansores, dispositivos de aquecimento e resfriamento, reatores, misturadores e divisores.

O simulador COCO é um software livre para modelagem de colunas de destilação (Figura 1). Ele trabalha num ambiente de simulação baseado em modelos de estágios apresentando uma área de interação fácil e simples. O software possui banco de dados próprio com propriedades termodinâmicas necessárias para a modelagem do processo analisado.

Figura 1: Interface inicial do COCO.



Fonte: Acervo próprio.

A partir da determinação dos componentes que farão parte do processo, insere-se a corrente de alimentação, colunas de destilação, bomba, assim como os valores das variáveis de processo necessárias, como vazão de alimentação, temperatura, pressão e composição.

O objetivo deste trabalho é apresentar a importância e simplicidade do software de código aberto COCO (*CAPE-OPEN to CAPE-OPEN*) no ensino do processo PSD para produção de EAC na Engenharia Química.

2 REFERENCIAL BIBLIOGRÁFICO

Quando desvios da linearidade em relação à lei de Raoult se tornam suficientemente grandes em relação à diferença entre as pressões de vapor de duas espécies puras, a curva de Temperatura *versus* Composição exibe um ponto de mínimo (SMITH, 2011). Entretanto, é necessário também que essas espécies tenham pontos de ebulição próximos (até 30 °C de proximidade) (PERRY, 2008). Desta forma, no ponto onde a composição de líquido é igual a de vapor ($x_i = y_i$) as curvas dos pontos de orvalho e de bolha são tangentes à mesma linha horizontal. Um líquido em ebulição com essa composição produz um vapor com exatamente a mesma composição, e, conseqüentemente, o líquido não muda de composição na medida em que ele se evapora (SMITH, 2011). Quando isso acontece, não é possível separar os componentes por destilação simples, requerendo processos com aumento de pressão a partir do ponto de azeotropia.

Um azeótropo, independente de apresentar ponto de mínimo ou de máximo, pode se classificar em homogêneo (se houver uma fase líquida em equilíbrio com a fase vapor e em mesma composição) ou heterogêneo (se houver mais de uma fase líquida em equilíbrio e mesma composição de vapor). Para azeotrópicos heterogêneos, a composição da fase de vapor é igual à composição geral das duas (ou mais) fases líquidas (PERRY, 2008)

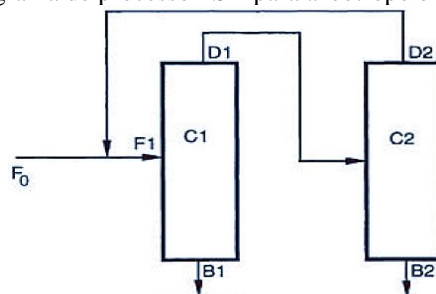
O sistema etanol/água abordado neste trabalho forma um azeótropo homogêneo apresentando uma fase líquida em equilíbrio com a fase vapor e um ponto de mínimo no gráfico Temperatura *versus* Composição.

Segundo a ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) (2011), o etanol anidro combustível (EAC) deve apresentar, no mínimo, 99,3% em mol para ser legalmente comercializado. Essa fração é superior ao 89% em fração molar que se pode

produzir em uma torre comum de destilação. Há diversos processos de separação para se ter essa alta pureza do etanol e, dentre eles, a destilação por oscilação de pressão, em inglês Pressure Swing Distillation (PSD), pode ser bastante estudada, pois a composição desse azeótropo varia com a pressão do sistema, desaparecendo a condição de azeotropia em pressões abaixo de 11,5 atm (PERRY, 2008).

O fluxograma mostrado na Figura 2 apresenta a PSD para azeótropo binário homogêneo de com ponto de mínimo. A coluna C1, operando à pressão P1, é alimentada com uma mistura de alimentação fresca (F_0) mais a corrente reciclada D2, de tal modo que a composição global fica rica em B. O componente A é retirado na corrente de fundo (B1), e uma mistura perto da composição azeotrópica é produzida como destilado (D1). A pressão deste fluxo de destilado é alterada para P2 e alimentada em C2. Esta alimentação está rica em B da composição azeotrópica em P2. O componente puro B é agora recuperado como produto de fundo (B2), e a composição de destilados azeotrópicos (D2) é reciclada para a primeira coluna.

Figura 2: Fluxograma de processo PSD para azeótropo binário homogêneo.



Fonte: Acervo próprio.

