

Modelagem Computacional E Matemática De Processos De Destilação De Misturas Contínuas

Computational And Mathematical Modeling Of Processes Of Distillation Of Continuous Mixtures

Paulo André Dias Jácome ¹
Alexandre Alvarenga Palmeira ²
Alexandre Fernandes Habibe ³

Resumo

O conceito de misturas contínuas foi aplicado para resolução do problema de separação por destilação, utilizando-se para tanto uma função de distribuição $f(x)$ de frações molares das espécies químicas, caracterizadas pelo seu índice contínuo x , que representa o número de grupos funcionais presentes na molécula para uma mistura de alcanos lineares. O problema do equilíbrio líquido-vapor corresponde a um sistema de equações algébrico-funcional para as fases líquida e vapor. As aproximações McCabe-Thiele (condições CMO – constant molar overflow) foram estendidas ao caso contínuo, com o intuito de evitar a utilização de balanços de energia. Avaliando e resolvendo o sistema apenas em seus pontos de colocação o problema torna-se puramente algébrico, podendo ser representado em forma matricial. O resultado apresentado contempla a modelagem computacional de processos de separação de misturas contínuas. A pertinência da modelagem foi observada com a migração de componentes leves para o topo e pesados para o fundo do equipamento, além do fato de que as temperaturas de saturação dos componentes típicos do topo foram coerentes com resultados experimentais relatados na literatura.

Palavras-chave: misturas contínuas, coluna de destilação, método de quadratura.

¹ Mestre - Ciências Exatas – Engenharias – UniFOA
paulo.andré@foa.org.br

² Doutor - Ciências Exatas – Engenharias – UniFOA
alexandre.palmeira@foa.org.br

³ Mestre - Ciências Exatas – Engenharias – UniFOA
alexandre.habibe@foa.org.br

ABSTRACT

The concept of continuous mixtures was applied for resolution of the problem of separation for distillation, using itself for, in such a way, a distribution function $f(x)$ of molar fractions of the chemical species, characterized for its continuous index x , that represents the number of functional groups inside the molecule for a mixture of linear alcanos. The problem of the liquid-vapor balance corresponds to a system of algebraic-functionary equations for the liquid and vapor phases. The McCabe-Thiele approaches (CMO conditions - constant molar overflow) were extended to the continuous case, with intention to prevent the use of energy rockings. Evaluating and deciding the system only in its points of rank, the problem becomes purely algebraic, being able to be represented in matrical form. The presented result contemplates the computational modeling of the processes of continuous mixtures separation. The relevancy of the modeling was observed with the migration of light components for the top and weighty for the deep of the equipment, beyond the fact of that the saturation temperatures of the typical components from the top were coherent with the mentioned experimental results in literature.

keywords: Continuous Mixtures, Distillation Column, Quadrature Method.

1 Nomenclatura

P - Pressão.

P_i^{sat} - Pressão de Saturação.

P_c - Pressão crítica.

Q - Quantidade de calor.

R - Constante universal dos gases.

R_R - Razão de refluxo.

S - Entropia.

T - Temperatura.

T_b - Temperatura de ebulição.

T_c - Temperatura crítica.

V - Volume.

x - Fração molar.

x_i - Fração molar do componente líquido.

$X(x)$ - Função de distribuição - fase líquida.

U_j - Vazão molar da retirada lateral de líquido no estágio j .

W_j - Vazão molar da retirada lateral de vapor no estágio j .

y_i - Fração molar do componente gasoso.

$Y(x)$ - Função de distribuição - fase vapor.

Z_i - Fator de compressibilidade do componente i .

z_j - Composição da carga no estágio j .

β - Fração vaporizada da carga.

δ - Delta de dirac.

η - Parâmetro ajustável (*eta*).

ε - parâmetro ajustável (*epsilon*).

2 Introdução

Define-se por mistura contínua aquela cuja composição é tão complexa que não é viável distinguir as espécies químicas presentes na mesma. Ao invés disso, escolhe-se um índice, como o número de estruturas funcionais na molécula, ponto de ebulição ou tempo de retenção em cromatografia para caracterizar cada elemento e admite-se que este varie continuamente. Assim, a fração molar x_i de uma espécie A é substituída por $f(x)dx$, que é o elemento de fração molar do material com o índice no intervalo $(x, x + dx)$. Assim, $f(x)$ é comumente conhecida como função de distribuição (FD) de frações molares das espécies caracterizadas pelo índice x na mistura, em completa analogia às funções de distribuição de probabilidade de variáveis aleatórias contínuas, nos estudos estatísticos. Como seus análogos estatísticos, se a fração molar de substâncias com índice entre a e b for requerida, tal é contabilizado integrando-se o elemento de fração

molar $f(x)dx$ desde a até b . Por motivos óbvios, a integral de $f(x)$ sobre todo o domínio acessível ao índice contínuo x deve ser unitária, dando origem à chamada condição de normalização.

$$\int_0^{\infty} f(x)dx = 1 \quad (1)$$

É de particular interesse a descrição físico-química de tais misturas, exemplificada por cálculos de seu equilíbrio líquido-vapor. Os cálculos de equilíbrio líquido-vapor (ELV) para misturas complexas têm sido tradicionalmente acessados através do método dos Pseudo-Componentes. Basicamente, o procedimento consiste num agrupamento (“lumping”) no qual componentes-chave são escolhidos para caracterizar a mistura inteira. Assim, uma modelagem simples pode ser adotada, mas os resultados são altamente dependentes da escolha do conjunto de pseudo-componentes (Chachamowitz, 1993). O desenvolvimento de uma termodinâmica contínua mostrou vantagens em muitos aspectos. (Jácome, Paulo André D. et al, 2005 e Peixoto, Fernando C. et al, 2000).

Um ponto crucial para o sucesso de uma modelagem termodinâmica, sob a hipótese de continuidade da mistura, é a escolha do índice contínuo. Alguns autores escolhem um índice mais usual, como peso molecular ou ponto de ebulição (Du e Mansoori, 1986; Cotterman e Prausnitz, 1985). Contudo, algumas vezes, é difícil relacionar tais índices com outras propriedades termodinâmicas, especialmente parâmetros de equações de estado (EE), e ajustes polinomiais têm sido empregados para tal (Cotterman et. al., 1985), desprezando o fato de que tais parâmetros podem ser fácil e acuradamente estimados através de métodos de contribuição de grupos (método de Joback) ao invés dos tradicionais polinômios ajustados.

O presente trabalho segue a tendência apontada recentemente (Peixoto e de Medeiros, 1999a, 1999b, 2001, Peixoto, Fernando C. et al, 2000; Jácome, Paulo André D. et al 2005) de escolher como índice continuamente distribuído, o número de grupos funcionais presentes na molécula de parafinas lineares. Dessa forma, centrando a descrição contínua em índices associados a sub-estruturas funcionais na molécula, é possível “varrer” todo o espectro de propriedades físico-químicas com consagrados e semi-teóricos métodos de contribuição de grupos, ao invés dos puramente empíricos e pobremente ajustados polinômios. As propriedades globais da mistura são, obviamente,

função de integrais das distribuições de propriedades no domínio dos índices e estas são, vias de regra, operacionalizadas por métodos consagrados de integração numérica, como quadraturas, que não ferem os balanços materiais, como acontece com o Método dos Momentos (Cotterman e Prausnitz, 1985), procedimento, portanto, conservativo.

3 Modelagem

Como mencionado em Cotterman et al. (1985), o ELV de misturas contínuas pode ser descrito de forma inteiramente análoga ao caso discreto:

$$Y(x) \varphi_v(x, T, P, Y(x)) = X(x) \varphi_L(x, T, P, X(x)) \quad (2)$$

onde $X(x)$ e $Y(x)$ representam a FD da fase líquida (subscrito L) e vapor (subscrito V), respectivamente; T é a temperatura em K e P a pressão em Pa.

Uma vez que o presente trabalho contempla misturas de alcanos, a hipótese de total idealidade pode ser utilizada, o que conduz a:

$$Y(x) = \frac{P^{sat}(x, T)}{P} X(x) \quad (3)$$

onde $P^{sat}(x, T)$ representa a pressão de vapor da molécula de índice x na temperatura T , em completa analogia com o caso discreto.

Como pode ser visto, estas equações requerem previsões para $P^{sat}(x, T)$ o que pode ser feito com os conhecidos métodos de contribuição de grupos, como as previsões de Joback (1984) para temperatura normal de ebulição (T_b) e coordenadas críticas (T_c e P_c). Se x é o número de estruturas funcionais (os chamados grupos Joback), tem-se:

$$T_b(x) = 198 + \sum \Delta T_b(x) \quad (4)$$

$$T_c(x) = T_b(x) [0,584 + 0,965 \sum \Delta T_c(x) - (\sum \Delta T_c(x))^2]^{-1} \quad (5)$$

$$P_c(x) = [0,113 + 0,0032Na - \sum \Delta P_c(x)]^2 \quad (6)$$

onde Na representa o número total de átomos na molécula. Todos os somatórios são realizados sobre os grupos presentes na molécula, contabilizando os efeitos incrementais das contribuições individuais ΔT_b , ΔT_c e ΔP_c .

Cabe ressaltar que, como o presente trabalho contempla misturas contendo somente alcanos lineares, x será associado ao número de átomos de carbono

da molécula uma vez que só existem (numa parafina não-ramificada), dois grupos $-CH_3$ e $(x-2)$ grupos $-CH_2-$; essa escolha diminui habilmente o número de índices contínuos para apenas um único.