No ramo industrial, o uso dos softwares de simulação faz-se fundamental, pois permitem realizar modificações nos sistemas operacionais de modo a encontrar a melhor alternativa para o processo, otimizando a operação, aumentando a produção e diminuindo os custos, sem efetuar alterações em escala real (FRANCISQUETTI, 2014).

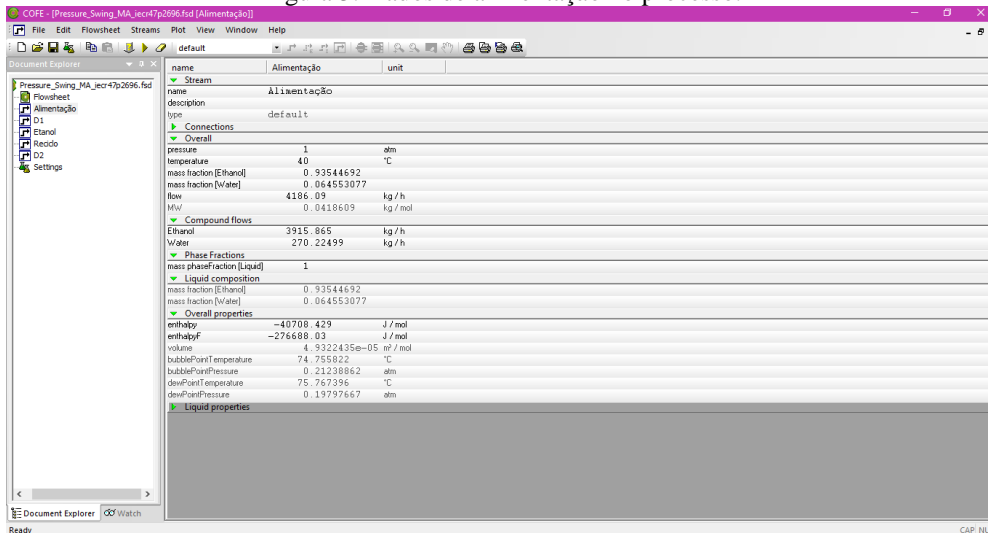
O uso desses softwares para a simulação de processos que envolvem transferência de massa e calor são cada vez mais usados no ensino da engenharia, pois atendem à demanda de aprendizado do acadêmico, sendo uma forma didática de despertá-lo para as variadas formas de se obter resultados rápidos, tornando-o familiarizado com processos mais complexos e preparando-o melhor para o mercado de trabalho.

3 MATERIAL E MÉTODOS

Para a aplicação do software foi considerada uma alimentação de 100 kmol/h com fração 0,85 de etanol e 0,15 de água pois possui composição típica de correntes saídas de dornas de fermentação em destilarias produtoras de etanol (FIGUEIRÊDO, 2009); primeira coluna de destilação (C1) com 30 estágios, sendo a alimentação no 12° a 40 °C, pressão de operação em 3 atm, razão de refluxo igual a 4; segunda coluna de destilação (C2) com 100 estágios, sendo a alimentação no 70° a 75 °C, pressão de operação em 10 atm, razão de refluxo igual a 6.

Os dados foram inseridos nas correntes de alimentação (Figura 3) e nas variáveis de operação das colunas C1 e C2 (Figura 4).

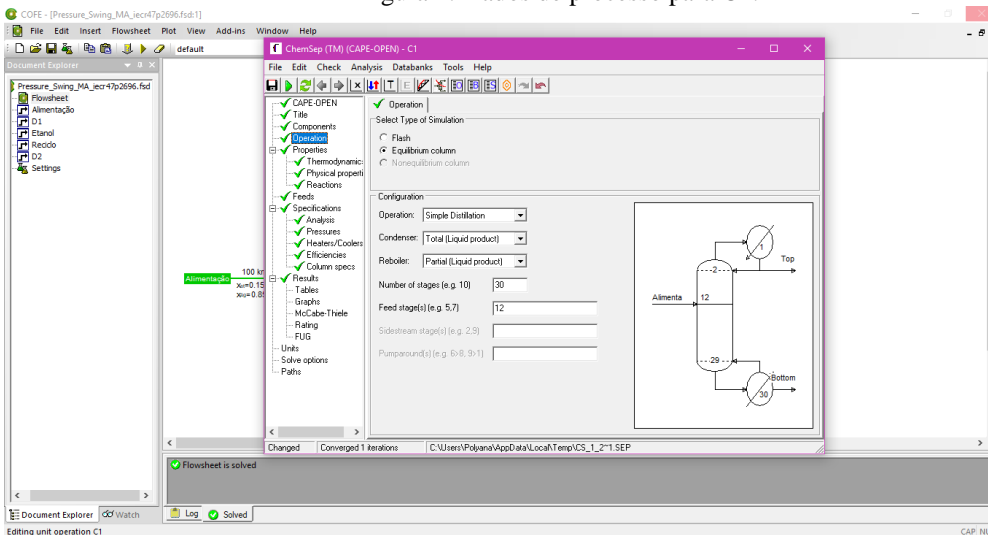
Figura 3: Dados de alimentação no processo.