As formas (4) a (6) são requeridas para a predição final da pressão de vapor, com o seguinte método:

$$P^{sat}(x, T) = P_c(x) \exp \left\{ \frac{T_b(x)/T_c(x)}{1 - T_b(x)/T_c(x)} \left[1 - \left(\frac{T_c(x)}{T} \right) \right] \log [P_c(x)] \right\} \quad (7)$$

As equações (4) a (7) mostram a vantagem de usar como índice contínuo, o número de grupos funcionais na molécula e, a Tabela 1 abaixo fornece os elementos necessários para a implementação destas:

Tabela 1: Contribuições de Grupo

Increments	ΔT_c	ΔP_c	ΔT_b
-CH ₂ -	0,0189	0	22,88
-CH ₃	0,0141	0,0012	23,58

Por último, para uma parafina linear, o vetor Joback contabiliza o total de cada (sub) grupo Joback presente na molécula em termos de x :

$$\underline{J}(x) = \begin{bmatrix} -CH_2- \\ -CH_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x-2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

As Equações (4), (5) e (6) ficam, então:

$$\sum \Delta T_c(x) = \underline{J}(x) \Delta T_c(x) = 2(0,0141) + (x-2)0,0189 \quad (9)$$

$$\sum \Delta P_c(x) = \underline{J}(x) \Delta P_c(x) = 2(-0,0012) \quad (10)$$

$$\sum \Delta T_b(x) = \underline{J}(x) \Delta T_b(x) = 2(23,58) + (x-2)22,88 \quad (11)$$

3.1 Destilação de Misturas Contínuas

Será estudada uma coluna de destilação típica, com retiradas laterais de líquido e/ou vapor e apenas uma fonte de alimentação, como apresentado na Figura 1.

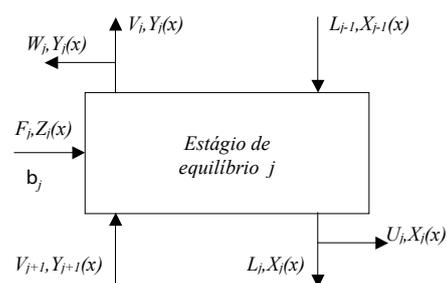


Figura 1 – Coluna de Destilação

Na Figura 1, F , V , L , W e U representam, respectivamente, as vazões molares da carga, do vapor, do líquido e retiradas laterais de vapor e líquido (em mol/s); $X(x)$, $Y(x)$ e $Z(x)$ são as funções distribuição do líquido, do vapor e da carga, β é a fração vaporizada da carga e os subscritos indicam o estágio ao qual tais entidades estão associadas. As configurações de trocadores de calor (condensadores e refeedores) parciais e totais encaixam-se neste formato.

Neste trabalho, será utilizada a distribuição gama (Abramowitz e Stegun, 1964) como função distribuição de frações molares para simular a carga:

$$Z(x) = \frac{\varepsilon^{n+1} x^n \exp(-\varepsilon \cdot x)}{\Gamma(n+1)} \quad (12)$$

Como se vê, esta possui dois parâmetros ajustáveis, e ε e h e obedece à condição de normalização (integral unitária). Além disso, consegue reproduzir o caso de uma só espécie presente, bastando, para tal, que se faça:

$$\begin{aligned} \lim Z(x) &= \delta(x-d) \\ \eta, \varepsilon &\rightarrow \infty \\ \eta / \varepsilon &= d \end{aligned} \quad (13)$$

onde δ é a função delta de Dirac.

3.2 Aproximações McCabe – Thiele e o Resultado do Sistemas de Equações

Para cada estágio de equilíbrio (j), incluindo o condensador e o refeedor, surge a necessidade de se calcular um conjunto de equações, denominadas equações MESH, que incluem, a equação de balanço material (M), equação de equilíbrio (E), equações do somatório das frações molares de ambas as fases (S), equação do balanço de energia (H), são elas:

$$F_j Z_j(x) + V_{j+1} Y_{j+1}(x) + L_{j-1} X_{j-1}(x) - (V_j + W_j) Y_j(x) - (L_j + U_j) X_j(x) = 0 \quad (14)$$

$$Y_j(x) = K(x, T_j) X_j(x) \quad (15)$$

$$\text{com } K(x, T) = \frac{P^{sat}(x, T)}{P}$$

$$\int_0^1 X_j(x) dx = 1 \quad \text{e} \quad \int_0^1 Y_j(x) dx = 1 \quad (16)$$

$$F_j \bar{H}_{F_j} + V_{j+1} \bar{H}_{V_{j+1}} + L_{j-1} \bar{H}_{L_{j-1}} - (V_j + W_j) \bar{H}_{V_j} - (L_j + U_j) \bar{H}_{L_j} = 0 \quad (17)$$

As aproximações McCabe-Thiele foram utilizadas com o intuito de evitar a utilização da equação do balanço de energia. Com as aproximações McCabe-Thiele, pode-se obter as equações para entalpia das fases líquido e vapor saturadas:

$$\bar{H}_L^{sat} = a + \int_0^1 b(x) X(x) dx \quad \text{e} \quad \bar{H}_V^{sat} = A + \int_0^1 b(x) Y(x) dx \quad (18)$$

onde o subscrito sat refere-se a condição de saturação. A diferença \bar{h} representa o calor latente de vaporização da mistura (considerada constante). Dentro das aproximações podemos apresentar a entalpia molar da carga F :

$$\bar{H}_{F_j} = (1-\beta) \bar{H}_{L_{F_j}} + \beta \bar{H}_{V_{F_j}} \quad (19)$$

onde a condição térmica para F é dada pela fração vaporizada $\beta = V_{F_j}/F$. Assim, a equação de balanço de energia é substituída por relações entre as vazões de vapor e líquido nas seções da coluna:

$$\begin{cases} V_{j+1} = V_j - F_j \beta_j + W_j \\ L_j = L_{j-1} + F_j (1-\beta_j) - U_j \end{cases} \quad (20)$$

$$\begin{cases} V_1 = D \\ L_1 = R_R D; \quad V_2 = V_1 + L_1 \\ B = L_{N-1} - V_n; \quad L_n = B \end{cases} \quad (21)$$

onde D e B são, respectivamente, a vazão de topo e de fundo da coluna e R_R é a razão de refluxo interna.

Observam-se, como efeitos das aproximações McCabe-Thiele:

- a) O desacoplamento dos balanços material e de energia (sendo o segundo substituído, *a priori*, por relações mais simples);
- b) A aditividade das vazões molares ao longo da coluna.

O conjunto de equações (20) e (21) podem ser resolvidos independentemente, fornecendo todas as vazões (V e L) ao longo da coluna, bastando, para tal, fornecer um conjunto coerente de especificações, sendo, o mais comum, especificar R_R e D o que significa, indiretamente, fixar uma produção no topo e uma carga térmica no condensador. É óbvio que as cargas (F) e retiradas laterais (W e U) bem como suas localizações são, também, dados de projeto.

O sistema algébrico-funcional a ser resolvido para cada estágio j inclui, portanto, apenas as equações (14), (15) e uma das restrições de normalização expressas na equação (16), sendo os conjuntos (20) e (21) resolvidos a priori e independentemente. Procura-se determinar as funções distribuição de fração molar em ambas as fases $Y_j(x)$ e $X_j(x)$ e a temperatura T_j em cada estágio j .

4 Procedimento Numérico

Uma vez que as integrais (16) são acessadas através de procedimentos do tipo:

$$\int_0^1 Y(x) dx \cong \sum_{i=1}^n w_i Y(x_i) = \underline{w}^t \underline{Y} \quad (22)$$

onde x_i e w_i são, respectivamente, n pontos de colocação e pesos do procedimento, pode-se perceber que a função distribuição só é calculada em um número finito de pontos (\underline{Y}). Este é o chamado método das quadraturas ou método tipo colocação. Nele, todas as funções distribuição serão calculadas ou avaliadas apenas nos pontos de colocação, transformando o sistema algébrico-funcional formado pelas equações (14) + (15) + (16) sob a influência de (20) num problema puramente algébrico descrito pelas seguintes discretizações/colocações das equações mencionadas:

$$F_j \underline{Z}_j + V_{j+1} \underline{Y}_{j+1} + L_{j-1} \underline{X}_{j-1} - (V_j + W_j) \underline{Y}_j - (L_j + U_j) \underline{X}_j = 0 \quad (23)$$

$$\underline{w}^t \underline{Y}_j - I = 0 \quad (24)$$

$$\underline{Y}_j = \underline{Diag} \left[\frac{P^{sat}(\underline{x}, T_j)}{P} \right] \underline{X}_j \quad (25)$$

todos os grupos para j de 1 a N estágios de equilíbrio. Nas equações acima, \underline{Z}_j , \underline{Y}_j e \underline{X}_j são os vetores de colocação das distribuições $Z_j(x)$, $Y_j(x)$ e $X_j(x)$ nos pontos \underline{x} , $P^{sat}(\underline{x}, T_j)$ as pressões de saturação à T_j das moléculas caracterizadas por \underline{x} e um operador que aloca os elementos de \underline{u} na diagonal de uma matriz diagonal.

O sistema de equações (23) a (25) é completamente análogo à simulação de uma coluna com n componentes discretos (no qual $w_i = 1$ para todo i). Isso poderia levar o leitor menos atento a pensar numa defesa da abordagem de sistemas complexos via pseudocomponentes. Ainda que, por muito tempo, tenha sido esta a principal estratégia, a escolha de tais com-

ponentes era baseada em propriedades físicas, químicas ou físico-químicas, com resultados ruins. Com a presente abordagem, o critério de escolha é puramente matemático (e visa calcular FDs) com quaisquer propriedades da mistura podendo ser acessadas a qualquer momento.

Os esforços a seguir tencionam colocar o problema num formato adequado a aplicação de um procedimento tipo Newton-Raphson (com amortecimento), tangenciando a abordagem de Naphtali-Sandholm (1971). Inicia-se organizando o vetor de incógnitas:

$$\underline{u}^t = [Y_1^t X_1^t Y_2^t X_2^t \dots Y_N^t X_N^t] \quad e \quad (26)$$

$$\underline{\theta}^t = [\underline{u}^t \dots T_1 T_2 A T_N] \quad (27)$$

Dessa forma, pode-se colocar o problema (23) a (25) num formato matricial, com vantagens. Inicialmente, as seguintes matrizes são criadas (nas quais \underline{I} é uma matriz identidade de ordem $n \times n$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{R} = [L_N \underline{I} - V_{N+1} \underline{I} - B \underline{I}] \\ \underline{C} = [-D \underline{I} - L_j \underline{I} V_{j+1} \underline{I}] \\ \underline{S}_j = [L_{j-1} \underline{I} - (V_j + W_j) \underline{I} - (L_j + U_j) \underline{I} V_{j+1} \underline{I}] \\ \underline{K}(T) = \underline{Diag}(K(x_1, T), K(x_2, T), \dots, K(x_n, T)) \\ \underline{K}_j = [\underline{I} - \underline{K}(T_j)] \end{array} \right. \quad (28)$$

Depois, uma matriz altamente esparsa \underline{M} é definida em termos de seus blocos de elementos não-nulos, dados pelas matrizes em (28):

- A porção superior esquerda de \underline{M} é ocupada por \underline{C} ;
- Para j desde 2 até $N-1$, as linhas desde $(j-1).n+1$ até $j.n$ e as colunas desde $2.(j-2).n+n+1$ até $2.j.n+n$ de \underline{M} são ocupadas por \underline{S}_j ;
- As linhas desde $(N-1).n+1$ até $N.n$ e as colunas desde $(2.N-3).n+1$ até $2.N.n$ de \underline{M} são ocupadas por \underline{R} ;
- Para j desde 1 até N , as linhas desde $N.n+(j-1).n+1$ até $N.n+j.n$ e as colunas desde $2.(j-1).n+1$ até $2.j.n$ de \underline{M} são ocupadas por \underline{K}_j ;
- Para j desde 1 até N , a linha $2.N.n+j$ e as colunas desde $2.(j-1).n+1$ até $(2j-1).n$ de \underline{M} são ocupadas por w_j ;

Os itens (a), (c) e (b) contabilizam, respectivamente, o condensador, o refeedor e os demais estágios de equilíbrio. O item (d) contabiliza as relações de equilíbrio e o item (e) as restrições de normalização.

De modo similar, um vetor de não-homogeneidades (Nh) é descrito por:

$$\underline{F}(\theta) = [\underline{M}(T)\underline{u} - \underline{N}h] = 0 \tag{29}$$

a) Para j desde 1 até N as linhas desde $(j - 1).n + 1$ até $j.n$ de $\underline{N}h$ são ocupadas por onde se pode ver que a única porção de M que é função das incógnitas (e, portanto, sujeita a iterações) é aquela correspondente a K_j . Uma matriz M típica é mostrada na Figura 2, onde se pode ver seu grau de esparsividade. A parte superior contabiliza os balanços materiais, a central os equilíbrios de fase e a inferior as restrições de normalização:

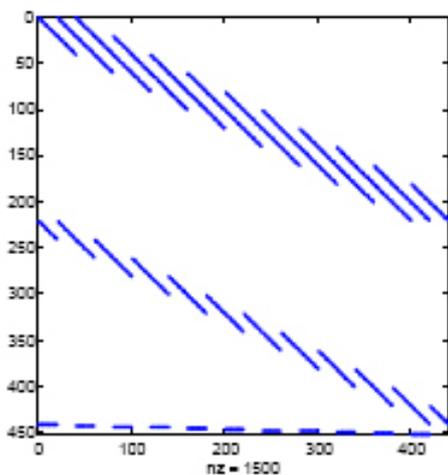


Figura 2 - Esparsividade de \underline{M} .

O sistema (29) é solucionado, então, com um esquema tipo Newton-Raphson amortecido:

$$\theta^{n+1} = \theta^n \wp x [\underline{J}(\theta^n)]^{-1} \underline{F}(\theta^n) \tag{30}$$

onde θ^n simboliza a n -ésima iteração em θ , \underline{J} a matriz Jacobiana de \underline{F} em relação a θ , e \wp é um fator de amortecimento. A introdução deste fator advém do conhecido fato do Método de Newton tradicional poder exibir alta instabilidade numérica nas primeiras iterações com convergência quadrática próxima à solução. A proposição de \wp é empírica e obedeceu à seguinte regra:

a) A cada iteração, define-se o vetor x cujas componentes são dadas pelo inverso das componentes de $[\theta^n]$, ambos vetores de tamanho $k = 2.n.N+N$;

b) Se $\frac{x^T \cdot [\underline{J}(\theta^n)]^{-1} \underline{F}(\theta^n)}{k} < 0,2$ toma-se $\wp = 1$, caso contrário, faz-se $\wp = \frac{0,2k}{x^T \cdot [\underline{J}(\theta^n)]^{-1} \underline{F}(\theta^n)}$

A matriz Jacobiana do sistema pode ser computada facilmente, graças à linearidade (com respeito a \underline{X} e \underline{Y}) da porção referente aos balanços materiais, relações de equilíbrio e restrições de normalização:

$$\underline{J}(\theta) = |\underline{M}(T) \underline{dK}(T)| \tag{31}$$

onde a matriz \underline{dK} contabiliza as derivadas da Equação (3.59) com respeito a T , da seguinte maneira:

a) Para j desde 1 até N , as linhas desde $N.n + (j - 1).n + 1$ até $N.n + j.n$, coluna j de \underline{dK} são ocupadas por $-\frac{dP^{sat}}{dT} \Big|_{T=T_j} \cdot \frac{X_j}{P}$, sendo esta derivada calculada a partir da formula (7):

$$\frac{dP^{sat}}{dT} = P^{sat}(x, T) \cdot \frac{T_b(x)/T_c(x)}{1 - T_b(x)/T_c(x)} \cdot \left[\frac{T_c(x)}{T^2} \right] \cdot \log[P_c(x)] \tag{32}$$

b) Todas as demais posições de \underline{dK} são zero.

Uma típica matriz \underline{J} é representada na Figura 3, onde novamente se pode notar o alto caráter esparsivo. A porção esquerda remete a \underline{M} e a parte a direita é contribuição de \underline{dK} , devido à justaposição (31):

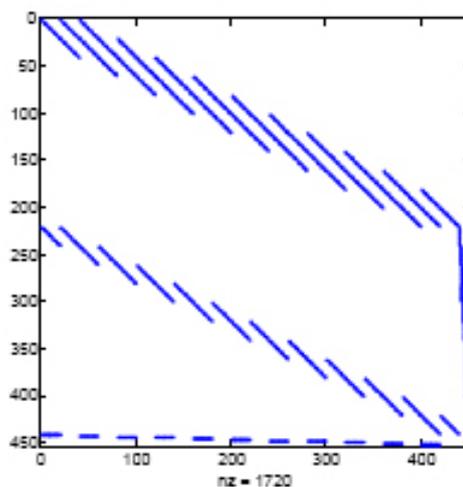


Figura 3 - Esparsividade de \underline{J} .

5 Simulação

Considere-se uma carga trimodal cuja distribuição apresenta três picos. Os parâmetros ajustáveis possuem os seguintes valores: $\varepsilon_1 = 3$, $\varepsilon_2 = 10$, $\varepsilon_3 = 10$; $\eta_1 = 6$, $\eta_2 = 80$, $\eta_3 = 50$ e $C_1 = C_2 = C_3 = 1/3$, alimentada numa coluna com os parâmetros de operação da Tabela 2:

Tabela 2 - Especificações da coluna

Especificações	Valor
Números de Estágios	11
Estágio de alimentação	5
Vazão de alimentação	100 gmol/s
Estágio de Retirada de Líquido	4
Razão de refluxo	3
Pressão na coluna	1 bar
Vazão de destilado	100/3 gmol/s
Vazão de Retirada	100/3 gmol/s

É utilizada a integração trapezoidal (Jácome *et al*, 2005) em pontos equiespaçados de h desde $x = 0$ até um limite julgado razoável (índice da mais “pesada” substância com existência apreciável na carga):

$$x_i = ih \quad i = 0 \text{ até } N_{max} \quad e \quad (32)$$

$$w_i = \begin{cases} h/2 & \text{se } i=0 \text{ ou } i=N_{max} \\ h & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (33)$$

Na simulação é utilizada uma alimentação com três picos, onde cada um desses picos é retirado em um estágio; o pico contendo componentes mais pesados é retirado como produto de fundo, o pico contendo componentes mais leves é retirado como produto de topo e o pico com componentes intermediários retirado por uma saída lateral existente no estágio 4, localizado nas proximidades do centro da coluna de destilação. O fluxograma da Figura 4 representa o processo de destilação de misturas contínuas simulado.

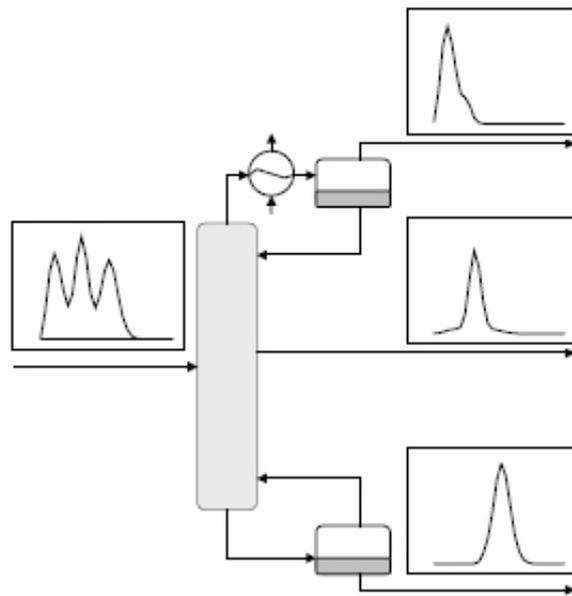


Figura 4 - Fluxograma esquemático

Os resultados da simulação aparecem nas Figuras 5 e 6 e Tabela3:

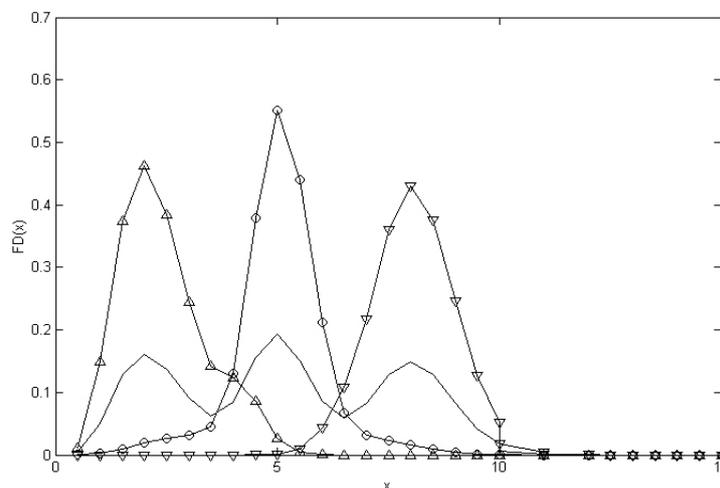


Figura 5. Distribuições da Carga (linha contínua), Topo (Δ), Retirada Lateral (o) e Fundo (∇)

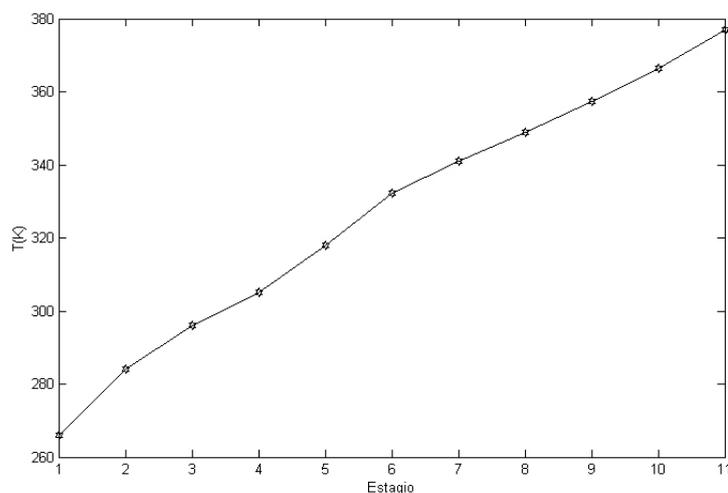


Figura 6. Perfil de Temperaturas

Tabela 3 - Resultados da Simulação

Índice	Carga	Fundo	Topo	Retirada Lateral	Índice	Carga	Fundo	Topo	Retirada Lateral
0.5	0.0035	0.0000	0.0105	0.0001	8.0	0.1488	0.4305	0.0000	0.0160
1.0	0.0504	0.0000	0.1486	0.0027	8.5	0.1279	0.3750	0.0000	0.0086
1.5	0.1281	0.0000	0.3744	0.0100	9.0	0.0834	0.2465	0.0000	0.0036
2.0	0.1606	0.0000	0.4628	0.0191	9.5	0.0425	0.1262	0.0000	0.0012
2.5	0.1367	0.0000	0.3840	0.0261	10.0	0.0173	0.0517	0.0000	0.0003
3.0	0.0918	0.0000	0.2438	0.0317	10.5	0.0058	0.0173	0.0000	0.0001
3.5	0.0623	0.0000	0.1418	0.0451	11.0	0.0016	0.0048	0.0000	0.0000
4.0	0.0845	0.0000	0.1234	0.1301	11.5	0.0004	0.0011	0.0000	0.0000
4.5	0.1551	0.0001	0.0857	0.3796	12.0	0.0001	0.0002	0.0000	0.0000
5.0	0.1927	0.0012	0.0259	0.5509	12.5	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
5.5	0.1514	0.0095	0.0040	0.4408	13.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
6.0	0.0856	0.0442	0.0004	0.2122	13.5	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
6.5	0.0585	0.1085	0.0000	0.0670	14.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
7.0	0.0830	0.2173	0.0000	0.0316	14.5	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
7.5	0.1279	0.3604	0.0000	0.0232	15.0	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Cabe ressaltar que, na simulação contemplada, o aumento do valor máximo das distribuições dos produtos, em relação à da carga, se deve ao requisito de integral unitária; como menos substâncias estão presentes, cada uma das remanescentes tem sua fração aumentada.

6 Conclusões

O presente trabalho objetivou a construção de um simulador estacionário para colunas de destilação capaz de receber uma carga caracterizada por uma distribuição contínua de componentes. Tal simulador

se insere em um contexto de disponibilização de ferramentas computacionais para o tratamento de processos de separação envolvendo misturas contínuas.

Este trabalho faz parte de uma linha de pesquisa iniciada com os trabalhos de Peixoto (1996), Peixoto (1999) – estes voltados para a modelagem de sistemas reacionais contínuos (craqueamento catalítico com desativação do catalisador) –, Peixoto et al. (2001) – em que é feita uma descrição termodinâmica do problema de equilíbrio líquido-vapor em misturas contínuas mono- e multiindiciadas – e Jácome et al. (2005), em que as aproximações McCabe-Thiele (condições CMO – constant molar overflow) foram estendidas ao caso contínuo, com o intuito de evitar a

utilização de balanços de energia e resolver o problema de equilíbrio líquido vapor como um sistema de equações algébrico-funcional.

Os resultados obtidos demonstraram a eficiência da modelagem abordada e a separação entre os componentes leves e pesados existentes em cada mistura foi promovida. A utilização de uma carga caracterizada por uma distribuição trimodulada, alimentada numa única coluna dotada de drenagem lateral

de líquido, promoveu qualitativamente a separação. Foi interessante notar que a retirada lateral de líquido, mesmo sendo localizada apenas um prato acima do de alimentação, foi capaz de individualizar o pico intermediário. Cabe ressaltar que essa simulação indica a existência de um problema de otimização onde diversas configurações estruturais que produzem a mesma separação devem ser comparadas em busca de menor custo (custo fixo anualizado + custo operacional).

7 Referências

Chachamovitz, J. C. “*Simulação de Processos de Separação de Misturas Semicontínuas*”, Tese de Mestrado, PEQ/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (1993).

Cordes, W. and J. Rarey, “*A New Method for the Estimation of the Normal Boiling Point of Non-electrolyte Organic Compounds*,” *Fluid Phase Equilibria* 201, 409-433 (2002).

Cotterman, R. L., R. Bender and J. M. Prausnitz, “*Phase Equilibria for Mixtures Containing Very Many Components. Development and Application of Continuous Thermodynamics for Chemical Process Design*”, *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.* 24, 194 (1985).

Cotterman, R. L. and J. M. Prausnitz, “*Flash Calculations for Continuous or Semicontinuous Mixtures Using an Equation of State*,” *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.* 24, 434 (1985).

Du, P. C. and G. A. Mansoori, “*Phase equilibrium computational algorithms of continuous mixtures*,” *Fluid Phase Equilibria* 30, 57-64 (1986).

Gómez-Nieto, M. and G. Thodos, “*Generalized Vapor Pressure Equation for Nonpolar Substances*,” *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 17, 45-51 (1978).

Jácome, Paulo André D., “*Modelagem Computacional de Processos de Destilação de Misturas Contínuas*”, Tese de Mestrado, IPRJ/UERJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (2003).

Jácome, Paulo André D., Peixoto, Fernando C., Platt, Gustavo M. and Ahón, V. R. R. “*A New Approach to Distillation of Continuous Mixtures: Modelling and Simulation*” *Latin American Applied Research* 35:233-239 (2005).

Joback, K. G., “*A Unified Approach to Physical Property Estimation Using Multivariate Statistical techniques*”, M.Sc. Thesis, MIT, Cambridge, Massachusetts (1984).

Kehlen, H. and M. T. Ratzsch, “*Complex Multicomponent Distillation Calculations by Continuous Thermodynamics*,” *Chemical Engineering Science* 42,221-232 (1987).

Naphtali, L. M. and D. P. Sandholm, “*Multicomponent Separation Calculations by Linearization*,” *AIChE Journal* 17, 148-153 (1971).

Peixoto, Fernando. C., “*Modelagem e Estimação de Parâmetros em Misturas Contínuas com Reações Químicas*”, Tese de Mestrado, TPQB/EQ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (1996).

Peixoto, F. C., G. M. Platt and F. L. P. Pessôa, “*Vapor-Liquid equilibria of multi-indexed continuous mixtures using an equation of state and group contribution methods*,” *Chemical Engineering Journal* 77, 179-187 (2000).

Ratzsch, M. T., H. Kehlen and J. Schumann, “*Computer Simulation of Complex Multicomponent Hydrocarbon Distillation by Continuous Thermodynamics*,” *Fluid Phase Equilibria* 51, 133-146 (1989).

Teja, A. S., D. J. Lee, D. Rosenthal and M. Anselme, “*Correlation of the Critical Properties of Alkanes and Alkanols*,” *Fluid Phase Equilibria* 56, 153-169, (1990).

Wojciechowski, B. W., *Personal Communication to F. C. Peixoto* (1996).

Informações bibliográficas:

Conforme a NBR 6023:2002 da Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT), este texto científico publicado em periódico eletrônico deve ser citado da seguinte forma:

JACOME, P. A. D.; PALMEIRA, A. A.; HABIBE, A. F.. Modelagem Computacional e Matemática de Processos de Destilação de Misturas Contínuas. Cadernos UniFOA , Volta Redonda, ano II, n. 4, agosto. 2007. Disponível em: <<http://www.unifoa.edu.br/pesquisa/caderno/edicao/04/17.pdf>>