name	Alimentação	unit
Stream		
name	Alimentação	
description		
type	default	
Connections		
Overall		
pressure	1	atm
temperature	40	°C
mass fraction [Ethanol]	0.93544692	
mass fraction [Water]	0.064553077	
flow	4186.09	kg/h
MW	0.0418609	kg/mol
Compound flows		
Ethanol	3915.865	kg/h
Water	270.22499	kg/h
Phase Fractions		
mass phase fraction [Liquid]	1	
Liquid composition		
mass fraction [Ethanol]	0.93544692	
mass fraction [Water]	0.064553077	
Overall properties		
enthalpy	-40708.429	J/mol
enthalpyF	-276688.03	J/mol
volume	4.9322435e-05	m³/mol
bubblePointTemperature	74.755822	°C
bubblePointPressure	0.21238862	atm
dewPointTemperature	75.767396	°C
dewPointPressure	0.19797667	atm
Liquid properties		

Fonte: Acervo próprio.

Figura 4: Dados de processo para C1.



Configuration for Operation C1:

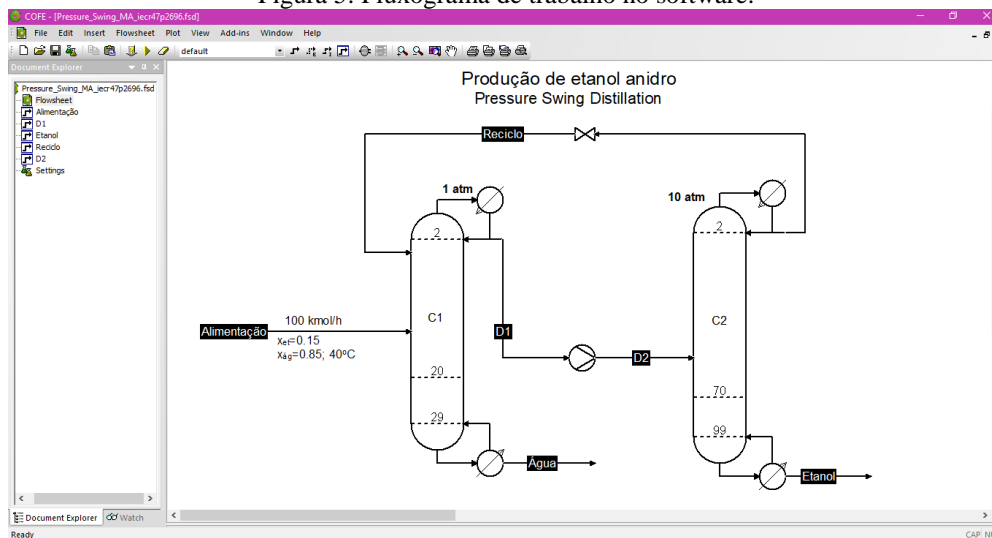
- Operation: Simple Distillation
- Condenser: Total (Liquid product)
- Reboiler: Partial (Liquid product)
- Number of stages (e.g. 10): 30
- Feed stage(s) (e.g. 5,7): 12
- Sidestream stage(s) (e.g. 2,9):
- Pumparound(s) (e.g. 6,8,9,11):

Flowsheet is solved. Converged 1 iterations.

Fonte: Acervo próprio.

Após todas as configurações do processo no software, gerou-se o fluxograma final (Figura 5) no qual foi processado para obtenção dos resultados.

Figura 5: Fluxograma de trabalho no software.



Fonte: Acervo próprio.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos na simulação do processo PSD puderam ser visualizados a partir da aba “Insert” no comando “Stream Report” (Tabela 1). Em destaque, está a fração molar de etanol produzida na coluna C2. Isso significa a possibilidade de separação de água e etanol, tendo este uma concentração próxima à requerida para EAC.

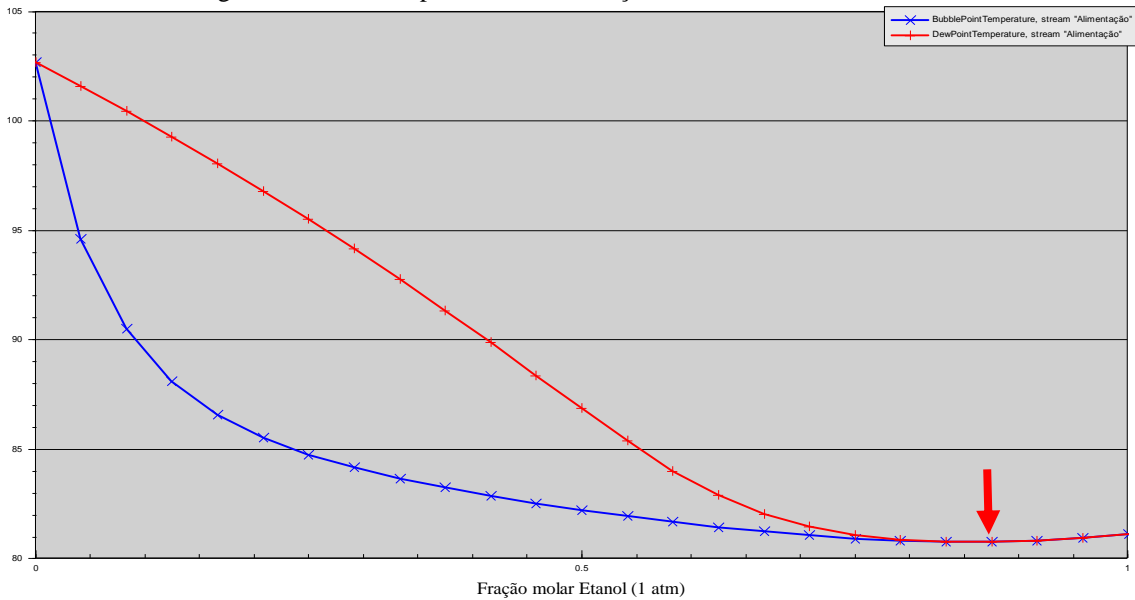
Tabela 1: Resultados do processo após simulação no software.

Corrente	Alimentação	D1	D2	Água	Etanol	Unidade
Pressão	1	1	10	1	10,00	atm
Temperatura	40,00	75,14	75,40	100,74	151,29	°C
Vazão de alimentação	4186,09	4132,95	4132,95	531,384	1437,67	kg / h
Fração molar de etanol	0.85	0.875	0.875	0.0001	0.99	
Fração molar de água	0.15	0.124	0.124	0.9999	0.01	

Fonte: Acervo próprio.

A Figura 6 foi obtida pela aba “Plot”, comando “Tx plot”, selecionando os componentes “ethanol” e “water” e a corrente “D1”. É apresentado o comportamento das curvas de orvalho e de bolha em D1 (corrente de destilado da primeira coluna) a 1 atm. Nesta figura, percebe-se a formação do azeótropo em aproximadamente 87% em mol, ou seja, em C1 só é possível a separação dos dois componentes em um ponto pouco abaixo da azeotropia. É notável, também, que as maiores temperaturas na coluna se dão onde a composição de etanol é aproximadamente zero, justificando a presença majoritária de água na saída de fundo de C1. Conforme a temperatura diminui, a fração de etanol aumenta, atingindo os estágios no topo da coluna.

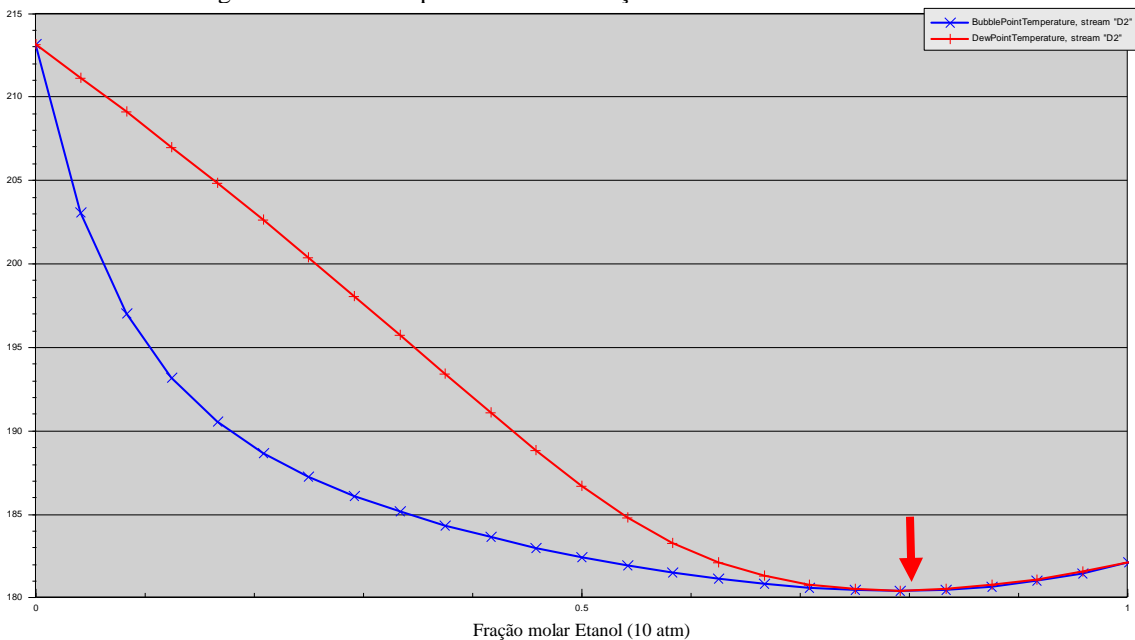
Figura 6: Curva Temperatura versus fração molar de etanol em C1.



Fonte: Acervo próprio.

Analisando a corrente D2 (Figura 7), vê-se que o aumento de pressão “desloca” o ponto de azeótropo para a esquerda, aproximadamente 80% em mol de etanol. Sendo assim, a coluna C2 é alimentada em uma região seguinte a esse ponto, não dificultando o processo de destilação. É cabível ressaltar também que a concentração de etanol aumenta proporcionalmente à temperatura, explicando a saída deste produto na corrente de fundo, onde há maior calor. Na corrente de topo a composição é semelhante àquela de entrada em C2, pois a temperatura alcançada se assemelha à do ponto azeótropo formado em C1.

Figura 7: Curva Temperatura versus fração molar de etanol em C2.



Fonte: Acervo próprio.

5 CONCLUSÃO

A partir do software COCO foi possível desenvolver, analisar e discutir o processo de destilação por oscilação de pressão que, apesar de complexo, se tornou simples com o auxílio computacional. Todas as etapas, desde a proposição dos componentes, inserção das unidades de operação (colunas) e das correntes, até a análise dos resultados foram compreensíveis podendo ser realizadas por acadêmicos de engenharia sem demasiadas dúvidas. Todos os dados obtidos foram passíveis de discussão e condizentes com o esperado, dando credibilidade ao programa utilizado.

Com a gama de informações obtidas e a facilidade de uso, é possível analisar alterações nas variáveis de processo, como número de estágios nas colunas, temperatura e pressão de alimentação, podendo ser realizadas otimizações, mesmo que o software não seja exatamente voltado para este objetivo.

6 REFERÊNCIAS

AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS. **Resolução ANP nº 7, de 9.2.2011 – DOU 10.2.2011 – retificada DOU 14.4.2011.** Disponível em: <http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-anp/resol-anp/2011/fevereiro&item=ranp-7-2011> Acesso em 03 de maio de 2018

FIGUEIRÊDO, M. F. **Obtenção de etanol anidro via destilação extrativa: simulação e otimização.** Dissertação de Mestrado. UFCG. Campina Grande – Paraíba, 2009.

FRANCISQUETTI, M. C. C. **Modelagem, simulação e otimização de processos usando o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization).** Monografia – Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2014.

PERRY, J.; PERRY, R.; GREEN, D. **Perrys Chemical Engineers Handbook.** 8 ed. New York: McGraw-Hill, 2008.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química.** 7 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

USE OF FREE SOFTWARE FOR PROBLEM RESOLUTION INVOLVING DISTILLATION BY PRESSURE OSCILLATION

***Abstract:** The use of softwares in the teaching of Chemical Engineering has great importance in the development of the academics, since these are prepared for the analysis of processes without that they are a problem in large scale. Pressure-pressure distillation can be used to separate azeotropic blends that are the point of least impact with respect to the operating temperature, but are more difficult to address because of their complexity. In order to contribute to a better understanding of pressure oscillation distillation processes, this work applies to a practical example of the use of COCO software (Cape-Open for Cape-Open). The*

results were searched for expected and subject to discussion. You can have ease of use of the software as well as its applicability even with complex processes.

Keywords: *Distillation. Free software. Teaching of Chemical Engineering.*

Organização:



Realização:

