

MAÍRA MENDES LOPES

Estudo comparativo da destilação em batelada operando com refluxo constante e com composição do destilado constante

Dissertação apresentada à  
Escola Politécnica da Universidade de  
São Paulo para a obtenção do  
Título de Mestre em Engenharia

São Paulo  
2008

MAÍRA MENDES LOPES

Estudo comparativo da destilação em batelada operando com refluxo constante e com composição do destilado constante

Dissertação apresentada à  
Escola Politécnica da Universidade de  
São Paulo para a obtenção do  
Título de Mestre em Engenharia

Área de concentração:  
Engenharia Química

Orientadora:  
Profa. Dra. Maria Elena Santos Taqueda

São Paulo  
2008

## **FICHA CATALOGRÁFICA**

**Lopes, Maíra Mendes**

**Estudo comparativo da destilação em batelada operando com refluxo constante e com composição do destilado constante / M.M. Lopes. -- São Paulo, 2008.**

**155 p.**

**Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.**

**1.Destilação 2.Operações unitárias I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.**

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Tah Wun Song pelo exemplo, amizade, confiança e orientação.

Ao Prof. Dr. Wilson Miguel Salvagnini pelas valiosas sugestões e contribuições para a realização deste trabalho.

Profa. Dra. Maria Elena Santos Taqueda por todo o apoio.

Ao Laboratório de Propriedades dos Fluidos Derivados de Petróleo da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

À todos os professores e funcionários do Departamento de Engenharia Química pelos ensinamentos e pela ajuda.

À CAPES pela concessão da bolsa de mestrado.

Às excelentes amigas Denise e Lilian pelo exemplo de profissionais e pelas diversas colaborações prestadas durante a elaboração deste trabalho.

Aos meus pais pelo incentivo constante.

## RESUMO

Este trabalho tem por objetivo comparar dois modos de operação de destilação em batelada: com refluxo constante e composição do destilado constante. Desenvolveu-se um modelo matemático para a destilação em batelada de uma mistura binária (metanol-etanol) para operação com cada um destes modos. O modelo consiste basicamente dos balanços de massa e entalpia, relações e diagramas de equilíbrio líquido-vapor (composição de equilíbrio, temperaturas de bolha e orvalho da mistura), estimativa das propriedades físico-químicas da mistura (calor específico, calor latente de vaporização), determinação do número de estágios ideais necessários à separação (pelo método de McCabe-Thiele), cálculo de cargas térmicas no refulvedor e condensador, consumo de utilidades (vapor de água e água de resfriamento), estimativa do tempo de destilação e alguns aspectos econômicos sobre o processo (custos de equipamentos e operacionais, capacidade de produção, lucro mensal). Implementou-se em uma planilha eletrônica este modelo para as simulações matemáticas e análise técnico-econômica do processo. Em escala de laboratório (foram realizados, ao todo, oito ensaios, quatro de refluxo constante e quatro de refluxo variável, utilizando uma coluna de pratos perfurados), constatou-se uma boa concordância entre estes resultados experimentais e os calculados a partir da modelagem. Em seguida, estudaram-se, isoladamente em cada modo de operação e de modo comparativo, as principais variáveis de processo (taxa de refluxo, composição do destilado, quantidade de carga, vazão de destilado, etc.) através de simulações matemáticas, tanto no cenário de uma unidade existente como no caso do projeto de uma instalação nova. Para uma instalação existente, verificou-se, que no modo de destilação com composição de destilado constante, mantendo-se a vazão do vapor de topo constante, o tempo de destilação é menor, a capacidade de destilação é maior, resultando em maior lucro mensal. Para uma instalação a ser projetada, de novo, o processo mais vantajoso é o de refluxo variável e vazão de vapor do topo constante, pois requer menores áreas dos trocadores de calor para uma dada separação num tempo fixo de processo. No entanto, para o processamento de uma dada quantidade num mesmo tempo, à medida que se adota, no projeto, um número maior de estágios de separação na coluna, a diferença de lucro mensal torna-se praticamente indistinta para os modos de destilação estudados.

Palavras-chave: Destilação. Destilação em batelada. Refluxo constante. Refluxo variável. Destilação em laboratório. Simulação matemática.

## ABSTRACT

The aim of this study is to compare two operational methods of batch distillation of a binary system (methanol–ethanol): constant reflux and constant distillate composition. A phenomenological modeling concerning each mode was developed. It was based on material and enthalpy balances, equilibrium relationships, estimation of physical properties (specific heat and latent vaporization heat of mixtures), determination of ideal stages number (using McCabe-Thiele method), calculation of reboiler and condenser thermal loads and areas, steam and cooling water requirement, distillation time and some economical aspects. The mathematical model was implemented into an electronic spreadsheet. The predicted values were compared to experimental results from eight tests carried out in a laboratory sieve tray column (four at constant reflux and four at constant distillate composition), and a good consistency was found. Then several case studies concerning each distillation mode as well as the comparative performance were accomplished through mathematical simulations. Evaluation of the basic process variables such as reflux rate, initial load, distillate composition and flow rate was done. Rating of an existing plant and design of a new installation were considered in this process analysis. For an existing installation, lower distillation time, as well as higher distillation capacity and monthly profit were observed when distilling with constant distillate composition, keeping constant the flow rate of vapor from the column top. This process is also the more advantageous one when designing a new plant since smaller heat exchanger areas are required. However, to process a quantity in a same time, in a design of a new plant, as number of separation stages increases, monthly profit becomes almost the same among the studied distillation modes.

Keywords: Distillation. Batch Distillation. Constant reflux. Variable reflux. Laboratory distillation. Mathematical simulation.

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Resumo das equações do modelo matemático para ambos os modos de operação. ....	60
Tabela 2 - Relação das variáveis calculadas pelo modelo matemático para ambos os modos de operação. ....	62
Tabela 3 - Parâmetros da equação de Antoine para o metanol e etanol. ....	68
Tabela 4 - Constantes da equação de van Laar para a mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg e a 760 mmHg. ....	69
Tabela 5 - Dados dos ensaios de destilação operando com refluxo constante.....	83
Tabela 6 - Dados dos ensaios de destilação operando com composição do destilado constante.....	84
Tabela 7 - Porcentagem de perda de massa nos ensaios de destilação em batelada. ....	84
Tabela 8 - Comparação dos tempos parciais e totais de destilação em batelada operando com refluxo constante obtidos experimentalmente, e previstos pelo modelo. ....	90
Tabela 9 - Comparação das quantidades de destilado parciais e totais de destilação em batelada operando com refluxo constante obtidas experimentalmente, e previstas pelo modelo. ....	90
Tabela 10 - Comparação da composição do destilado para destilação com refluxo constante obtida experimentalmente, e prevista pelo modelo.....	91
Tabela 11 - Comparação da quantidade de mistura restante no refeedor na destilação com refluxo constante obtida experimentalmente, e prevista pelo modelo. ....	91
Tabela 12 - Comparação dos tempos parciais e totais de destilação em batelada operando com composição do destilado constante obtidos experimentalmente, e previstos pelo modelo. ....	92
Tabela 13 - Comparação das quantidades de destilado parciais e totais de destilação com composição do destilado constante obtidas experimentalmente, e previstas pelo modelo.....	93
Tabela 14 - Comparação da quantidade de mistura restante no refeedor nos ensaios de destilação com composição do destilado constante obtida experimentalmente, e prevista pelo modelo.....	94

Tabela 15 - Número de estágios ideais obtidos nos ensaios de destilação em batelada operando com refluxo constante e com composição do destilado constante.....	94
Tabela 16 - Determinação do número de estágios ideais existentes na instalação de destilação em batelada, operando com refluxo total. ....	95
Tabela 17- Índices de custos operacionais adotados.....	99
Tabela 18 – Valores dos fatores para trocadores de calor construídos de aço inoxidável. ....	101
Tabela 19 – Fatores para cálculo do custo do casco da coluna.....	101
Tabela 20 – Fatores utilizados no cálculo do custo do casco da coluna de destilação. .....	102
Tabela 21 – Custo base do prato em função de seu diâmetro.....	103
Tabela 22 – Fatores utilizados no cálculo do custo dos pratos da coluna de destilação. ....	104
Tabela 23 – Relação dos estudos de casos.....	108
Tabela 24 – Resultados de simulação dos estudos RC-I, RV-I, e C-V.....	112
Tabela 25 – Resultados de simulação do estudo RC-I. ....	113
Tabela 26 – Resultados de simulação dos estudos RC-II, RV-II, e C-I. ....	115
Tabela 27 – Resultados de simulação do estudo RC-III. ....	117
Tabela 28 – Resultados de simulação do estudo RV-I.....	120
Tabela 29 – Resultados de simulação dos estudos RV-III e C-III. ....	122
Tabela 30 – Variação da taxa de refluxo e respectivo tempo de destilação para casos RV-DC. ....	123
Tabela 31 – Resultados de simulação do estudo C-II.....	128
Tabela 32 – Resultados de simulação dos estudos RC-IV, RV-IV e C-IV.....	131
Tabela 33 – Resultados de simulação dos estudos C-VI, RC-V e RV-V.....	136
Tabela 34 – Resultados de simulação dos estudos C-VII, RV-VI, RV-VII e C-VIII..	138



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Equilíbrio de fases de sete misturas binárias.....	26
Figura 2 - Diagrama esquemático de funcionamento dos recipientes baseados no método direto. ....	28
Figura 3 - Esquema do aparato para determinação de dados de equilíbrio.....	29
Figura 4 - Representação esquemática de um estágio de equilíbrio de uma coluna de destilação.....	30
Figura 5 - Prato perfurado de uma coluna de destilação.....	31
Figura 6 - Configurações de coluna de destilação em batelada.....	35
Figura 7 - Escoamento de vapor através do prato. ....	36
Figura 8 – Tipos de pratos de coluna de destilação. ....	37
Figura 9 – Diagrama de McCabe-Thiele. ....	39
Figura 10 - Esquema típico de destilação em batelada.....	40
Figura 11 - Destilação em batelada com refluxo constante.....	43
Figura 12 - Destilação em batelada com composição de destilado constante. ....	44
Figura 13 - Esquema de uma instalação de destilação em batelada. ....	47
Figura 14 - Curva de calibração da mistura metanol-etanol.....	65
Figura 15 - Dados de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 760 mmHg. ....	66
Figura 16 - Aparato para obtenção de dados de equilíbrio. ....	67
Figura 17 - Curva de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg e a 760 mmHg.....	70
Figura 18 - Curva de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg experimental e considerando comportamento ideal.....	71
Figura 19 - Temperaturas de bolha e orvalho versus composição de metanol para a mistura binária metanol-etanol a 703,5 mmHg.....	72
Figura 20 - Temperaturas de bolha e orvalho versus composição de metanol para a mistura binária metanol-etanol a 703,5 mmHg e a 760 mmHg. ....	73
Figura 21 – Diagrama entalpia-composição para misturas metanol-etanol a 703,5 mmHg.....	75
Figura 22 - Fotografia da instalação de destilação em batelada. ....	76
Figura 23 - Indicador de vazão de destilado.....	78
Figura 24 - Detalhes da instalação.....	79

Figura 25 - Variação da composição de destilado ao longo de um ensaio com refluxo constante.....	86
Figura 26 - Variação da composição no refeedor ao longo de um ensaio com refluxo constante.....	87
Figura 27 – Acompanhamento da composição de destilado ao longo de um ensaio com refluxo variável. ....	87
Figura 28 - Variação da composição no refeedor ao longo de um ensaio com refluxo variável. ....	88
Figura 29 - Fotografia da seringa posicionada no prato de topo. ....	95
Figura 30 - Relação entre a taxa de refluxo e a composição da mistura restante no refeedor para o estudo RC-III.....	116
Figura 31 - Relação entre a composição final da mistura no refeedor e o tempo de destilação, número de lotes produzidos, produção mensal e lucro mensal para o estudo RC-III. ....	118
Figura 32 - Taxa de refluxo versus tempo de destilação para o estudo RV-III.....	123
Figura 33 - Consumo de energia versus composição do destilado para o estudo C-I. ....	125
Figura 34 - Custo por batelada versus composição do destilado para o estudo C-I. ....	126
Figura 35 – Avaliação econômica em função do número de bateladas mensais para o estudo C-IV. ....	134
Figura 36 - Exemplo de variação da receita ou custo em função do número de bateladas.....	134
Figura 37 - Avaliação econômica em função da taxa de refluxo inicial para o estudo RV-V.....	141
Figura 38 - Número de estágios ideais versus taxa de refluxo para o estudo C-VIII. ....	144
Figura 39 - Consumo de energia versus número de estágios ideais para o estudo C-VIII.....	145
Figura 40 - Lucro e custo versus número de estágios ideais para o estudo C-VIII. ....	146

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A$	parâmetro da equação de Antoine
$A_{12}$	constante da equação de van Laar
$A_{21}$	constante da equação de van Laar
$A_c$	área de troca térmica do condensador, $m^2$
$A_r$	área de troca térmica do refeedor, $m^2$
$B$	parâmetro da equação de Antoine
$B_1$	fator que depende da configuração do vaso (equação (5.3-3))
$B_2$	fator que depende da configuração do vaso (equação (5.3-3))
$c$	número de componentes na mistura
$C$	parâmetro da equação de Antoine
$Cp_a$	calor específico do componente mais volátil, J/mol K
$Cp_{\text{água}}$	calor específico da água, J/mol K
$Cp_b$	calor específico do componente menos volátil, J/mol K
$Cp_r$	calor específico da mistura de refluxo, J/mol K
$d$	diâmetro interno da coluna de destilação, m
$D$	quantidade de destilado, kmol
$\dot{D}$	vazão de destilado, kmol/s
$E$	eficiência global da coluna
$E^{MV}$	eficiência de prato de Murphree na fase vapor
$F$	número de fases na mistura
$F_d$	fator que depende do tipo de trocador de calor (equação (5.3-1))
$F_i$	fator que depende do tipo de prato (equação (5.3-8))
$F_m$	fator que depende do material de construção do casco/tubo (equação (5.3-1))
$F_M$	fator que depende do material de construção do casco da coluna (equação (5.3-3))
$F_{mc}$	fator que depende do material de construção do prato (equação (5.3-8))
$F_p$	fator que depende da pressão (equação (5.3-1))
$F_s$	fator que depende do espaçamento entre os pratos (equação (5.3-8))
$GL$	número de graus de liberdade
$H_{col}$	altura da coluna de destilação, m
$H_G$	entalpia específica da mistura de vapor saturado, J/mol
$H_L$	entalpia específica da mistura líquida, J/mol

$K$	constante de equilíbrio líquido-vapor
$K_1$	fator que depende do diâmetro da coluna (equação (5.3-4))
$K_2$	fator que depende do diâmetro da coluna (equação (5.3-4))
$K_3$	fator que depende do diâmetro da coluna (equação (5.3-4))
$\dot{L}$	vazão de líquido no interior da coluna, kmol/s
$\dot{L}_0$	vazão do refluxo da coluna, kmol/s
$m_a$	demanda de água de resfriamento, mol
$\dot{m}_a$	vazão de água de resfriamento, mol/s
$\bar{m}_a$	vazão média da água de resfriamento, mol/s
$m_{amostras}$	quantidade de amostras retiradas, mol
$m_p$	quantidade de líquido retido em cada prato, mol
$N$	número de pratos ideais na coluna de destilação
$p_i$	pressão parcial do componente i, mmHg
$P_i$	pressão de vapor do componente i, mmHg
$P$	pressão atmosférica, mmHg
$P_t$	pressão total, mmHg
$P_s$	pressão de vapor da água, kPa
$\dot{Q}_{c,ced}$	taxa de calor cedido pelo vapor de topo no condensador, J/s
$\dot{Q}_{c,rec}$	taxa de calor recebido pelo fluido de resfriamento no condensador, J/s
$\dot{Q}_{c,troc}$	taxa de troca térmica entre o vapor de topo e a água de resfriamento no condensador, J/s
$\dot{Q}_c$	carga térmica no condensador, J/s
$\dot{Q}_{r,ced}$	taxa de calor cedido pelo vapor de aquecimento no refeedor, J/s
$\dot{Q}_{r,rec}$	taxa de calor recebido pela mistura no refeedor, J/s
$\dot{Q}_{r,troc}$	taxa de troca térmica entre o líquido do refeedor e o vapor de aquecimento no refeedor, J/s
$\dot{Q}_r$	carga térmica no refeedor, J/s
$R$	constante da lei dos gases ideais
$R_e$	taxa de refluxo externo
$R_i$	taxa de refluxo interno
$S$	consumo do vapor de aquecimento, mol
$\dot{S}$	vazão do vapor de aquecimento, mol/s
$\bar{S}$	vazão média do vapor de aquecimento, mol/s

$t$	temperatura, °C
$T_{br}$	temperatura de bolha do refluxo, K
$T_{bref}$	temperatura de bolha da mistura no refeedor, K
$T_{ea}$	temperatura da água de resfriamento na entrada do condensador, K
$t_G$	temperatura de orvalho da mistura, K
$t_L$	temperatura de bolha da mistura, K
$T_m$	temperatura média definida na equação (3.5-3)
$T_{ma}$	temperatura média da água de resfriamento definida na equação (3.5-8)
$T_{m, ref}$	temperatura média no refeedor definida na equação (3.5-12)
$T^*m$	temperatura média definida na equação (3.5-5)
$t_0$	temperatura de referência, K
$T_{or}$	temperatura de orvalho do refluxo, K
$T_{oref}$	temperatura de orvalho da mistura no refeedor, K
$T_{O_T}$	temperatura do vapor na saída da coluna, K
$T_r$	temperatura do refluxo, K
$T_s$	temperatura de vapor de aquecimento no refeedor, K
$T_{sa}$	temperatura da água de resfriamento na saída do condensador, K
$T_{x_w}$	temperatura do líquido no refeedor, K
$U_c$	coeficiente global de troca térmica no condensador, W/m <sup>2</sup> K
$U_r$	coeficiente global de troca térmica no refeedor, W/m <sup>2</sup> K
$\dot{V}$	vazão de vapor pela coluna, kmol/s
$V_1$	quantidade de vapor de topo, kmol
$\dot{V}_1$	vazão de vapor que deixa a coluna, kmol/s
$V_s$	velocidade superficial do vapor pela coluna, m/s
$x$	fração molar de um componente na fase líquida
$x_D$	fração molar do componente mais volátil no destilado
$\bar{x}_D$	fração molar média do destilado acumulado
$x_p$	fração molar do metanol no prato
$x_w$	fração molar do componente mais volátil no líquido do refeedor
$x_{wi}$	fração molar do componente mais volátil na carga inicial do refeedor
$x_{wf}$	fração molar do componente mais volátil no líquido remanescente do refeedor
$x_{wT}$	fração molar do metanol no refeedor obtida a partir da temperatura de bolha
$W$	quantidade de líquido remanescente, kmol

$W_i$	quantidade da mistura carregada no refeedor, kmol
$W_f$	quantidade da mistura restante no refeedor, kmol
$y$	fração molar de um componente na fase vapor
$y_{i,n}^*$	fração molar do componente $i$ na fase vapor em equilíbrio com o líquido de saída do prato $n$

#### Letras Gregas

$\alpha$	volatilidade relativa
$\gamma$	coeficiente de atividade
$\Delta H_s$	calor de solução, J/mol
$\theta$	tempo, s
$\theta_i$	instante inicial, s
$\theta_f$	instante final, s
$\theta_n$	instante genérico, s
$\lambda$	variação de entalpia específica, J/mol
$\lambda_{steam}$	variação de entalpia específica do vapor de aquecimento, J/mol
$\lambda_v$	variação de entalpia específica na vaporização da mistura no refeedor, J/mol
$\lambda_{v_1}$	variação de entalpia específica na condensação do vapor de topo, J/mol
$\dot{\phi}$	vazão volumétrica do vapor pela coluna, m <sup>3</sup> /s

#### Subscritos

$a$	componente mais volátil da mistura binária
$b$	componente menos volátil da mistura binária
$i$	componente na mistura
$n$	número do prato (variável de 1 a N)
$W$	mistura no refeedor

# SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO .....	18
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	19
2.1 EQUILÍBRIO DE FASES.....	19
2.1.1 Regra de fases de Gibbs.....	19
2.1.2 Equilíbrio de fases líquido-vapor .....	19
2.1.3 Misturas ideais .....	21
2.1.4 Misturas não ideais .....	23
2.1.5 Equilíbrio de fases líquido-vapor de sistema binário .....	24
2.1.6 Obtenção de dados de equilíbrio experimentais .....	27
2.2 ESTÁGIO DE EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR.....	30
2.3 ESTÁGIOS REAIS - EFICIÊNCIA .....	31
2.4 INSTALAÇÕES DE DESTILAÇÃO .....	32
2.4.1 Refervedor .....	32
2.4.2 Condensador.....	33
2.4.3 Colunas de destilação .....	34
2.4.4 Pratos em colunas de destilação .....	36
2.5 DIAGRAMA DE MCCABE-THIELE.....	37
2.6 DESTILAÇÃO EM BATELADA .....	39
2.6.1 Vantagens e desvantagens da destilação em batelada .....	41
2.6.2 Modos operacionais de destilação em batelada .....	42
2.6.2.1 Operação com taxa de refluxo constante .....	42
2.6.2.2 Operação com composição do destilado constante .....	43
2.6.3 Vantagens e desvantagens dos modos operacionais de destilação em batelada .....	44
2.6.4 Outros estudos de destilação em batelada .....	46
3 MODELO MATEMÁTICO .....	47
3.1 HIPÓTESES .....	48
3.2 OPERAÇÃO SOB REFLUXO CONSTANTE .....	49
3.3 OPERAÇÃO COM COMPOSIÇÃO DO DESTILADO CONSTANTE.....	53
3.4 TEMPO DE DESTILAÇÃO .....	55
3.5 MODELAGEM DE TROCA TÉRMICA NO REFERVEDOR E NO CONDENSADOR .....	55

3.6 RESUMO DAS EQUAÇÕES .....	60
4 PARTE EXPERIMENTAL.....	64
4.1 SISTEMA ESTUDADO .....	64
4.2 DADOS DE EQUILÍBRIO.....	65
4.3 MATERIAIS E MÉTODOS .....	75
4.3.1 Descrição da unidade experimental .....	75
4.3.2 Materiais e equipamentos .....	77
4.3.3 Procedimento .....	80
4.3.3.1 Carga e aquecimento .....	80
4.3.3.2 Determinação da vazão de vapor do topo .....	80
4.3.3.3 Ensaio propriamente dito.....	81
4.4 RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	82
4.4.1 Análise preliminar dos resultados .....	82
4.4.2 Validação experimental do modelo matemático .....	89
4.5 CONSIDERAÇÕES SOBRE A PARTE EXPERIMENTAL E VALIDAÇÃO DO MODELO .....	96
5 ESTIMATIVA DOS CUSTOS DE OPERAÇÃO E EQUIPAMENTOS .....	98
5.1 CONSIDERAÇÃO SOBRE A PARTE ECONÔMICA.....	98
5.2 ESTIMATIVA DOS CUSTOS OPERACIONAIS.....	99
5.3 ESTIMATIVA DOS CUSTOS DOS EQUIPAMENTOS .....	100
6 ANÁLISE DOS RESULTADOS DE SIMULAÇÃO .....	106
6.1 ESTUDO DE INSTALAÇÕES EXISTENTES.....	110
6.1.1 Operação com refluxo constante .....	111
6.1.1.1 Estudo de caso RC-I.....	111
6.1.1.2 Estudo de caso RC-II.....	114
6.1.1.3 Estudo de caso RC-III.....	115
6.1.2 Operação com composição de destilado constante .....	119
6.1.2.1 Estudo de caso RV-I.....	119
6.1.2.2 Estudo de caso RV-II.....	120
6.1.2.3 Estudo de caso RV-III.....	121
6.1.3 Comparação.....	124
6.1.3.1 Estudo de caso C-I.....	124
6.1.3.2 Estudo de caso C-II.....	126
6.1.3.3 Estudo de caso C-III .....	129



6.2 ESTUDO DE INSTALAÇÃO EXISTENTE COM SUBSTITUIÇÃO DOS TROCADORES DE CALOR .....	130
6.2.1 Operação com refluxo constante .....	130
6.2.1.1 Estudo de caso RC-IV .....	130
6.2.2 Operação com composição de destilado constante .....	132
6.2.2.1 Estudo de caso RV-IV .....	132
6.2.3 Comparação.....	132
6.2.3.1 Estudo de caso C-IV.....	132
6.2.3.2 Estudo de caso C-V.....	135
6.2.3.3 Estudo de caso C-VI.....	135
6.2.3.4 Estudo de caso C-VII.....	137
6.3 ESTUDO DE PROJETOS DE INSTALAÇÕES.....	139
6.3.1 Operação com refluxo constante .....	139
6.3.1.1 Estudo de caso RC-V .....	139
6.3.2 Operação com composição de destilado constante .....	140
6.3.2.1 Estudo de caso RV-V .....	140
6.3.2.2 Estudo de caso RV-VI .....	142
6.3.2.3 Estudo de caso RV-VII .....	142
6.3.3 Comparação.....	143
6.3.3.1 Estudo de caso C-VIII.....	143
7 CONCLUSÕES .....	147
8 SUGESTÕES PARA ESTUDOS FUTUROS.....	149
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	151

## 1 INTRODUÇÃO

A destilação em batelada é uma operação unitária vastamente utilizada nas indústrias de química fina, farmacêuticas, bioquímicas, e alimentícias para processar pequenas quantidades de materiais com alto valor agregado (ZAMPROGNA; BAROLO; SEBORG, 2004). E também é importante na separação de matérias com alto teor de sólidos, ou misturas com componentes de viscosidade elevada e baixa volatilidade. Destaca-se também que misturas multicomponentes podem ser separadas em uma única coluna de destilação em batelada enquanto que várias colunas interligadas seriam necessárias para separar a mesma mistura continuamente (FILETI; CRUZ; PEREIRA, 2000). Além disso, o sucesso da destilação em batelada é devido à flexibilidade operacional, ou seja, quando misturas completamente diferentes devem ser processadas freqüentemente, a versatilidade da coluna de destilação em batelada é extremamente útil. Estas características são cruciais para responder rapidamente às demandas do mercado caracterizadas por produtos de pouco tempo de vida e especificações rígidas. A destilação em batelada pode ser operada com taxa de refluxo constante, ou com taxa de refluxo variável, mas composição do destilado constante (ZAMPROGNA; BAROLO; SEBORG, 2004).

Este trabalho tem por objetivo comparar estes dois métodos de destilação em batelada. Será desenvolvido um modelo matemático cujos resultados previstos serão comparados com os obtidos experimentalmente numa instalação de bancada de laboratório. Em seguida, através de simulações matemáticas, será estudada a influência das principais variáveis de processo, por exemplo, taxa de refluxo, composição inicial na carga e do destilado, e quantidade inicial de carga, no processo de destilação (tempo necessário para a destilação, área necessária de troca térmica do condensador e do refeedor). Serão analisados também alguns aspectos econômicos sobre o processo (custos de equipamentos e operacionais, capacidade de produção, lucro mensal). Por fim, será feita a comparação entre os modos de destilação estudados.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 EQUILÍBRIO DE FASES

#### 2.1.1 Regra de fases de Gibbs

J. Willard Gibbs descreveu o equilíbrio matematicamente em termos de número de componentes, número de fases coexistentes, e as condições necessárias para estabelecer o equilíbrio. Em sua forma mais simples, a regra de fases é expressa como:

$$GL = c + 2 - F \quad (2.1-1)$$

onde  $GL$  é o número de graus de liberdade ou grau de variância do sistema em termos de variáveis intensivas independentes, como concentração, temperatura, e pressão, que devem ser fixadas de modo a definir o sistema no equilíbrio;  $c$  é o número de componentes independentes; e  $F$  é o número de fases, no qual a fase é uma parte fisicamente distinta do sistema, tendo a mesma composição em toda a sua extensão e que é separada de outras partes do sistema por uma interface.

Desse modo, para sistemas em equilíbrio, composto de uma fase vapor e uma fase líquida, fixando-se duas variáveis intensivas, define-se um sistema binário em equilíbrio; três variáveis, um sistema ternário em equilíbrio, e  $n$  variáveis, para um sistema de  $n$  componentes em equilíbrio (WINKLE, 1967).

#### 2.1.2 Equilíbrio de fases líquido-vapor

Existem vários métodos disponíveis para formular a relação equilíbrio líquido-vapor (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

O valor da constante de equilíbrio líquido-vapor para o componente  $i$ ,  $K_i$ , é comumente utilizado para representar dados de equilíbrio de fases, especialmente para misturas multicomponentes. E é definido por (STICHLMAIR; FAIR, 1998):

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (2.1-2)$$

sendo  $y_i$  e  $x_i$ , respectivamente, as frações molares do componente  $i$  na fase vapor e na fase líquida em equilíbrio.

O valor de  $K_i$  representa uma medida da tendência de o componente  $i$  vaporizar. Se o valor de  $K_i$  é alto, o componente tende a concentrar-se no vapor; e se baixo, tende a concentrar-se no líquido. Se o valor de  $K_i$  é igual a um, o componente dividir-se-á igualmente entre o vapor e o líquido (KISTER, 1992).

O valor de  $K_i$  é função da temperatura, pressão, e composição. No equilíbrio de uma mistura binária, sempre que duas destas três variáveis forem fixadas, a terceira também o será. Então, o valor de  $K_i$  pode então ser considerado como função da pressão e composição, ou temperatura e composição, ou ainda, temperatura e pressão (KISTER, 1992).

Em geral, o componente de menor ponto de ebulição evaporará preferencialmente que o de maior ponto de ebulição, e a mistura de vapor em equilíbrio com a mistura líquida em ebulição terá uma maior porcentagem do componente de menor ponto de ebulição que a no líquido. O grau de enriquecimento do componente de menor ponto de ebulição no vapor depende da volatilidade relativa,  $\alpha$ , que é um índice direto da tendência de uma mistura líquida separar por uma destilação ou retificação. Na mistura binária, ela é dada por:

$$\alpha_{ab} = \frac{\frac{y_a}{x_a}}{\frac{y_b}{x_b}} = \frac{y_a x_b}{y_b x_a} \quad (2.1-3)$$

onde, em geral, adota-se  $y_a$  igual à fração molar do componente de menor ponto de ebulição, e  $y_b$  é igual à fração molar do componente de maior ponto de ebulição, na

mistura de vapor em equilíbrio de fase com o líquido que tem fração molar  $x_a$  para o componente mais volátil e  $x_b$ , do menos volátil.

Uma alta volatilidade relativa indica fácil separação por destilação. Em geral,  $\alpha_{ab}$  varia com a pressão de vapor e com a temperatura de ebulição. Conseqüentemente, variando-se a pressão, o equilíbrio de uma mistura multicomponente será afetado.

Para misturas binárias, sabe-se que:

$$x_b = 1 - x_a \quad (2.1-4)$$

$$y_b = 1 - y_a \quad (2.1-5)$$

e a equação (2.1-3) será igual a:

$$y_a = \frac{\alpha_{ab} x_a}{1 + x_a (\alpha_{ab} - 1)} \quad (2.1-6)$$

Para misturas ideais tanto na fase de vapor como na líquida (ver a seguir), o valor da volatilidade relativa de uma mistura binária pode ser admitido constante, e então, a fração molar no vapor,  $y_a$ , correspondente a várias composições no líquido, pode ser facilmente determinada a partir da equação (2.1-6) (BILLET, 1979).

### 2.1.3 Misturas ideais

Os conceitos de gás ideal, líquido ideal, misturas de gases ideais, e mistura de líquidos ideais são bases para muitas relações quantitativas, descrevendo o equilíbrio. Os principais interesses na área de destilação são a lei de Dalton de pressões parciais e a lei de Raoult.

Um sistema ideal é aquele onde o vapor obedece à lei dos gases ideais e o

líquido obedece à lei de Raoult, a qual estabelece que a pressão parcial do componente na solução líquida ( $p_i$ ) é igual ao produto da sua fração molar ( $x_i$ ) e da pressão de vapor do componente puro ( $P_i$ ) (KISTER, 1992).

$$p_i = x_i P_i \quad (2.1-7)$$

A lei de Dalton afirma que a pressão total da mistura de gases ( $P_t$ ) é igual à soma das pressões parciais dos componentes na mistura ( $p_i$ ). Então:

$$P_t = \sum_1^n p_i = p_1 + p_2 + p_3 + \dots + p_n \quad (2.1-8)$$

Dalton também postulou que a pressão parcial do gás ideal na mistura gasosa é proporcional ao número relativo de moléculas daquele gás na mistura (ou a sua fração molar,  $y_i$ ). Então:

$$p_i = y_i P_t \quad (2.1-9)$$

A combinação das leis de Dalton e Raoult resulta na expressão que descreve misturas de vapores e líquidos ideais no equilíbrio.

$$P_t = \sum_1^n p_i = \sum_1^n y_i P_t = \sum_1^n x_i P_i \quad (2.1-10)$$

e para um dado componente, fica:

$$y_i P_t = x_i P_i \quad (2.1-11)$$

A pressão de vapor  $P_i$  do componente é uma propriedade única do componente e é função direta da temperatura. Portanto, a pressão de vapor aumenta com o aumento da temperatura, e a substância que possui a maior pressão de vapor a uma dada temperatura que outro componente é chamada de mais volátil (WINKLE, 1967).

Pressão de vapor e temperatura são comumente relacionadas pela equação de Antoine:

$$\log P_i = A - \frac{B}{C + t} \quad (2.1-12)$$

onde A, B, C são constantes para um composto particular sob uma estreita faixa de temperatura (WINKLE, 1967).

No equilíbrio líquido-vapor de sistemas binários, os critérios experimentais para o comportamento de misturas ideais são (WINKLE, 1967):

- Não há mudança no volume quando os componentes são misturados no estado líquido ou vapor, ou seja, os volumes são aditivos;
- O valor do calor de mistura é zero;
- Não há mudança na agregação molecular com respeito aos componentes misturados e não misturados.

#### 2.1.4 Misturas não ideais

Apesar de alguns sistemas binários se aproximarem do comportamento ideal em ambas as fases (líquida e vapor), a maioria dos sistemas encontrada na prática não é ideal em uma ou ambas as fases.

Em relação à fase vapor, como a maioria das destilações é conduzida a baixas pressões (inferiores a 5 atm), é razoável considerar o comportamento ideal na fase vapor e os coeficientes de fugacidade (fatores de correção da não idealidade na fase gasosa) são, portanto, aproximadamente unitários (WINKLE, 1967).

A extensão do desvio da idealidade de componentes em misturas líquidas é medida pelo coeficiente de atividade  $\gamma$ , que é freqüentemente chamado de fator de correção da lei de Raoult. Aplicando-se este fator de correção à lei de Raoult, resulta (WINKLE, 1967):

$$p_i = \gamma_i x_i P_i \quad (2.1-13)$$

Vale observar que os coeficientes de fugacidade e atividade dependem da temperatura, pressão e composição e a determinação dessas relações é essencial

em estudos de destilação (WINKLE, 1967).

Para o coeficiente de atividade, podem ser utilizados diversos modelos, tais como os de Margules, van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC.

Neste trabalho, será utilizado o modelo termodinâmico de van Laar para o ajuste dos dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor (ver o item 4.2).

A equação de van Laar é vastamente utilizada devido à sua simplicidade, flexibilidade e habilidade de adequar-se a vários sistemas. É derivada da equação de estado de van der Waals. Mas os parâmetros, apresentados como  $A_{12}$  e  $A_{21}$  nas equações (2.1-14) e (2.1-15) são, em geral, obtidos experimentalmente (SEADER; HENLEY, 1998).

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + A_{12}x_2) + x_2 \left( \frac{A_{12}}{x_1 + A_{12}x_2} - \frac{A_{21}}{x_2 + A_{21}x_1} \right) \quad (2.1-14)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + A_{21}x_1) + x_1 \left( \frac{A_{12}}{x_1 + A_{12}x_2} - \frac{A_{21}}{x_2 + A_{21}x_1} \right) \quad (2.1-15)$$

Estes parâmetros são, em princípio, constantes somente para um par específico de componentes, a uma dada temperatura. Na prática, eles são freqüentemente calculados de dados isobáricos, cobrindo uma certa faixa de temperatura.

A equação de van Laar pode ajustar, de modo geral, curvas de coeficiente de atividade versus composição, correspondentes tanto a sistemas com desvios positivos como negativos da lei de Raoult (ver 2.1.5, a seguir) (SEADER; HENLEY, 1998).

### 2.1.5 Equilíbrio de fases líquido-vapor de sistema binário

No processo de destilação, a separação de uma mistura de componentes para obtenção de um ou mais produtos desejados baseia-se, conforme mencionado anteriormente, na diferença de volatilidades destes componentes. A máxima



separação ocorre, num dado estágio, quando as fases líquida e de vapor de saída estão em equilíbrio.

Portanto, para os cálculos de destilação, é necessário obter dados de composição de equilíbrio líquido-vapor razoavelmente precisos. Embora essas informações possam ser obtidas por uma variedade de métodos, dados experimentais reais devem ser utilizados, se possível (WINKLE, 1967). O seu modo de determinação está descrito no item 2.1.6.

Dados experimentais são freqüentemente apresentados na forma de tabelas de fração molar do componente mais volátil no vapor,  $y$ , e fração molar deste componente no líquido,  $x$ , numa faixa de temperatura a uma pressão fixada, ou numa faixa de pressão para uma temperatura fixa (PERRY; GREEN, 1997).

Para uma mistura binária, conforme a regra de fases de Gibbs (ver equação (2.1-1)), o grau de liberdade é igual a 2 e, com isso, por exemplo, pressão e temperatura fixam a composição no líquido e no vapor, na condição de equilíbrio (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

Na figura 1, estão mostrados exemplos desses diagramas para diversas misturas binárias, constituídas dos componentes  $a$  (mais volátil) e  $b$  (menos volátil). Os exemplos destas sete misturas podem ser agrupados em quatro blocos, dispostos na horizontal. Na primeira “linha” da figura 1, apresentam-se gráficos de pressões parciais versus a fração molar da substância  $a$  no líquido, à temperatura constante; as linhas pontilhadas nesses gráficos representam o comportamento ideal. O segundo conjunto de gráficos mostra as curvas de ponto de bolha e orvalho versus as composições do líquido e do vapor respectivamente, à pressão constante (0,1 MPa). O terceiro conjunto apresenta a concentração de  $a$  na fase vapor versus sua concentração na fase líquida, à pressão constante (0,1 MPa). A quarta maneira apresenta os coeficientes de atividade  $\gamma_a$  e  $\gamma_b$  em função da composição (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

Diferenças significativas no comportamento destes sistemas binários em equilíbrio são devidas às variações de forças de interação entre as duas espécies moleculares  $a$  e  $b$ . Há misturas em que as moléculas  $a$  e  $b$  repelem uma à outra, aumentando a pressão parcial do líquido na fase. Em outras misturas binárias, as moléculas  $a$  e  $b$  atraem uma à outra e tendem a formarem complexos; isto leva a um decréscimo da pressão parcial e um aumento do ponto de ebulição (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

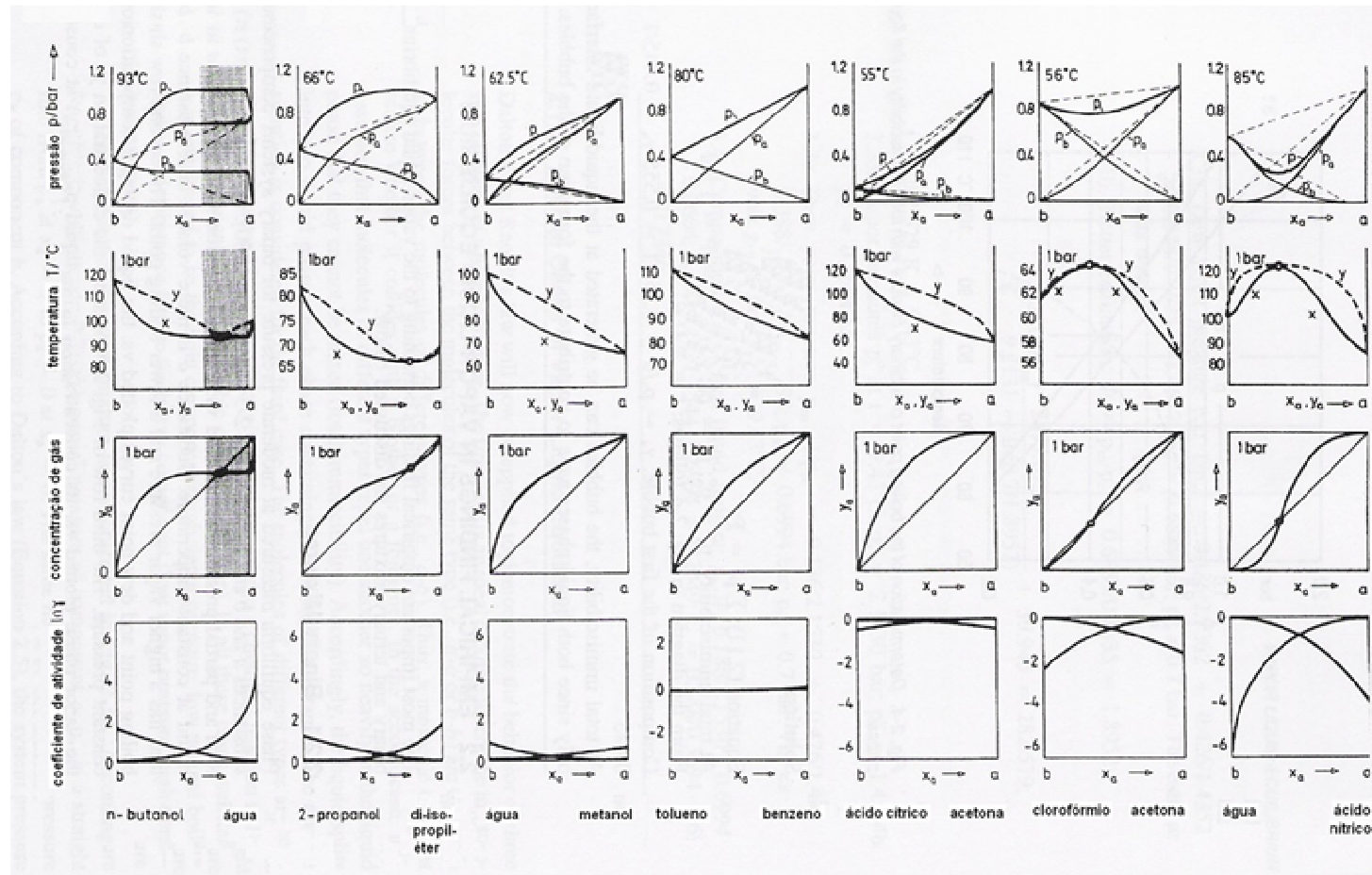


Figura 1 - Equilíbrio de fases de sete misturas binárias.

Fonte: STICHLMAIR; FAIR, 1998.

Há também misturas binárias em que as forças de interação entre as moléculas *a* e *b* são as mesmas entre moléculas *a* e *a* ou *b* e *b*, respectivamente. A molécula não diferencia se está colidindo com uma mesma molécula ou de outra substância. Estas misturas são conhecidas como misturas ideais (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

As condições em que as composições do líquido e do vapor são as mesmas são muito importantes. Estas misturas, conhecidas como misturas azeotrópicas, possuem um ponto de ebulição mínimo ou máximo. Em um azeótropo de ponto de ebulição mínimo, as espécies moleculares repelem-se uma à outra, enquanto que, num azeótropo de ponto de ebulição máximo, elas se atraem. Se o azeótropo ocorre na faixa de composição em que os dois líquidos são imiscíveis, ocorre separação de fases e um azeótropo heterogêneo é formado. Um azeótropo heterogêneo é sempre de ponto de ebulição mínimo (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

Além da composição, a pressão tem grande influência no equilíbrio de misturas líquido-vapor. A pressões elevadas, decresce significativamente a diferença entre as concentrações de vapor e líquido para um dado componente na condição de equilíbrio (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

### **2.1.6 Obtenção de dados de equilíbrio experimentais**

Dados de equilíbrio de fases, conforme mencionado, são essenciais para o estudo de processos de destilação. Muitas publicações de equilíbrio líquido-vapor estão disponíveis. No entanto, a maioria delas apresenta dados de equilíbrio somente para uma certa faixa de temperatura e pressão (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

Os dados de equilíbrio podem ser obtidos experimentalmente a partir da determinação direta das composições de equilíbrio entre as fases líquida e vapor, ou também, partindo apenas das propriedades de uma das fases, calcular a composição de equilíbrio da outra (LJUNGLIN, 1962 apud SALVAGNINI, 1993), o chamado método indireto (SALVAGNINI, 1993).

A obtenção de uma curva de equilíbrio pode ser conduzida tanto à pressão constante quanto à temperatura constante; o primeiro modo possui aplicações

práticas mais extensas, pois os equipamentos de separação por destilação operam em condições mais próximas à pressão constante (SALVAGNINI, 1993).

A determinação experimental direta das composições de equilíbrio entre as fases líquida e vapor exige a amostragem do líquido e do vapor em equilíbrio dentro de um recipiente, e a posterior determinação analítica das composições dessas duas fases (HÁLA, 1989 apud SALVAGNINI, 1993).

O emprego do método direto com circulação é apropriado tanto a pressões um pouco acima da atmosférica quanto abaixo (HÁLA, 1989 apud SALVAGNINI, 1993). Os equipamentos baseados neste método utilizam o princípio comum mostrado esquematicamente na figura 2 (SALVAGNINI, 1993).

O vapor gerado da ebulição do líquido contido no recipiente A se desloca para o recipiente B através do duto C, condensando num condensador existente neste duto; deste modo, o recipiente B, inicialmente vazio, recebe somente condensado. Parte deste condensado retorna ao recipiente A. Entre os recipientes A e B, existe algum dispositivo que impede o escoamento do líquido de A para B (SALVAGNINI, 1993).

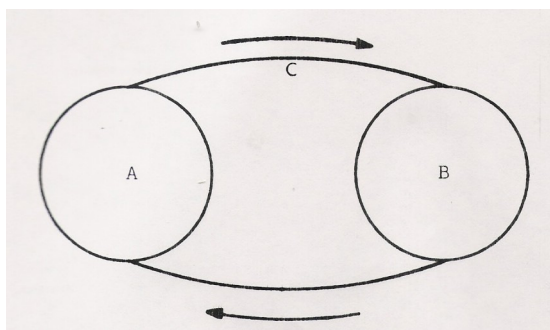


Figura 2 - Diagrama esquemático de funcionamento dos recipientes baseados no método direto.  
Fonte: SALVAGNINI, 1993.

Este processo continua até que se atinja o equilíbrio termodinâmico, e então se medem as composições nos dois recipientes (HÁLA, 1989 apud SALVAGNINI, 1993).

Um esquema do aparato para determinação de dados de equilíbrio, com base no método descrito anteriormente, está mostrado na figura 3. O vapor que deixa o reservatório é condensado e coletado num tubo U, de onde o condensado passa, via transbordamento, para o tubo de evaporação. A amostragem da mistura de vapor é

feita a partir do seu condensado, coletado na válvula B. O restante do líquido é então evaporado completamente, antes de chegar ao reservatório; o borbulhamento deste vapor agita o conteúdo no reservatório, melhorando a homogeneização da mistura (KRELL, 1963).

Observa-se, entretanto, que sempre houve uma tendência de simplificar as medidas, por exemplo, partindo apenas das propriedades de uma das fases, calcular a composição de equilíbrio da outra (LJUNGLIN, 1962 apud SALVAGNINI, 1993).

No método indireto, mais simples, medem-se a fração molar apenas no líquido, a respectiva temperatura de bolha e a pressão atmosférica. Com isso, obtém-se indiretamente a fração molar no vapor em equilíbrio (os detalhes estão apresentados no item 4.2).

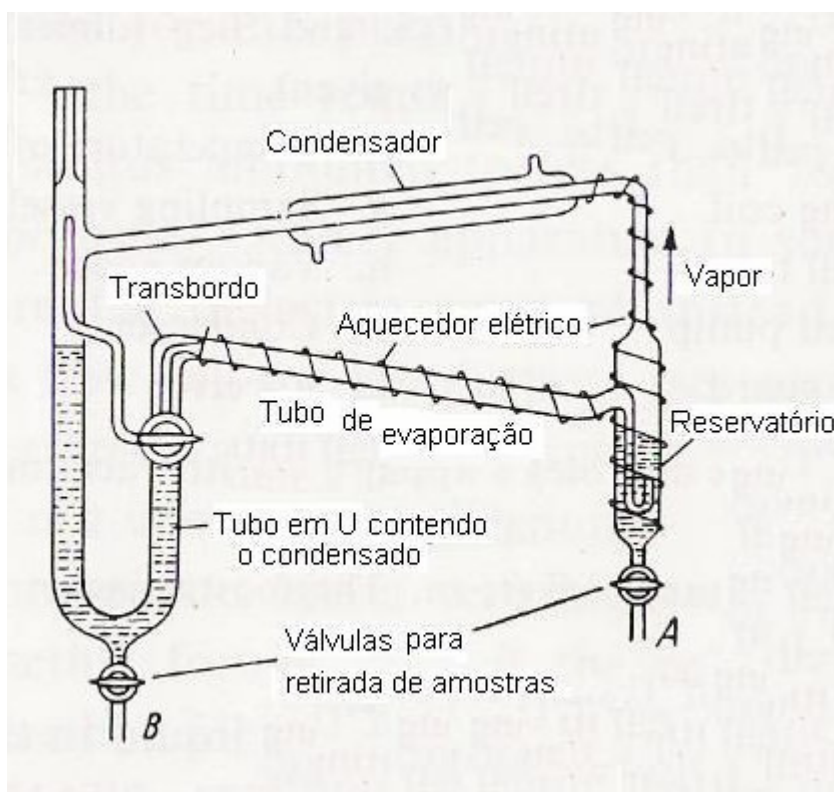


Figura 3 - Esquema do aparato para determinação de dados de equilíbrio.

Fonte: KRELL, 1963.

## 2.2 ESTÁGIO DE EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR

O estágio de equilíbrio ou estágio ideal de separação de uma mistura líquido-vapor é aquele em que, após o contato do vapor e do líquido introduzidos, as duas fases de saída estão em equilíbrio (WINKLE, 1967). Uma representação esquemática do estágio de equilíbrio é apresentada na figura 4.

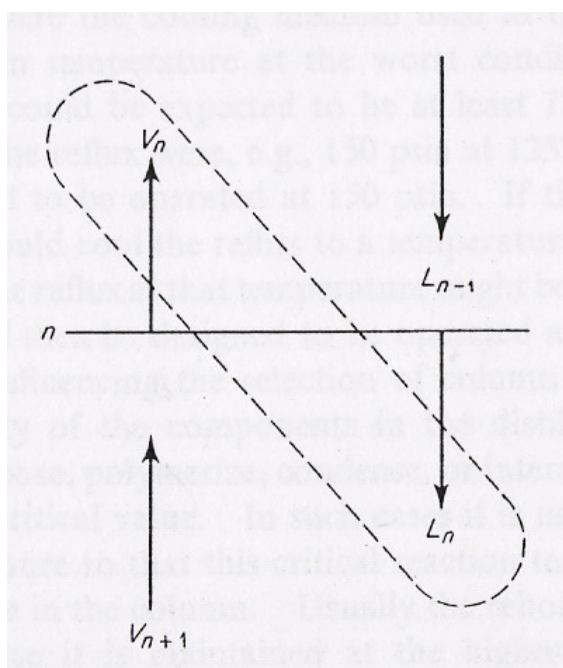


Figura 4 - Representação esquemática de um estágio de equilíbrio de uma coluna de destilação.

Fonte: WINKLE, 1967.

O vapor  $V_{n+1}$ , proveniente do prato  $n + 1$ , ascende até o prato  $n$  e o líquido  $L_{n-1}$  desce do prato  $n - 1$  para o prato  $n$ . Se estão intimamente em contato, o vapor  $V_n$  e o líquido  $L_n$  aproximam-se de um estado de equilíbrio. Se o equilíbrio for atingido, a eficiência de contato será de 100% e isto poderá ser classificado como estágio de equilíbrio ou estágio ideal. No entanto, a proximidade de se atingir o equilíbrio é uma função da taxa de transferência de calor e massa; na prática, atingir-se o estado de equilíbrio é praticamente impossível. Para isto, seriam necessários uma área infinita, ou um tempo infinito de contato entre as fases, ou ambos. Além do mais, quando se aproxima do estado de equilíbrio, a taxa de transferência decresce por causa da redução da força motriz, diferenças de

temperatura e de concentração aproximam-se de zero. Apesar de o equilíbrio num dispositivo de contato real não ser possível, ele é utilizado em métodos convencionais de cálculo de número de estágios no projeto de colunas fracionadas (WINKLE, 1967), seguido de correções através de valores de eficiência de destilação.

Há diversos dispositivos na indústria para promover fisicamente o contato descrito. Como, neste trabalho, será usada uma coluna de pratos perfurados, suas condições são ilustradas na figura 5. Bolhas de vapor sobem pelo líquido, formando, em cima do prato, a chamada “massa aerada”. A separação dos componentes ocorre quando calor e massa são trocados na interface líquido-vapor. As frações molares do componente mais volátil no líquido e no vapor são representadas por  $x$  e  $y$ , e as vazões molares de líquido e vapor são dadas por  $L$  e  $V$ , respectivamente (KJELSTRUP; KOEIJER, 2003).

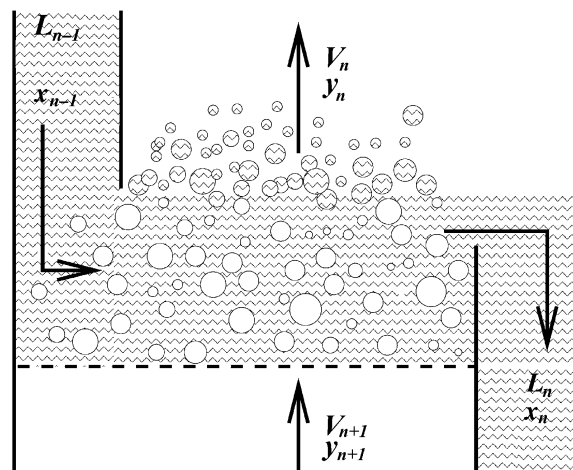


Figura 5 - Prato perfurado de uma coluna de destilação.

Fonte: KJELSTRUP; KOEIJER, 2003.

### 2.3 ESTÁGIOS REAIS - EFICIÊNCIA

O desempenho no processo de destilação pode ser caracterizado através de diversas definições de eficiência. As duas mais comuns e importantes são: a eficiência global de coluna ou de Lewis (1922) e a eficiência de prato de Murphree

(1925) na fase vapor.

A primeira é dada pela relação entre o número de pratos teóricos e o número de pratos reais, necessários para uma dada separação.

A eficiência de prato relaciona o comportamento em um prato real com o de um prato ideal, à mesma taxa de refluxo. A eficiência de prato de Murphree na fase vapor para o componente  $i$  no prato  $n$  é dada por (MURPHREE, 1925):

$$E_{i,n}^{MV} = \frac{y_{i,n} - y_{i,n+1}}{y_{i,n}^* - y_{i,n+1}} \quad (2.2-1)$$

onde  $y_{i,n}$  e  $y_{i,n+1}$  são as frações molares do componente  $i$  na fase vapor na saída e na entrada do prato  $n$ , respectivamente, e  $y_{i,n}^*$  é a fração molar do componente  $i$  na fase vapor em equilíbrio com o líquido de saída do prato  $n$ .

## 2.4 INSTALAÇÕES DE DESTILAÇÃO

Os principais componentes de uma instalação de destilação são o refeedor, o condensador, a coluna de destilação e a sua parte interna (recheio ou pratos).

### 2.4.1 Refeedor

O refeedor é um equipamento de troca de calor, tem a função de vaporizar as substâncias, gerando vapor para a separação. Sua escolha deve levar em conta os seguintes objetivos (ROSE, 1985):

- Manter o custo do equipamento baixo, propiciando bons coeficientes de troca de calor;
- Manter a superfície de troca de calor mais limpa possível, prevenindo depósitos de produtos degradados;



- Apresentar baixo tempo de residência e temperaturas das paredes, no caso de operação com produtos termo-degradáveis;
- Contribuir para a separação requerida (funcionar como um estágio de separação).

### 2.4.2 Condensador

O objetivo do condensador é condensar o vapor que deixa o topo da coluna para prover refluxo necessário à separação e o destilado propriamente dito. Se o produto do topo requerido é líquido, o condensador condensa o fluxo total de vapor (ROSE, 1985).

Um condensador total liquefaz completamente o vapor do topo; uma porção do condensado retorna como refluxo, e o restante é removido como produto destilado. Entretanto, condensadores parciais são freqüentemente utilizados em operações comerciais, especialmente quando a condensação do produto do topo seria dificultosa ou quando este será alimentado num processo a jusante no estado de vapor. Neste caso, pode ser produzido somente o condensado suficiente para o refluxo, e o produto é retirado como vapor. Em outros casos, podem ser retiradas misturas de vapor e líquido (ROBINSON; GILLILAND, 1950).

A condensação parcial tem a vantagem de que o produto não condensado é enriquecido no componente mais volátil, pois o condensador parcial desempenha o papel de um estágio de separação. Quando a condensação é total, não se obtém esse fracionamento complementar. A dificuldade com a condensação parcial é que a taxa de refluxo é controlada, regulando-se a vazão do líquido de resfriamento pelo condensador (ROSE, 1985).

Os condensadores podem ser acoplados acima da coluna, ou próximos ao nível do solo. Para colunas grandes, condensadores resfriados por água tornam-se peças pesadas de equipamento (ROSE, 1985).

Se o condensador é acoplado acima da coluna, é possível conduzir o refluxo de volta à coluna por gravidade. Um condensador posicionado ao nível do solo

necessita de uma bomba para retornar o refluxo ao topo da coluna (ROSE, 1985); por outro lado, o custo na parte estrutural de um equipamento nesse caso é, em geral, menor.

O líquido de resfriamento do condensador pode ser a água, ou um outro líquido, ou ar. A principal consideração feita para a sua escolha é o custo global envolvido. Por exemplo, quando resfriado com ar, requer-se alto investimento, mas baixo custo de operação (ROSE, 1985).

### 2.4.3 Colunas de destilação

A coluna de retificação, figura 6a, é uma coluna convencional de destilação em batelada (KIM; DIWEKAR, 2000). A alimentação é realizada no recipiente inferior da coluna e os produtos são retirados do topo (WARTER; DEMICOLI; STICHLMAIR, 2004). A destilação com coluna de retificação possui a mais longa história e é vastamente utilizada na indústria química (NODA et al., 2000) e nas indústrias farmacêuticas e de especialidades químicas (KIM; DIWEKAR, 2000). No entanto, há outros tipos de colunas, as quais são apresentadas na figura 6.

A figura 6b representa uma coluna “invertida”, freqüentemente chamada de coluna de esgotamento, onde a mistura de alimentação é carregada em um pote no topo (KIM; DIWEKAR, 2000). Os constituintes de maior ponto de ebulição são separados primeiro do sistema. Logo, o líquido no vaso de topo fica mais rico nos constituintes de menor ponto de ebulição (STICHLMAIR; FAIR, 1998). Na figura 6c, tem-se uma coluna com vaso intermediário, que possui as secções de esgotamento e retificação acopladas. Esta configuração é mais flexível para a destilação em batelada (KIM; DIWEKAR, 2000), pois é possível obter simultaneamente frações leves e pesadas, do topo e do fundo da coluna, respectivamente. Ao final da destilação, no vaso intermediário, sobra uma fração de componentes de volatilidade intermediária (WARTER; DEMICOLI; STICHLMAIR, 2004). Skogestad et al. (1997) apresentaram uma nova configuração chamada coluna de múltiplos vasos, como apresentada na figura 6d, que é uma generalização da coluna com vaso intermediário com refluxo total nessa secção da coluna, e pode-se obter produtos

praticamente puros ao final de uma operação para sistemas multicomponentes (KIM; DIWEKAR, 2000).

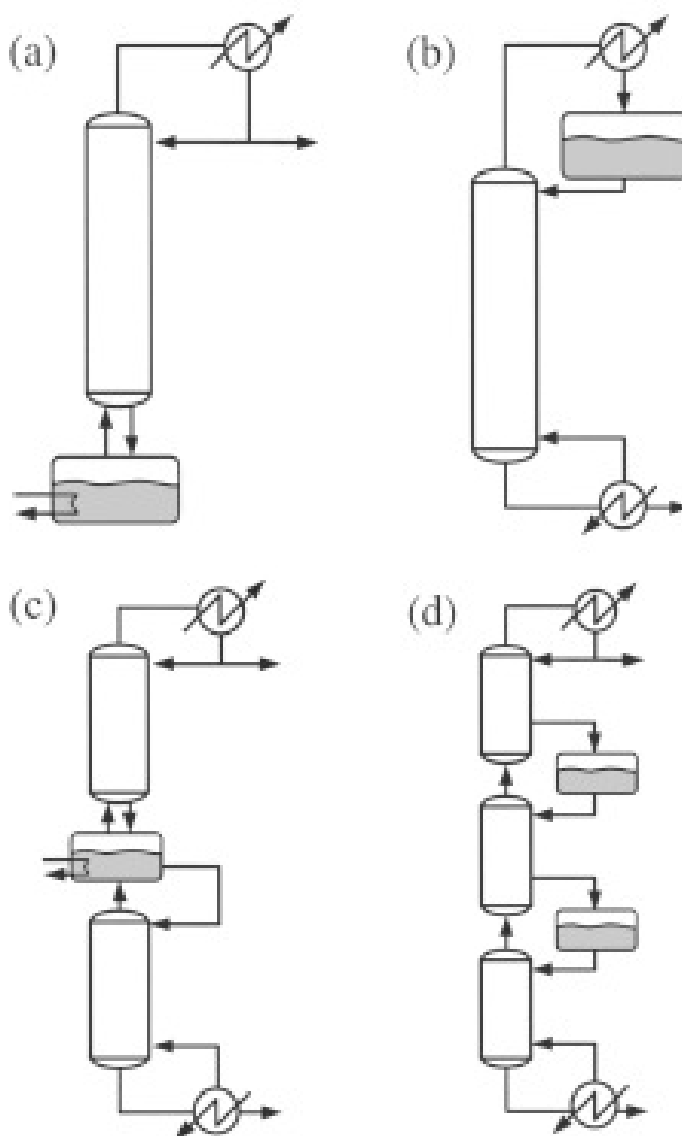


Figura 6 - Configurações de coluna de destilação em batelada.

(a) Retificação, (b) esgotamento, (c) coluna com vaso intermediário, (d) coluna de múltiplo vasos.

Fonte: (KIM; DIWEKAR, 2000).

O projeto de uma coluna de destilação em batelada é muito mais complexo, comparado a uma coluna de destilação contínua já que se considera estado não-permanente. A complexidade do problema aumenta com o número de componentes em sistemas multicomponentes. A coluna de destilação em batelada pode ser modelada, levando-se em conta dois modos de operação básicos: com refluxo variável e composição do produto constante; ou refluxo constante e composição do produto variável (DIWEKAR; MADHAVAN, 1991).

#### 2.4.4 Pratos em colunas de destilação

Existem diversos tipos de pratos para as colunas de destilação, alguns tipos são apresentados a seguir.

O prato com borbulhador, mostrado nas figuras 7a e 8a, é um prato de superfície perfurada com “riser” ao redor dos furos (por onde chega o vapor do prato inferior), e campânulas na forma de copos invertidos sobre os “risers”. As campânulas são geralmente equipadas com aberturas (“slots”) ou furos pelos quais o vapor sai. A altura do líquido e da massa areada que permanecem no prato é pelo menos igual à altura do vertedouro ou do “riser”, dando ao prato com borbulhador a capacidade de operar a baixas taxas de vapor e líquido (KISTER, 1992).

O prato perfurado é um prato de superfície perfurada, conforme apresentado nas figuras 7b e 8b. O vapor passa pelos furos, é disperso através do escoamento do líquido pelo prato, gerando uma massa aerada (WINKLE, 1967). A velocidade do vapor evita que o líquido escoe pelos furos. A baixas velocidades de vapor, o líquido pode atravessar os furos, fenômeno conhecido como “choro” (“weeping”), reduzindo assim a eficiência na destilação. Os pratos perfurados são simples e fáceis de serem fabricados, e, portanto são relativamente baratos (KISTER, 1992).

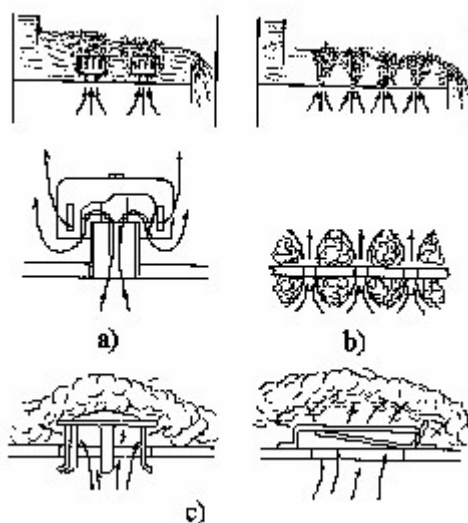


Figura 7 - Escoamento de vapor através do prato.  
 (a) Prato com borbulhador, (b) Prato perfurado, (c) Prato valvulado.  
 Fonte: WINKLE, 1967.

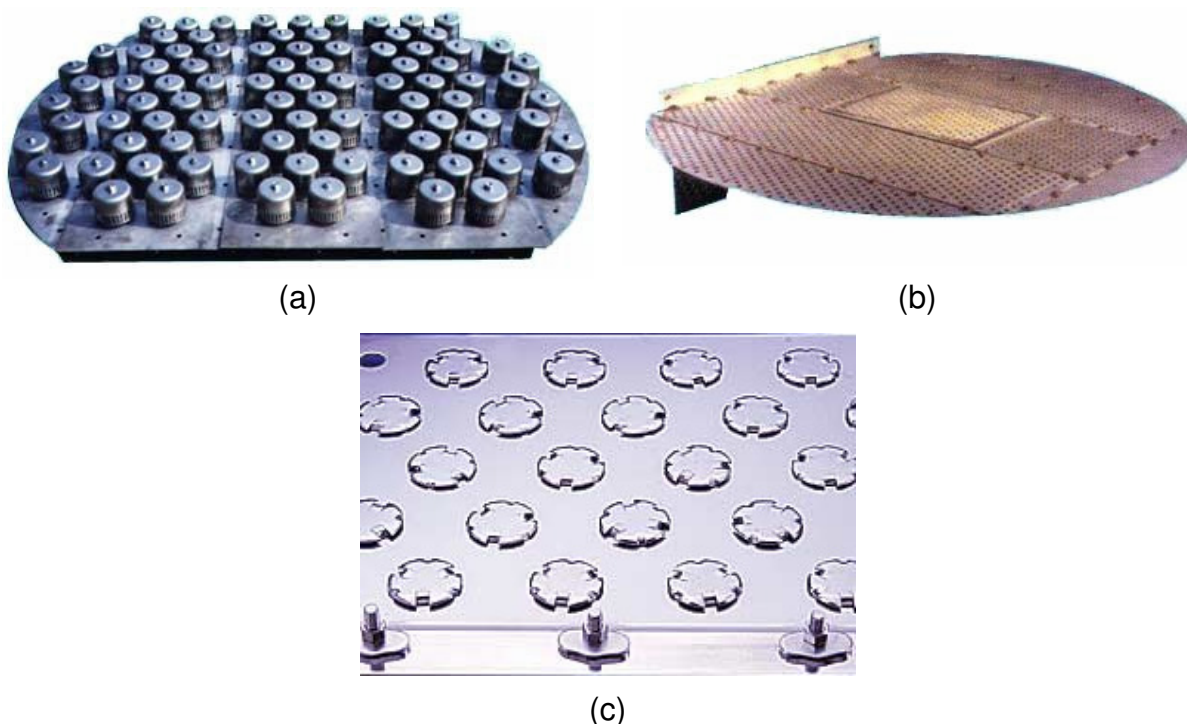


Figura 8 – Tipos de pratos de coluna de destilação.  
 (a) Prato com borbulhador\*, (b) Prato perfurado\*, (c) Prato valvulado\*\*.  
 Fonte: \*(NEWSMART..., 2008), \*\*(JAEGER...,2008).

O prato valvulado (ver as figuras 7c e 8c) contém uma válvula móvel sobre cada um dos furos, para regular mudanças nas condições de escoamento. O disco da válvula levanta conforme a vazão de vapor aumenta; quando a vazão diminui, a abertura do disco reduz-se ou pode assentar de modo intermitente sobre os furos. Isto evita que o líquido passe pelos furos e dá ao prato valvulado a sua principal vantagem, ou seja, boa operação a baixas vazões, e, portanto uma alta flexibilidade de operação (KISTER, 1992).

## 2.5 DIAGRAMA DE MCCABE-THIELE

O método de McCabe-Thiele é baseado na representação das equações do balanço de massa do componente mais volátil numa mistura binária, como linhas de operação no diagrama x-y. A inclinação da linha, numa dada seção da coluna, é igual à relação entre as vazões molares do líquido (L) e do vapor (V) nesta seção. As linhas de operação são retas (e a necessidade do balanço de energia é eliminada),

pois se admitem vazões molares constantes. A vazão de líquido é considerada constante de prato em prato, em cada seção da coluna. Se a vazão de líquido é constante, a vazão de vapor também o deve ser, devido à conservação de massa em cada prato. A hipótese mais importante para a aplicação do método de McCabe-Thiele é a de igual calor molar de vaporização para os dois componentes. Outras hipóteses são de operação adiabática e sem calor de mistura ou efeitos de calor sensível (PERRY; GREEN, 1997).

A curva de equilíbrio é o locus de todos os pontos de equilíbrio. Para uma dada composição do líquido, representada pela fração molar do componente mais volátil  $x_n$ , tem-se uma composição de vapor em equilíbrio,  $y_n$ , e vice-versa. Um estágio de equilíbrio  $n$  é caracterizado pelo ponto  $(x_n, y_n)$  na curva de equilíbrio onde  $x_n$  e  $y_n$  são as composições do líquido e vapor que deixam esse estágio. A linha diagonal de  $45^\circ$  é o locus de todos os pontos onde as frações molares do componente mais volátil são iguais entre si, ou seja:

$$y_{n+1} = x_n \quad (2.5-1)$$

A determinação do número de estágios de equilíbrio, utilizando o diagrama, através do método de McCabe-Thiele, é feita da maneira descrita a seguir.

Inicia-se com a composição do destilado  $x_D = y_D$  (no caso de um condensador total no topo), traça-se uma linha horizontal para interceptar a curva de equilíbrio no ponto  $(x_1, y_1)$ . Traça-se uma linha vertical para interceptar a linha de operação em  $(x_1, y_2)$  e continuam-se estas operações até que a composição do líquido seja igual a ou menor do que a fração molar do componente mais volátil na mistura remanescente no refeedor ( $x_W$ ). O número de interseções com a curva de equilíbrio representa o número de estágios de equilíbrio necessários para a separação proposta (WINKLE, 1967). O diagrama de McCabe-Thiele é apresentado na figura 9.

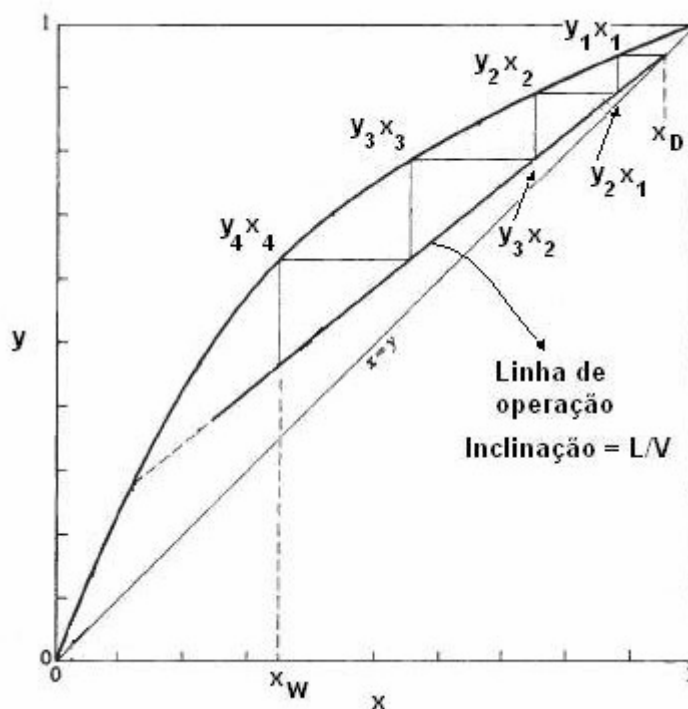


Figura 9 – Diagrama de McCabe-Thiele.

## 2.6 DESTILAÇÃO EM BATELADA

Destilação em batelada é o processo de separação de uma mistura líquida em produtos de diferentes volatilidades, e é vastamente utilizada em laboratório, em pequenas unidades de produções e que podem ser aplicáveis a várias misturas (PERRY; GREEN, 1997).

A destilação em batelada é uma das operações unitárias mais comuns nas indústrias farmacêuticas e de especialidades químicas devido à pequena escala de produção de produtos de elevado valor agregado e freqüentes mudanças no objetivo da separação (SKOURAS; SKOGESTAD; KIVA, 2005); nestas indústrias, a destilação em batelada é uma tecnologia comum na recuperação de solventes e ajuda a lidar com os crescentes incentivos econômicos e regulamentações ambientais (RODRIGUEZ-DONIS et al., 2001). Conseqüentemente, estabelecer novos e eficientes métodos para a destilação batelada destas misturas é um assunto importante tanto para a academia quanto para a indústria (SKOURAS;

SKOGESTAD; KIVA, 2005).

A destilação em batelada pode ser dividida em três etapas primárias: vaporização, separação, e condensação.

A etapa de vaporização consiste de um recipiente para a carga do líquido a ser destilado e algum aparato para transferência de calor à mistura de líquido que será fracionada. Vapor d'água saturado é geralmente utilizado como fluido de aquecimento na transferência de calor, mas óleo quente ou outros meios também podem ser utilizados.

O dispositivo de separação é representado pela coluna e seus internos, onde ocorrem transferências de massa e calor entre as fases de vapor e líquido.

Os componentes essenciais da parte de condensação são o condensador propriamente dito e acessórios como potes intermediários, bomba (se necessária), sistema para dividir o condensado em produto destilado e refluxo, válvulas de controle etc. (BLOCK; 1967).

Um esquema de uma instalação típica de destilação em batelada é apresentado na figura 10.

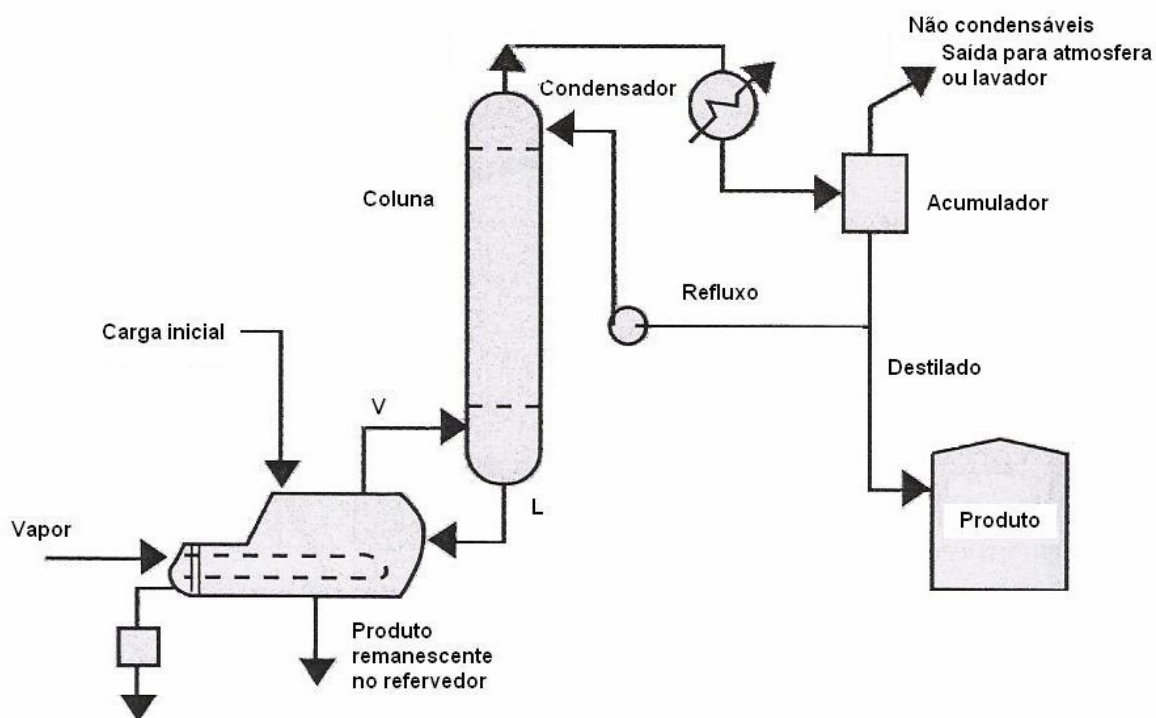


Figura 10 - Esquema típico de destilação em batelada.

Fonte: KUMANA, 1990.



### 2.6.1 Vantagens e desvantagens da destilação em batelada

Destilação em batelada possui a vantagem de possibilitar que misturas multicomponentes sejam separadas em seus constituintes mais puros em uma única coluna (STICHLMAIR; FAIR, 1998). Devido à sua flexibilidade e baixo custo operacional, a destilação em batelada é importante nas indústrias farmacêuticas e de química fina, principalmente se a capacidade de operação requerida é pequena. No entanto, este processo possui algumas desvantagens, como demandas elevadas de energia e maior tempo de processo. Para substâncias termo-sensíveis, o elevado tempo de residência pode levar à sua degradação (WARTER; DEMICOLI; STICHLMAIR, 2004).

Em comparação com a destilação contínua, a destilação em batelada oferece opções atrativas de flexibilidade e economia pela redução de equipamentos, porque o mesmo equipamento pode ser utilizado para diferentes produtos, dependendo da demanda do mercado (MONROY-LOPERENA; ALVAREZ-RAMIREZ, 2003). De fato, em alguns casos, é desejável dispor-se de uma instalação única para múltiplos propósitos, para ser utilizada com produtos diferentes (COATES; PRESSBURG, 1961).

Oppenheimer e Sørensen (1997) compararam o consumo de energia na destilação em batelada e contínua. Neste estudo, notou-se que o consumo de energia é maior na planta de destilação batelada para todos os casos avaliados, e que a planta de destilação em batelada com composição de destilado constante consumiu menos energia que a com refluxo constante para os três casos estudados. O consumo de energia na planta de destilação em batelada é aproximadamente duas vezes maior que na contínua (OPPENHEIMER; SØRENSEN, 1997).

Geralmente, a destilação em batelada é menos eficiente energeticamente que a destilação contínua (SKOGESTAD et al., 1997; ZAVALA-LORÍA et al., 2006).

Conforme mencionado anteriormente, a modelagem de uma coluna de destilação em batelada é muito mais complexa em comparação com a coluna de destilação contínua, já que, na primeira, é necessário considerar o regime não permanente. A complexidade do problema aumenta com o número de componentes em sistemas multicomponentes (DIWEKAR; MADHAVAN, 1991).

## 2.6.2 Modos operacionais de destilação em batelada

Na destilação em batelada, há dois modos básicos de operação: a taxa de refluxo é mantida constante, ou a composição do destilado em relação a um dado componente é mantida constante (COATES; PRESSBURG, 1961). Para cada um dos modos, depara-se com o problema de se determinarem as condições apropriadas para utilizar uma coluna existente com um número fixo de pratos, e tamanhos fixos do refeedor e condensador (avaliação ou “rating”), ou desenvolver uma nova instalação em que seja necessário selecionar e dimensionar o número de pratos e as áreas de troca térmica requeridas ao processo (projeto ou “design”).

Os aspectos básicos envolvidos nesses estudos referem-se a um compromisso econômico entre os custos de instalação e de operação. Ao se optar por uma coluna com um número maior de estágios de separação (mais caro, evidentemente), a taxa de refluxo necessário pode ser menor, o que faz diminuir os custos operacionais para aquecimento e resfriamento, além da economia nos custos do condensador, do refeedor e da própria coluna, pois o seu diâmetro poderá ser reduzido em face das vazões internas menores. Analogamente, uma coluna com um número menor de pratos, desde que seja superior ao mínimo requerido nas condições de refluxo total, apresenta a vantagem de ser mais barata, mas acarreta o aumento dos outros custos citados.

Em geral, a chamada taxa de refluxo externo “ótimo” (mais econômico) é em torno de 1,15 a 1,25 vezes a taxa de refluxo mínimo (sob refluxo total) (GEANKOPLIS, 2003).

### 2.6.2.1 Operação com taxa de refluxo constante

No modo de operação com refluxo constante, a taxa de refluxo é mantida constante durante a destilação, o que resulta na mudança contínua da composição do destilado (BAROLO; BERTO, 1998).

Como apresentadas na figura 11, as linhas de operação são todas paralelas

porque a taxa de refluxo é constante (STICHLMAIR; FAIR, 1998).

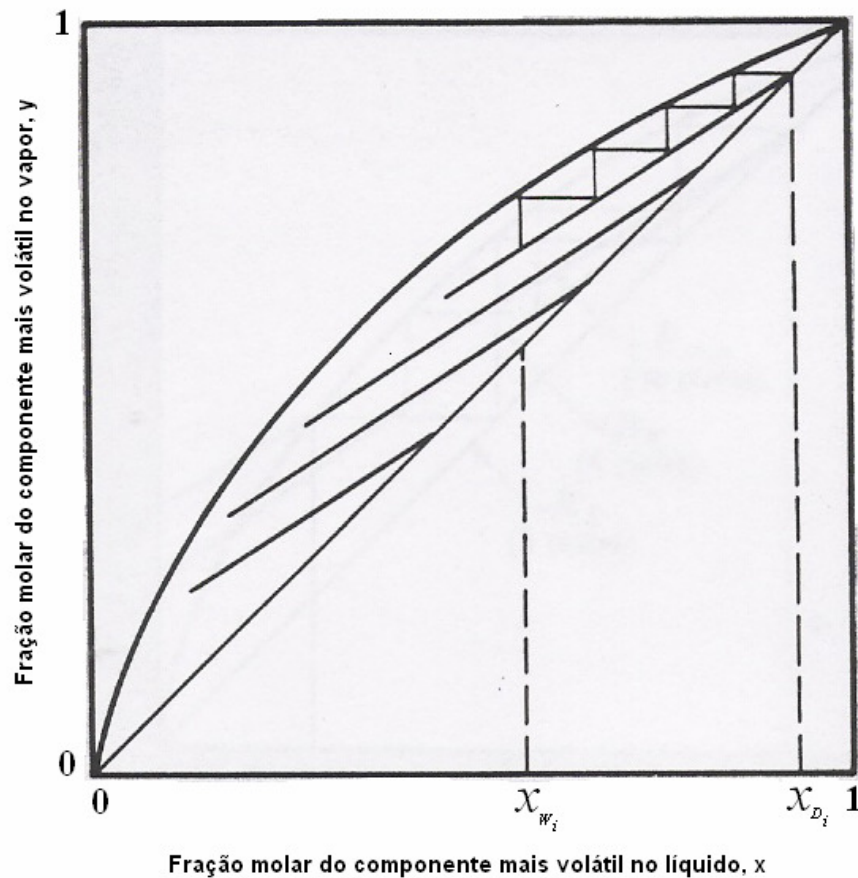


Figura 11 - Destilação em batelada com refluxo constante.  
Fonte: ELLERBE, 1973.

### 2.6.2.2 Operação com composição do destilado constante

A operação de uma coluna em batelada sob condição de refluxo variável requer o contínuo ajuste do refluxo para manter a pureza especificada do destilado. Inicialmente, o líquido do recipiente é rico no componente mais volátil, e uma taxa de refluxo relativamente baixa produzirá o destilado com a pureza desejada. No decorrer da destilação, a taxa de refluxo deve ser continuamente aumentada até um valor máximo viável ou adequado ao processo (ELLERBE, 1973). Neste momento, interrompe-se a destilação e o produto remanescente no refeedor é reprocessado posteriormente. Na figura 12, estão apresentadas as linhas de operação com o

aumento crescente de suas inclinações, devido ao aumento da taxa de refluxo. Vale destacar que todas elas partem de um mesmo ponto ( $x_D, x_D$ ), pois a composição do destilado, conforme mencionado, é mantida constante ao longo do processo.

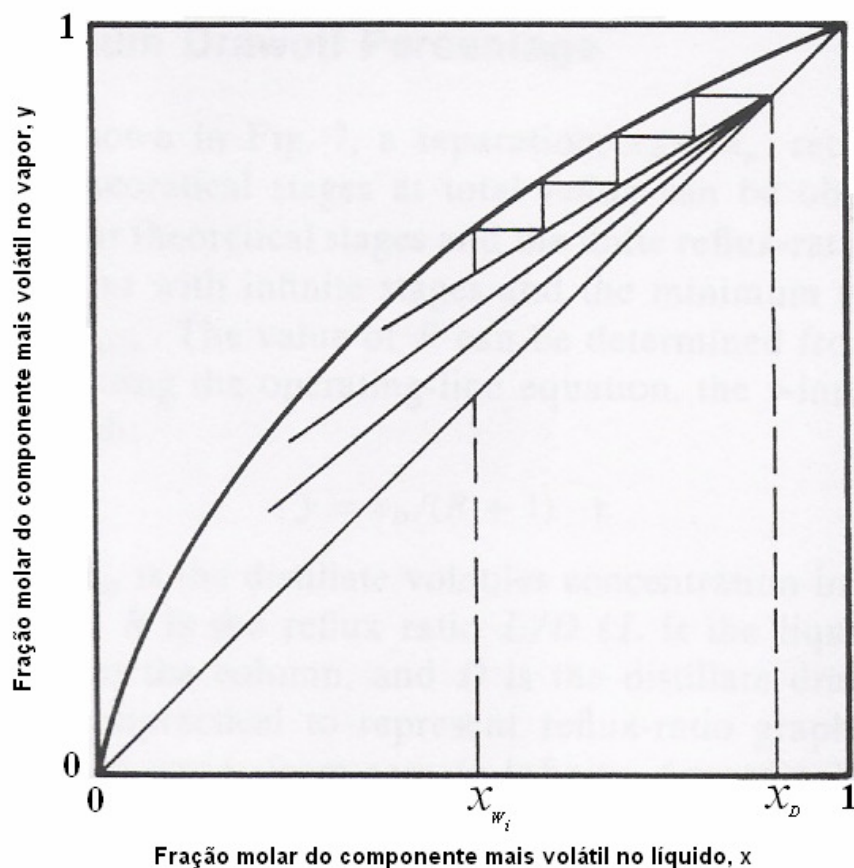


Figura 12 - Destilação em batelada com composição de destilado constante.

Fonte: ELLERBE, 1973.

### 2.6.3 Vantagens e desvantagens dos modos operacionais de destilação em batelada

A destilação em batelada com taxa de refluxo constante apresenta, como vantagem, a fácil operação, mas, a dificuldade em seu monitoramento está em escolher o ponto de término mais adequado. Este sistema de destilação deve ter um ponto preciso de interrupção (“corte”) para evitar que um excesso do componente de maior ponto de ebulição seja levado ao pote de destilado e faça com que a

especificação deste produto não seja atendida (BLOCK, 1961). E a menos que se tenha um acompanhamento apropriado, a composição média do produto só é conhecida no final da destilação. Caso se obtenha um produto fora de especificação, este teria que ser misturado a outro ou redestilado, podendo incorrer em uma perda econômica significativa (BAROLO; BERTO, 1998).

A operação com a composição do destilado constante é mais difícil, pois para manter a composição desejada durante toda a destilação, necessita-se do contínuo ajuste (aumento) da taxa de refluxo. Por outro lado, a composição do produto pode ser determinada com exatidão durante a produção (BAROLO; BERTO, 1998).

Os dois modos de operações requerem diferentes cargas térmicas para se obter a mesma quantidade e composição do produto. Geralmente, menos energia é requerida para a operação com concentração de destilado constante e esta diferença é especialmente maior para obtenção de destilados de alta pureza (STICHLMAIR; FAIR, 1998). Esse fato se deve, provavelmente, à necessidade de uma maior taxa de refluxo nestes casos, o que acarreta numa diferença maior de energia requerida. No entanto, no estudo de um caso para uma mistura binária benzeno-tolueno, segundo Kister (1992), foi observado que a destilação em batelada com refluxo variável precisou de uma maior demanda térmica do que a operação com refluxo constante.

Segundo Coward (1967), o tempo de destilação operando com taxa de refluxo constante pode ser tanto maior quanto menor que o tempo operando com composição do destilado constante. Essa relação depende de vários outros aspectos do processo, e não apenas do modo de destilação em si.

O controle automático da taxa de refluxo, em destilação com refluxo variável, deve ser vinculado a alguma variável que corresponda, de modo sensível e imediato, à mudança da composição do produto de topo, para não haver atrasos neste controle corretivo, enquanto que o ajuste do refluxo constante requer um simples controlador de vazão (BLOCK, 1961).

Segundo Block (1961), em uma coluna de poucos pratos teóricos, é mais vantajoso operar com taxa de refluxo constante. Porém, quando o número de pratos teóricos se torna maior, a separação é favorecida por essa sucessão de estágios de contato líquido-vapor e, com isso, a taxa de refluxo requerida pode ser menor. Logo, neste caso, o modo de operação com refluxo variável deve ser adotado. De fato, para as misturas estudadas por Block (1961), quando o número de pratos teóricos

se torna relativamente alto, a operação com refluxo variável permite uma vazão média de retirada de destilado mais alta do que a operação com refluxo constante.

#### **2.6.4 Outros estudos de destilação em batelada**

Na pesquisa bibliográfica sobre destilação em batelada, encontraram-se diversos estudos que não serão abordados neste trabalho. Porém, serão relacionados a seguir, como complementação para eventuais estudos futuros correlatos.

Koppel (1972) apresentou um modelo analítico, substituindo o diagrama gráfico do método de McCabe-Thiele. Esta abordagem pode ser particularmente interessante para estudos a serem implementados em programas computacionais.

No presente trabalho, não será considerada a influência da quantidade de líquido retido no equipamento ("*holdup*") ao longo da destilação (ver o item 3.1). Mas, no estudo de Domenech e Enjalbert (1981), e Guy (1983), essa variável foi contemplada no processo.

O estudo da destilação em batelada, através de simulação matemática, também foi realizado por Rooney (1984).

Bernot, Doherty e Malone (1990) estudaram o comportamento da destilação em batelada, para uma mistura multicomponente. No trabalho de Kim e Diwekar, (1999), também foi considerado um sistema multicomponente; além disso, foram abordados aspectos sobre a sua otimização.

Uma comparação entre o projeto de plantas de destilação, operando em regime contínuo e em batelada, pode ser encontrada no trabalho de Gorsek e Glavic (1997).

Em relação ao controle da operação de uma destilação em batelada, pode-se citar o trabalho de Block (1967), e de Monroy-Loperena e Alvarez-Ramirez (2003).

No presente estudo, foram considerados os dois modos básicos de destilação (refluxo constante e composição de destilado constante). Porém, Coward (1967), e Fileti, Cruz e Pereira (2000) abordaram um outro modo de operação, com a taxa de refluxo ótimo.

### 3 MODELO MATEMÁTICO

O modelo matemático de destilação em batelada de uma mistura binária, desenvolvido neste trabalho, consiste de balanços de massa global e de componente, balanços de entalpia, dados de equilíbrio líquido-vapor experimentais ajustados utilizando o modelo termodinâmico de van Laar, relações entre temperaturas de bolha e orvalho e composição, estimativa das propriedades físico-químicas da mistura (calor específico, calor latente de vaporização), determinação do número de estágios ideais necessários à separação pelo método de McCabe-Thiele, cálculo de cargas térmicas no refeedor e condensador, consumo de utilidades como vapor de água e água de resfriamento, estimativa das áreas de troca térmica do condensador e refeedor, estimativa do tempo de destilação. Este modelo, envolvendo todos os aspectos citados acima, foi implementado em uma planilha eletrônica (Microsoft® Excel 2002) para simulações matemáticas e análise do processo.

O modelo matemático tratado é de destilação em batelada de mistura binária, operando com refluxo constante ou com composição do destilado constante. Um esquema da instalação de destilação em batelada é apresentado na figura 13.

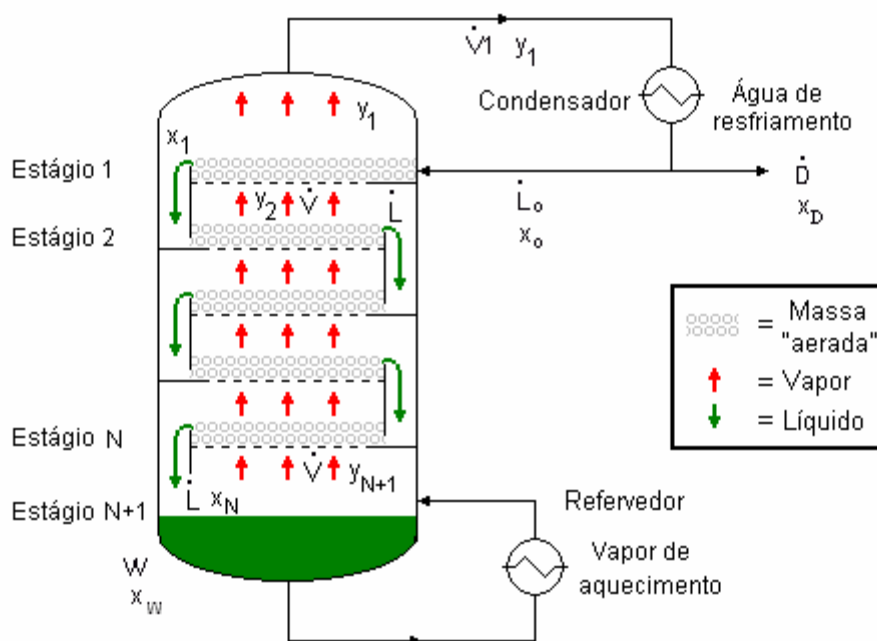


Figura 13 - Esquema de uma instalação de destilação em batelada.

### 3.1 HIPÓTESES

As principais premissas admitidas para este modelo são:

- H1: O sistema estudado é binário, composto de metanol-etanol;
- H2: A destilação é realizada em regime não permanente;
- H3: A quantidade de líquido retido na coluna (“*holdup*”) foi considerada desprezível;
- H4: O condensador é total;
- H5: As trocas de calor com o ambiente foram desprezadas;
- H6: A destilação ocorre à pressão atmosférica;
- H7: Admitiu-se comportamento ideal para a fase de vapor, pois se trata de operação à baixa pressão (menor que 5 atm);
- H8: A perda de carga pela coluna foi desprezada; vale destacar que, para colunas industriais com um número elevado de pratos, a influência dessa perda de carga no estudo pode ser significativa;
- H9: Os estágios de separação foram considerados teóricos (ideais ou de equilíbrio);
- H10: O refeedor foi considerado como um estágio de equilíbrio, e portanto é contabilizado na contagem do número de estágios ideais de separação (ELLERBE, 1973);
- H11: as correntes internas são saturadas;
- H12: As vazões molares de líquido e vapor ao longo da coluna são constantes. Em princípio, as vazões das correntes de líquido e vapor variam ao longo da coluna. No entanto, constata-se que as entalpias molares de vaporização do metanol e do etanol puros são próximas (ver item 4.2). E com isso, pode-se considerar que o sistema metanol-etanol satisfaz à hipótese de Lewis (LEWIS, 1922), ou seja, as vazões molares da fase líquida (assim como da fase vapor) podem ser consideradas constantes ao longo de uma seção da coluna em que não há retiradas laterais ou alimentação (COATES; PRESSURG, 1961);
- H13: Foram adotados valores típicos, de acordo com a literatura, para os



coeficientes globais de troca térmica no condensador e no refeedor, independentes das condições de processo; embora isso não seja realista num processo, ressalta-se que, ainda assim, essa simplificação pode ser razoavelmente aceitável, pois a proposta do trabalho consiste em um estudo comparativo dos modos de operação, não afetando, de modo geral, com isso, a tendência e a relação dos resultados obtidos, a não ser que as condições nos dois casos sejam significativamente distintas;

- H14: O calor de solução do sistema metanol-etanol foi desprezado. De fato para soluções ideais, o calor de solução é igual a zero (TREYBAL, 1980) e a mistura em questão apresenta comportamento praticamente ideal (ver o item 4.2, figura 18);
- H15: O calor específico da mistura é calculado, utilizando a média ponderada dos seus valores para os componentes puros, em relação à composição da mistura (DIMOPLON, 1972), assim como a entalpia de vaporização da mistura.

### 3.2 OPERAÇÃO SOB REFLUXO CONSTANTE

Fazendo um balanço de massa no condensador, calcula-se a vazão de vapor que deixa a coluna,  $\dot{V}_1$ :

$$\dot{V}_1 = \dot{L}_0 + \dot{D} \quad (3.2-1)$$

Já o balanço de massa na coluna, envolvendo o condensador e um prato genérico  $n$  ( $n \neq 1$ ), é dado por:

$$\dot{V} = \dot{L} + \dot{D} \quad (3.2-2)$$

E um balanço para o componente mais volátil neste mesmo volume de controle é (ELLERBE, 1973):

$$y_{n+1} \dot{V} = x_n \dot{L} + x_D \dot{D} \quad (3.2-3)$$

Esta equação é referida como linha de operação. E admitindo-se que as vazões molares de líquido e vapor ao longo da coluna são constantes (ver hipótese H12), esta equação produz uma linha reta. Construindo esta reta dada pela equação (3.2-3) e a curva de equilíbrio (que tem a forma  $y_n = f(x_n)$ ) para o sistema em consideração, permite-se resolver problemas de destilação em batelada pelo método clássico de McCabe-Thiele (ELLERBE, 1973). O número de estágios ideais necessários à separação pode ser determinado através deste método, conforme visto no item 2.5.

Observando a figura 13, nota-se que a taxa de refluxo externo é calculada por:

$$R_e = \frac{\dot{L}_0}{\dot{D}} \quad (3.2-4)$$

E a taxa de refluxo interno é dada por:

$$R_i = \frac{\dot{L}}{\dot{V}} \quad (3.2-5)$$

Se o vapor no topo é condensado e resfriado abaixo de seu ponto de bolha, o refluxo sub-resfriado, ao entrar no prato de topo, precisa ser reaquecido até saturação. A carga térmica necessária,  $\dot{L}_0 C_{pr}(T_{br} - T_r)$ , é suprida pela condensação da parte da corrente interna de vapor,  $\frac{\dot{L}_0 C_{pr}(T_{br} - T_r)}{\lambda_{v_1}}$ . Esse líquido

formado soma-se a  $\dot{L}_0$  para gerar  $\dot{L}$ , a vazão de líquido que escoar abaixo do prato de topo. Então (TREYBAL, 1980):

$$\dot{L} = \dot{L}_0 + \frac{\dot{L}_0 C_{pr}(T_{br} - T_r)}{\lambda_{v_1}} \quad (3.2-6)$$

Desse modo, a relação entre a taxa de refluxo externo e interno é dada por:

$$Ri = \frac{\text{Re} \left[ 1 + \frac{C_{pr}(T_{br} - T_r)}{\lambda_{v_1}} \right]}{\text{Re} \left[ 1 + \frac{C_{pr}(T_{br} - T_r)}{\lambda_{v_1}} \right] + 1} \quad (3.2-7)$$

Para o caso de o condensador de topo ser total, o vapor que deixa a coluna de destilação é condensado integralmente, parte deste será retornada à coluna como refluxo, e a outra parte será retirada como destilado. Portanto, a composição do vapor que deixa a coluna,  $y_1$ , é igual à composição do refluxo, e igual à composição do destilado:

$$y_1 = x_0 = x_D \quad (3.2-8)$$

Considerando que a diminuição da quantidade de líquido no refeedor representa a variação da quantidade de destilado coletado no recipiente de produto, tem-se (KISTER, 1992):

$$-dW = dD \quad (3.2-9)$$

onde  $W$  = moles de líquido no refeedor e  $D$  = moles de destilado. Tomando o balanço de massa do componente mais volátil, fica:

$$-d(x_w W) = x_D dD \quad (3.2-10)$$

onde,  $x_w$  = fração molar do componente mais volátil no refeedor e  $x_D$  = sua fração molar de destilado.

Ou

$$-(x_w dW + W dx_w) = x_D dD \quad (3.2-11)$$

Substituindo (3.2-9) em (3.2-11), resulta:

$$x_w dW + W dx_w = x_D dW \quad (3.2-12)$$

Rearranjando, tem-se:

$$(x_w - x_D) dW = -W dx_w \quad (3.2-13)$$

Então:

$$\frac{dW}{W} = \frac{dx_w}{(x_D - x_w)} \quad (3.2-14)$$

Integrando, resulta:

$$\ln \frac{W}{W_i} = \int_{x_{w_i}}^{x_w} \frac{dx_w}{(x_D - x_w)} \quad (3.2-15)$$

A quantidade de destilado é calculada pelo balanço de massa (BLOCK, 1961; KISTER, 1992):

$$D = W_i \frac{x_{w_i} - x_w}{x_D - x_w} \quad (3.2-16)$$

A composição média do destilado em um dado instante,  $\bar{x}_D$ , é determinada por (BLOCK, 1961):

$$\bar{x}_D = \frac{(W_i x_{w_i} - W x_w)}{W_i - W} \quad (3.2-17)$$

A quantidade de vapor que deixa a coluna de destilação é calculada pela seguinte equação:

$$V_1 = L_0 + D \quad (3.2-18)$$

onde  $L_0$ , em cada instante, é dado por  $L_0 = \dot{L}_0 \Delta\theta$ , lembrando, que, neste modo de operação,  $\dot{L}_0$  é constante.

### 3.3 OPERAÇÃO COM COMPOSIÇÃO DO DESTILADO CONSTANTE

As equações (3.2-1) a (3.2-8) também são utilizadas para a operação com composição do destilado constante.

A equação (3.2-15) aplica-se de modo indiferente para este tipo de operação, mas neste caso, pode-se fazer a integração direta desta equação (STICHLMAIR; FAIR, 1998):

$$W = W_i \frac{x_D - x_{W_i}}{x_D - x_W} \quad (3.3-1)$$

Como no modo de operação com refluxo constante, a quantidade de destilado também é calculada pelo balanço de massa:

$$D = W_i \frac{x_{W_i} - x_W}{x_D - x_W} \quad (3.2-16)$$

A quantidade de vapor que deixa a coluna de destilação,  $V_1$ , não pode ser calculada como no modo anterior, pois, neste caso,  $\dot{L}_0$  não é mais constante. Então, a dedução da expressão para a sua quantificação será apresentada a seguir.

A quantidade de mistura que deve ser vaporizada num prato genérico  $n$  ( $n \neq 1$ ),

para atingir uma especificação com as condições de refluxo variável, é dada por (KISTER,1992):

$$V = L + D \quad (3.3-2)$$

Diferenciando, fica:

$$dV = dL + dD \quad (3.3-3)$$

e multiplicando  $dL$  por  $dV/dV$ , tem-se:

$$dV = \frac{dL}{dV} dV + dD \quad (3.3-4)$$

O termo  $dL/dV$  é equivalente à taxa de refluxo interno,  $Ri$ , e com isso:

$$dV = Ri dV + dD \quad (3.3-5)$$

onde  $Ri$  é variável. Rearranjando, resulta:

$$dV = \frac{dD}{1 - Ri} \quad (3.3-6)$$

Integrando, tem-se;

$$\int_0^V dV = \int_0^D \frac{dD}{1 - Ri} \quad (3.3-7)$$

Então, diferenciando a equação (3.3-1) (lembrando que  $W_i$ ,  $x_{wi}$ , e  $x_D$  são constantes quando o refluxo varia), tem-se:

$$dW = -W_i \frac{(x_D - x_{wi})}{(x_D - x_w)^2} dx_w \quad (3.3-8)$$

Substituindo a equação (3.3-8) na (3.3-7), e como  $dD = -dW$ , fica:

$$V = W_i (x_D - x_{W_i}) \int_{x_{W_i}}^{x_w} \frac{dx_w}{(1 - R_i)(x_D - x_w)^2} \quad (3.3-9)$$

Se o refluxo é sub-resfriado, a quantidade de vapor que deixa a coluna,  $V_1$ , é menor do que passa pela coluna,  $V$ , pois parte deste vapor condensa para ceder calor e saturar o refluxo. Com isso:

$$V_1 = \left[ W_i (x_D - x_{W_i}) \int_{x_{W_i}}^{x_w} \frac{dx_w}{(1 - R_i)(x_D - x_w)^2} \right] - \left[ \frac{L_0 C_{pr}(T_{br} - T_r)}{\lambda_{V_1}} \right] \quad (3.3-10)$$

### 3.4 TEMPO DE DESTILAÇÃO

A estimativa do tempo de destilação,  $\theta$ , para ambos os modos de operação, foi feita da seguinte forma:

$$\theta = \frac{V_1}{\dot{V}_1} \quad (3.4-1)$$

### 3.5 MODELAGEM DE TROCA TÉRMICA NO REFERVEDOR E NO CONDENSADOR

A taxa de calor cedida pelo vapor do topo no condensador é dada por:

$$\dot{Q}_{c,ced} = \dot{V}_1 [\lambda_{V_1} + C_{pr}(T_{br} - T_r)] \quad (3.5-1)$$

onde  $\lambda_{v_1}$  é a variação de entalpia específica na condensação da mistura do vapor de topo, calculada a partir da variação de entalpia específica do metanol,  $\lambda_a$ , e da variação de entalpia específica do etanol,  $\lambda_b$ , pela ponderação com a composição da mistura de refluxo:

$$\lambda_{v_1} = \lambda_a x_{Da} + \lambda_b (1 - x_{Da}) \quad (3.5-2)$$

sendo que  $\lambda_a$  e  $\lambda_b$  são calculados à temperatura  $Tm$  da seguinte forma:

$$Tm = \frac{(Tbr + Tor)}{2} \quad (3.5-3)$$

O calor específico da mistura de refluxo,  $Cp_r$ , também é calculado, ponderando-se o calor específico do metanol,  $Cp_a$ , e o calor específico do etanol,  $Cp_b$ , com a composição da mistura de refluxo:

$$Cp_r = Cp_a x_{Da} + Cp_b (1 - x_{Da}) \quad (3.5-4)$$

sendo que  $Cp_a$  e  $Cp_b$  são obtidos à temperatura  $T'm$ :

$$T'm = \frac{(Tr + Tbr)}{2} \quad (3.5-5)$$

A taxa de troca térmica entre o vapor de topo e a água de resfriamento no condensador é equacionada como:

$$\dot{Q}_{c,troc} = U_c A_c \left( To - \frac{Tea + Tsa}{2} \right) \quad (3.5-6)$$

onde  $U_c$  é o coeficiente global de troca de calor no condensador,  $A_c$  é a área de troca térmica do condensador,  $To$  é a temperatura de orvalho, e  $Tsa$ ,  $Tea$  são as temperaturas da água de resfriamento de saída e entrada do condensador,



respectivamente.

A taxa de calor recebida pelo fluido de resfriamento no condensador,  $\dot{Q}_{c,rec}$ , é expressa como (SEADER; HENLEY, 1998):

$$\dot{Q}_{c,rec} = \dot{m}_a C_{p_{\text{água}}} (T_{sa} - T_{ea}) \quad (3.5-7)$$

onde  $\dot{m}_a$  é a vazão de água de resfriamento no condensador,  $C_{p_{\text{água}}}$ , o calor específico da água à temperatura  $T_{ma}$ , dada pela equação (3.5-8); e  $T_{sa}$ ,  $T_{ea}$  são as temperaturas da água de resfriamento de saída e entrada do condensador, respectivamente.

$$T_{ma} = \frac{T_{sa} + T_{ea}}{2} \quad (3.5-8)$$

No entanto, tomando a hipótese H5, de que o sistema é adiabático, pode-se escrever:

$$\dot{Q}_{c,ced} = \dot{Q}_{c,troc} = \dot{Q}_{c,rec} = \dot{Q}_c \quad (3.5-9)$$

Pode-se, então, calcular, a partir do  $\dot{Q}_{c,ced}$  obtido da equação (3.5-1), a área de troca de calor do condensador pela equação (3.5-6) e a vazão de água de resfriamento para o condensador pela equação (3.5-7).

A vazão da água de resfriamento, em geral, não é constante ao longo de uma batelada. Para a estimativa da demanda desta água de resfriamento, subdivide-se o tempo de destilação em alguns intervalos, e em seguida, faz-se a totalização dos produtos da vazão inicial de cada intervalo pela respectiva duração.

A taxa de entalpia recebida pela mistura de vapor no refeedor foi calculada por:

$$\dot{Q}_{r,rec} = \dot{V} \lambda_v \quad (3.5-10)$$

onde  $\lambda_v$  é a variação de entalpia específica na evaporação da mistura no refervedor, calculada a partir da variação de entalpia específica do metanol,  $\lambda_a$ , e da variação de entalpia específica do etanol,  $\lambda_b$ , pela ponderação com a composição da mistura no refervedor:

$$\lambda_v = \lambda_a x_{wa} + \lambda_b (1 - x_{wa}) \quad (3.5-11)$$

sendo que  $\lambda_a$  e  $\lambda_b$  são calculados à temperatura  $T_{m,ref}$  da seguinte forma:

$$T_{m,ref} = \frac{(T_{bref} + T_{oref})}{2} \quad (3.5-12)$$

A taxa de troca térmica no refervedor,  $\dot{Q}_{r,troc}$ , pode ser calculada por meio da equação (3.5-13):

$$\dot{Q}_{r,troc} = U_r A_r (T_s - T_{bref}) \quad (3.5-13)$$

A taxa de calor cedido pelo vapor de aquecimento no refervedor é dada por:

$$\dot{Q}_{r,ced} = \dot{S} \lambda_{steam} \quad (3.5-14)$$

onde  $\dot{S}$  é a vazão do vapor de aquecimento, e  $\lambda_{steam}$  é a variação de entalpia específica de condensação desse vapor de aquecimento. A temperatura de vapor,  $T_s$ , é função da sua pressão (equação de Antoine):

$$T_s = T_s(P_s) \quad (3.5-15)$$

Retomando-se a hipótese H5 de que o sistema é adiabático, tem-se:

$$\dot{Q}_{r,rec} = \dot{Q}_{r,troc} = \dot{Q}_{r,ced} = \dot{Q}_r \quad (3.5-16)$$

Desse modo, a partir do  $\dot{Q}_r$  calculado pela equação (3.5-10), pode-se calcular a área de troca térmica do refervedor pela equação (3.5-13), e a vazão de vapor de água necessária no refervedor pela equação (3.5-14).

A vazão de vapor de aquecimento, em geral, varia ao longo de uma batelada, e a estimativa do consumo deste vapor é feita de modo análogo ao da água de resfriamento.

A energia total consumida para o aquecimento em um lote também é calculada utilizando o mesmo procedimento: subdivide-se o tempo de processo em quatro intervalos, somam-se os produtos da carga térmica inicial no refervedor em cada intervalo de tempo pela respectiva duração.

### 3.6 RESUMO DAS EQUAÇÕES

Na Tabela 1, está apresentado o resumo das principais equações do modelo estudado, onde N é o número de pratos ideais.

Tabela 1 - Resumo das equações do modelo matemático para ambos os modos de operação.

Refluxo Constante		Refluxo Variável	
Número de ocorrências	Equação	Número de ocorrências	Equação
N+1	$y_n = f(x_n)$	N+1	$y_n = f(x_n)$
N	$y_{n+1} \dot{V} = x_n \dot{L} + x_D \dot{D}$	N	$y_{n+1} \dot{V} = x_n \dot{L} + x_D \dot{D}$
1	$y_1 = x_D$	1	$y_1 = x_D$
1	$x_0 = x_D$	1	$x_0 = x_D$
1	$Re = \frac{\dot{L}_0}{\dot{D}}$	1	$Re = \frac{\dot{L}_0}{\dot{D}}$
1	$Ri = \frac{Re \left[ 1 + \frac{Cpr(Tbr - Tr)}{\lambda_{v_1}} \right]}{Re \left[ 1 + \frac{Cpr(Tbr - Tr)}{\lambda_{v_1}} \right] + 1}$	1	$Ri = \frac{Re \left[ 1 + \frac{Cpr(Tbr - Tr)}{\lambda_{v_1}} \right]}{Re \left[ 1 + \frac{Cpr(Tbr - Tr)}{\lambda_{v_1}} \right] + 1}$
1	$\dot{L} = \dot{L}_0 \left[ 1 + \frac{Cp_r (Tbr - Tr)}{\lambda_{v_1}} \right]$	1	$\dot{L} = \dot{L}_0 \left[ 1 + \frac{Cp_r (Tbr - Tr)}{\lambda_{v_1}} \right]$
1	$D = W_i \frac{x_{W_i} - x_W}{x_D - x_W}$	1	$D = W_i \frac{x_{W_i} - x_W}{x_D - x_W}$
1	$\dot{V}_1 = \dot{L}_0 + \dot{D}$	1	$\dot{V}_1 = \dot{L}_0 + \dot{D}$
1	$\dot{V} = \dot{L} + \dot{D}$	1	$\dot{V} = \dot{L} + \dot{D}$
1	$\theta = \frac{V_1}{\dot{V}_1}$	1	$\theta = \frac{V_1}{\dot{V}_1}$

(continua)

(continuação)

Refluxo Constante		Refluxo Variável	
Número de ocorrências	Equação	Número de ocorrências	Equação
1	$\dot{Q}_c = \dot{V}_i [\lambda_{v_i} + Cp_r(Tbr - Tr)]$	1	$\dot{Q}_c = \dot{V}_i [\lambda_{v_i} + Cp_r(Tbr - Tr)]$
1	$\dot{Q}_c = \dot{m}_a Cp_a(Tsa - Tea)$	1	$\dot{Q}_c = \dot{m}_a Cp_a(Tsa - Tea)$
1	$\dot{Q}_c = U_c A_c \left( To - \frac{Tea + Tsa}{2} \right)$	1	$\dot{Q}_c = U_c A_c \left( To - \frac{Tea + Tsa}{2} \right)$
1	$\dot{Q}_r = \dot{V} \lambda_v$	1	$\dot{Q}_r = \dot{V} \lambda_v$
1	$\dot{Q}_r = U_r A_r (Ts - Tbr)$	1	$\dot{Q}_r = U_r A_r (Ts - Tbr)$
1	$\dot{Q}_r = \dot{S} \lambda_{steam}$	1	$\dot{Q}_r = \dot{S} \lambda_{steam}$
1	$Ts = Ts(Ps)$	1	$Ts = Ts(Ps)$
1	$\ln \frac{W}{W_i} = \int_{x_{w_i}}^{x_w} \frac{dx_w}{(x_D - x_w)}$	1	$W = W_i \frac{x_D - x_{w_i}}{x_D - x_w}$
1	$V_1 = L_0 + D$	1	$V_1 = \left[ W_i (x_D - x_{w_i}) \int_{x_{w_i}}^{x_w} \frac{dx_w}{(1 - R_i)(x_D - x_w)^2} \right] - \left[ \frac{L_0 Cp_r (Tbr - Tr)}{\lambda_{v_i}} \right]$
1	$\frac{-}{x_D} = \frac{(W_i x_{w_i} - W x_w)}{W_i - W}$		
20+2N	Número total de equações	19+2N	Número total de equações

Totalizam-se, então, (20+2N) equações para o modelo de operação com refluxo constante e (19+2N) equações para o modelo de operação com composição do destilado constante.

Utilizando-se dos seguintes dados de entrada para operação com refluxo constante:  $x_{w_i}$ ,  $x_w(\theta)$ ,  $x_D(\theta)$ ,  $Re$ ,  $W_i$ ,  $Tr$ ,  $Tea$ ,  $Tsa$ ,  $Ps$ ,  $U_c$ ,  $U_r$  e  $\dot{D}$ , calculam-se (20+2N) variáveis. Para operação com composição do destilado constante os dados de entrada são:  $x_{w_i}$ ,  $x_w(\theta)$ ,  $x_D$ ,  $Re(\theta)$ ,  $W_i$ ,  $Tr$ ,  $Tea$ ,  $Tsa$ ,  $Ps$ ,  $U_c$ ,  $U_r$  e  $\dot{D}$ , e calculam-se

(19+2N) variáveis. A relação dessas variáveis calculadas é apresentada na tabela 2.

Tabela 2 - Relação das variáveis calculadas pelo modelo matemático para ambos os modos de operação.

Refluxo Constante		Refluxo Variável	
Número de ocorrências	Variável	Número de ocorrências	Variável
N	$x_n$ (n = 1 a N)	N	$x_n$ (n = 1 a N)
N	$y_{n+1}$ (n = 1 a N)	N	$y_{n+1}$ (n = 1 a N)
1	$y_1$	1	$y_1$
1	$x_0$	1	$x_0$
1	N	1	N
1	$\dot{L}_0$	1	$\dot{L}_0(\theta)$
1	$Ri$	1	$Ri(\theta)$
1	$\dot{L}$	1	$\dot{L}(\theta)$
1	$W(\theta)$	1	$W(\theta)$
1	$D(\theta)$	1	$D(\theta)$
1	$V_1(\theta)$	1	$V_1(\theta)$
1	$\dot{V}_1$	1	$\dot{V}_1(\theta)$
1	$\dot{V}$	1	$\dot{V}(\theta)$
1	$\theta$	1	$\theta$
1	$\dot{Q}c(\theta)$	1	$\dot{Q}c(\theta)$
1	$\dot{m}_a(\theta)$	1	$\dot{m}_a(\theta)$
1	$A_c$	1	$A_c$
1	$\dot{Q}_r(\theta)$	1	$\dot{Q}_r(\theta)$
1	$A_r$	1	$A_r$
1	$\dot{S}(\theta)$	1	$\dot{S}(\theta)$

(continua)

(continuação)

Refluxo Constante		Refluxo Variável	
Número de ocorrências	Variável	Número de ocorrências	Variável
1	$T_s$	1	$T_s$
1	$\bar{x}_D(\theta)$		
$20+2N$	Número total de variáveis	$19+2N$	Número total de variáveis

Então, pode-se notar que a dimensão do problema aumenta com o número de estágios ideais necessários à separação.

## 4 PARTE EXPERIMENTAL

A realização da parte experimental visa validar o modelo matemático desenvolvido em escala de laboratório para então realizar os estudos por simulação. Este capítulo é composto pela descrição do sistema que será estudado, da obtenção dos dados de equilíbrio a pressão atmosférica, do procedimento, e pelos resultados da validação.

### 4.1 SISTEMA ESTUDADO

O sistema estudado, conforme visto, é a mistura binária composta de metanol e etanol. A determinação da sua composição é feita indiretamente através do índice de refração da mistura. Então, foram preparadas várias misturas em diversas proporções, a partir de álcool etílico absoluto P.A. e álcool metílico P.A., ambos fabricados pela CAAL, ou pela Nuclear.

Construiu-se uma curva de calibração para determinação da fração molar de uma mistura de metanol e etanol em função de seu índice de refração a 20°C. Esta curva de calibração é apresentada na figura 14, e é válida somente para a faixa de exploração.

Para verificar a curva de calibração e a repetibilidade das determinações, preparou-se uma amostra de composição conhecida a partir de produtos P.A., utilizando-se de uma balança analítica, marca Shimadzu, modelo AY220, e leitura de 0,1 mg, e determinou-se quinze vezes o índice de refração a 20°C. Estes valores obtidos são usados para determinar a fração molar de metanol, utilizando a curva de calibração acima citada, e então comparou-se o valor médio das quinze determinações com o valor conhecido da composição (por pesagem). Este valor é igual a 0,648 e o valor médio obtido indiretamente por meio do índice de refração foi de 0,654 e desvio padrão de 0,007.



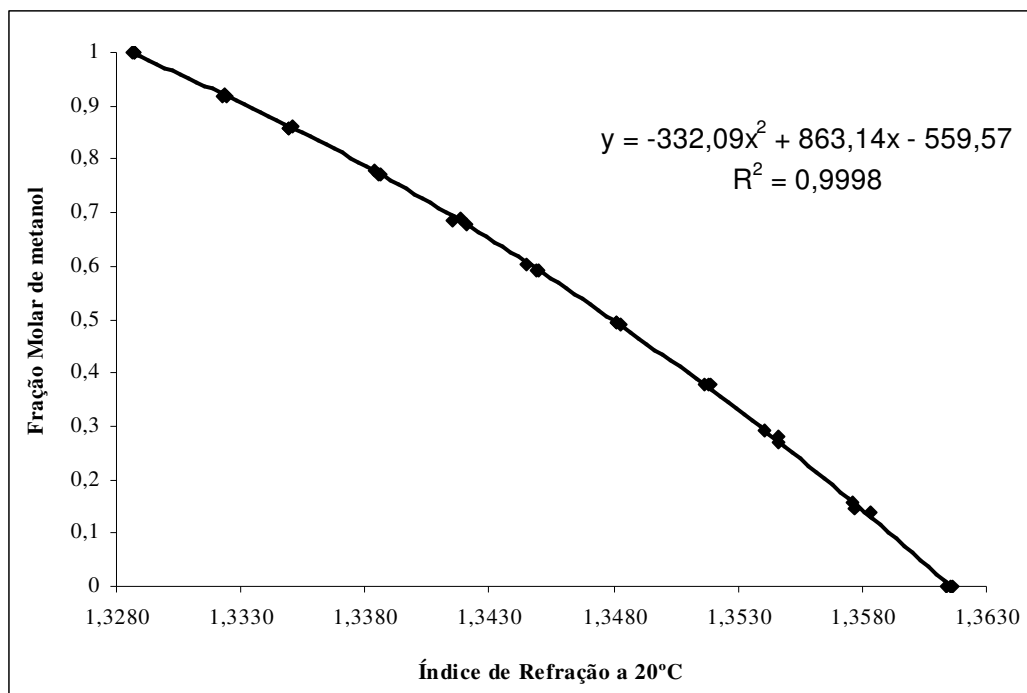


Figura 14 - Curva de calibração da mistura metanol-etanol.

## 4.2 DADOS DE EQUILÍBRIO

O estudo da destilação em ambos os modos de operação ocorre a pressão atmosférica, que, no local da instalação, é de aproximadamente 700 mmHg. Para a mistura binária em questão, encontraram-se na literatura apenas dados de equilíbrio a 760 mmHg, apresentados na figura 15. Então, os dados de equilíbrio dessa mistura a 700 mmHg foram obtidos experimentalmente pelo método indireto e direto (ver a seguir), os quais foram comparados entre si e também com os dados da literatura a 760 mmHg.

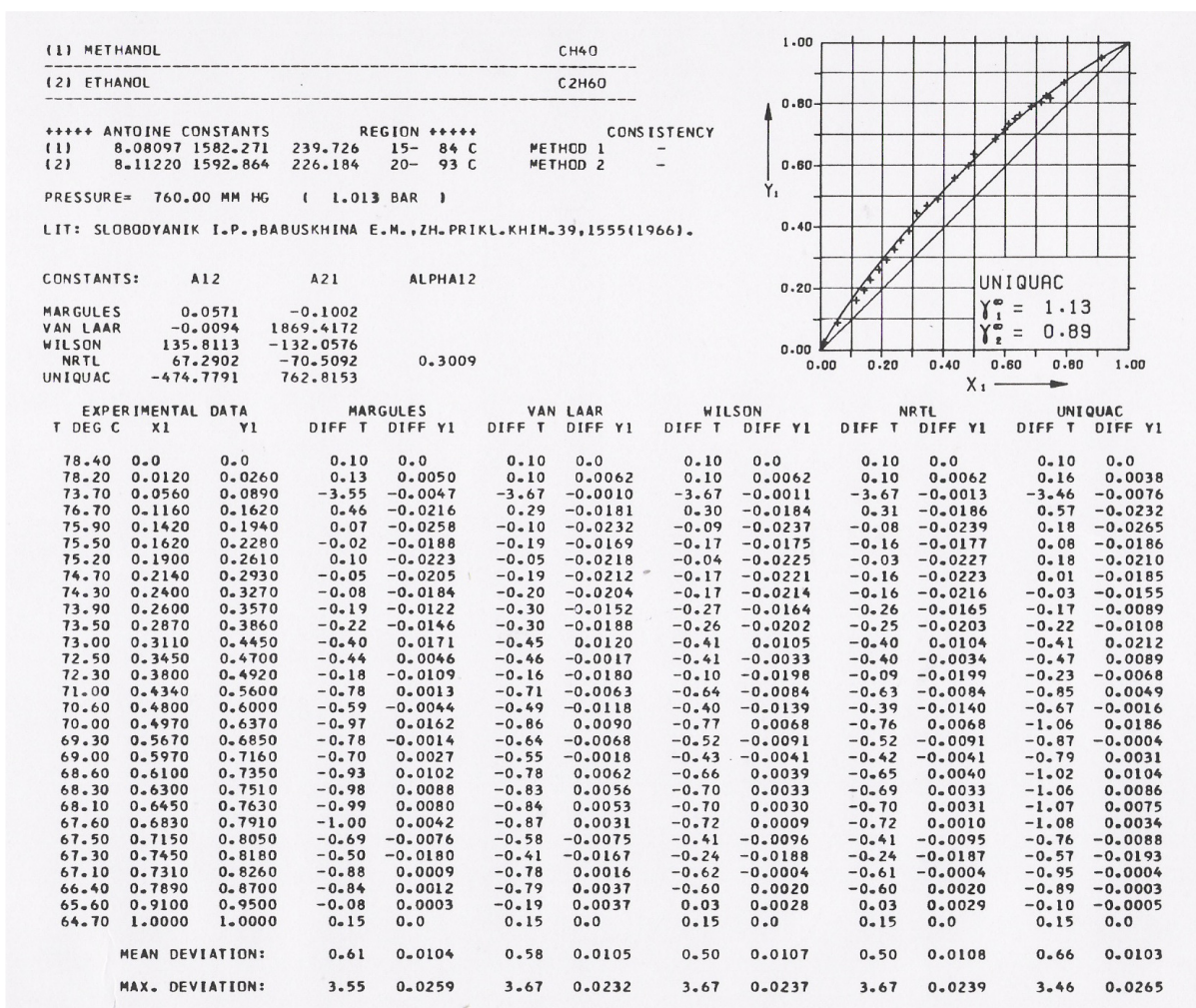


Figura 15 - Dados de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 760 mmHg.

Fonte: GMEHLING; ONKEN, 1977

No método direto, utiliza-se um aparato, mostrado na figura 16, onde é estabelecido o equilíbrio entre as fases líquida e de vapor. Em seguida, medem-se os índices de refração para a determinação das frações molares do componente mais volátil tanto no líquido como no vapor. No método indireto, mais simples, medem-se a fração molar apenas no líquido, a respectiva temperatura de bolha e a pressão atmosférica; com isso, obtém-se indiretamente a fração molar no vapor em equilíbrio. Obtiveram-se doze pontos experimentais<sup>1</sup> pelo método indireto para a construção da curva de equilíbrio, e quatro pontos<sup>1</sup> pelo método direto para a verificação da curva gerada.

<sup>1</sup> Ensaios realizados por Denise Trígilio Tavares sob a supervisão do Prof. Dr. Wilson Miguel Salvagnini, no Laboratório de Propriedades dos Fluidos Derivados de Petróleo do Departamento de Engenharia Química da EPUSP, trabalho não publicado, 2007.

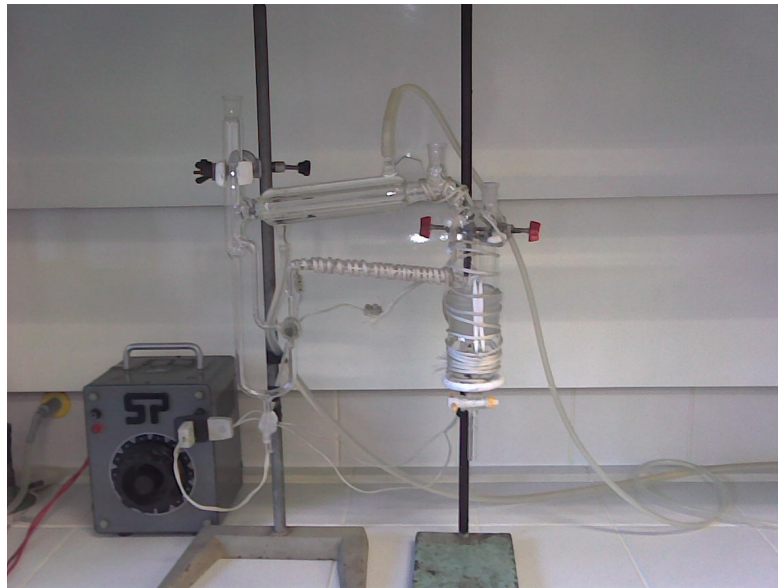


Figura 16 - Aparato para obtenção de dados de equilíbrio.

No método indireto, a fração molar do componente mais volátil no vapor,  $y_a$ , é calculada da seguinte maneira:

$$y_a = \frac{P_a \gamma_a x_a}{P} \quad (4.2-1)$$

onde  $P_a$  é a pressão de vapor do componente mais volátil,  $\gamma_a$  é seu coeficiente de atividade e  $x_a$  é sua fração molar no líquido em equilíbrio, e  $P$  é a pressão atmosférica. Analogamente, calcula-se a fração molar do componente menos volátil no vapor,  $y_b$ .

A pressão de vapor dos componentes puros foi determinada pela equação de Antoine (equação 2.1-12) à temperatura de bolha, os parâmetros para esta equação para o metanol e etanol estão apresentados na tabela 3.

$$\log P_i [ \text{mmHg} ] = A - \frac{B}{t [ ^\circ \text{C} ] + C} \quad (2.1-12)$$

Tabela 3 - Parâmetros da equação de Antoine para o metanol e etanol.

	Metanol faixa: 15-84°C	Etanol faixa: 20-93°C
A	8,08097	8,11220
B	1582,271	1592,864
C	239,726	226,184

Fonte: GMEHLING; ONKEN, 1977

O coeficiente de atividade da mistura de metanol-etanol foi estimado pelo modelo de van Laar. Conforme se observa na figura 15, os modelos para o coeficiente de atividade que tiveram os menores desvios foram o UNIQUAC, Margules e van Laar, e então se optou por este último para este trabalho, conforme as equações (2.1-14) e (2.1-15).

$$\ln \gamma_a = -\ln(x_a + A_{12}x_b) + x_b \left( \frac{A_{12}}{x_a + A_{12}x_b} - \frac{A_{21}}{x_b + A_{21}x_a} \right) \quad (2.1-14)$$

$$\ln \gamma_b = -\ln(x_b + A_{21}x_a) + x_a \left( \frac{A_{12}}{x_a + A_{12}x_b} - \frac{A_{21}}{x_b + A_{21}x_a} \right) \quad (2.1-15)$$

As constantes  $A_{12}$  e  $A_{21}$  da equação de van Laar para a mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg (valor medido no dia do ensaio) foram encontradas pelo método dos mínimos quadrados, utilizando-se os dados obtidos pelo método indireto.

Como, por definição,  $y_a + y_b = 1$ , tem-se:

$$\frac{P_a}{P} \gamma_a x_a + \frac{P_b}{P} \gamma_b x_b = 1 \quad (4.2-2)$$

Os valores  $A_{12}$  e  $A_{21}$  são determinados a partir da minimização da seguinte expressão:

$$\sum_{i=1}^n \left[ 1 - \left( \frac{P_a}{P} \gamma_a x_a + \frac{P_b}{P} \gamma_b x_b \right) \right]^2 \quad (4.2-3)$$

onde  $n$  é igual ao número de determinações. Na tabela 4, apresentam-se os valores das constantes obtidos e a sua comparação com os dados a 760 mmHg.

Tabela 4 - Constantes da equação de van Laar para a mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg e a 760 mmHg.

Pressão, mmHg	$A_{12}$	$A_{21}$
703,5	-0,1001	1869,4172
760*	-0,0094*	1869,4172*

\*Fonte: GMEHLING; ONKEN, 1977

O valor da soma dos quadrados dos desvios na determinação de  $A_{12}$  e  $A_{21}$  foi de 0,003 (relativamente pequeno). Portanto, pode-se considerar uma boa consistência destes valores.

Então, determinou-se a fração molar de metanol no vapor, e construiu-se a curva de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg com os dados obtidos pelo método indireto, mostrados na figura 17. Nesta figura, também se apresentam os quatro pontos obtidos pelo método direto. Pode-se observar que os valores obtidos pelos dois métodos apresentam uma boa consistência.

No cálculo da composição de equilíbrio, admitiu-se ser ideal a fase vapor, adotando-se o coeficiente de fugacidade igual a 1.

Para efeito de comparação, na figura 17, está mostrada também a curva de equilíbrio líquido-vapor a 760 mmHg (GMEHLING; ONKEN, 1977).

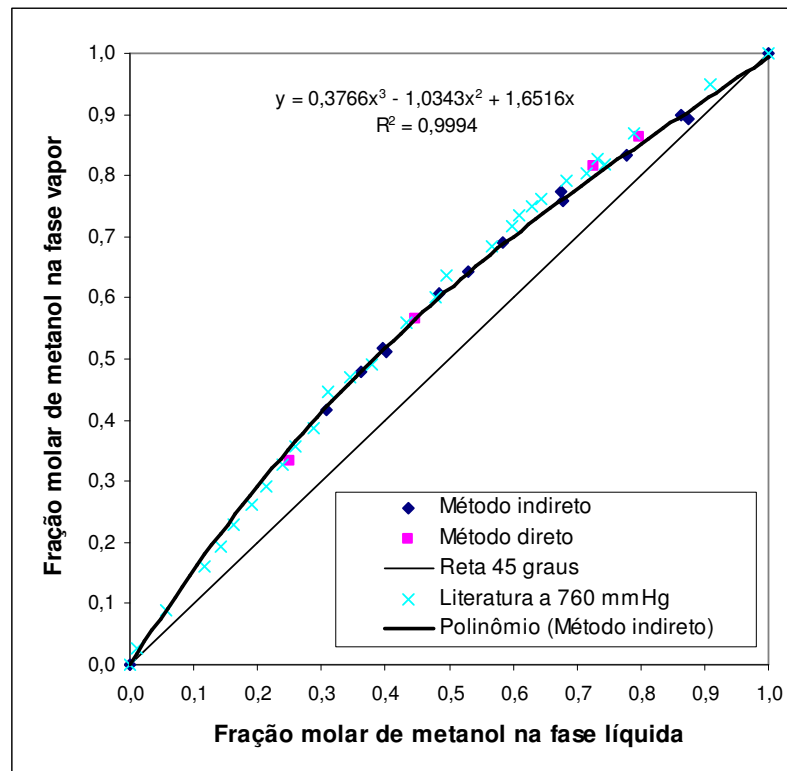


Figura 17 - Curva de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg e a 760 mmHg.

Uma outra comparação consiste em verificar se a mistura metanol-etanol apresenta comportamento ideal nas duas fases (líquida e vapor). Para tanto, utilizam-se as equações (4.2-4) e (4.2-5), para uma mistura binária, mostradas a seguir:

$$x_a = \frac{P - P_b}{P_a - P_b} \quad (4.2-4)$$

$$y_a = \frac{P_a x_a}{P} \quad (4.2-5)$$

onde  $x_a$ ,  $y_a$  são as frações molares do componente mais volátil nas fases líquida e de vapor em equilíbrio, respectivamente;  $P_a$ ,  $P_b$  são as pressões de vapor dos componentes  $a$  (mais volátil) e  $b$  (menos volátil); e  $P$  é a pressão total da mistura.

O gráfico correspondente está apresentado na figura 18, juntamente com a curva experimental anteriormente obtida. Pode-se observar que, para fração molar de metanol inferior a 0,4, as duas curvas quase se sobrepõem, sugerindo um

comportamento bem próximo do ideal para a mistura em questão. Na verdade, isto é de se esperar, pela semelhança de estrutura molecular dos componentes envolvidos (metanol-etanol). Além disso, os valores dos coeficientes de atividade já sugerem esta expectativa, pois são próximos de um.

Por outro lado, nota-se, na figura 18, que há um afastamento das duas curvas (experimental e prevista pelo comportamento ideal), para valores mais elevados da fração molar do metanol na mistura (superiores a 0,5). Uma possível explicação desta constatação é que, dentre os dois componentes, o que apresenta coeficiente de atividade mais afastado de um é o metanol (o do etanol é praticamente igual a 1,0). Com isso, à medida que aumenta a presença do metanol na mistura, acentua-se o desvio do comportamento ideal na fase líquida.

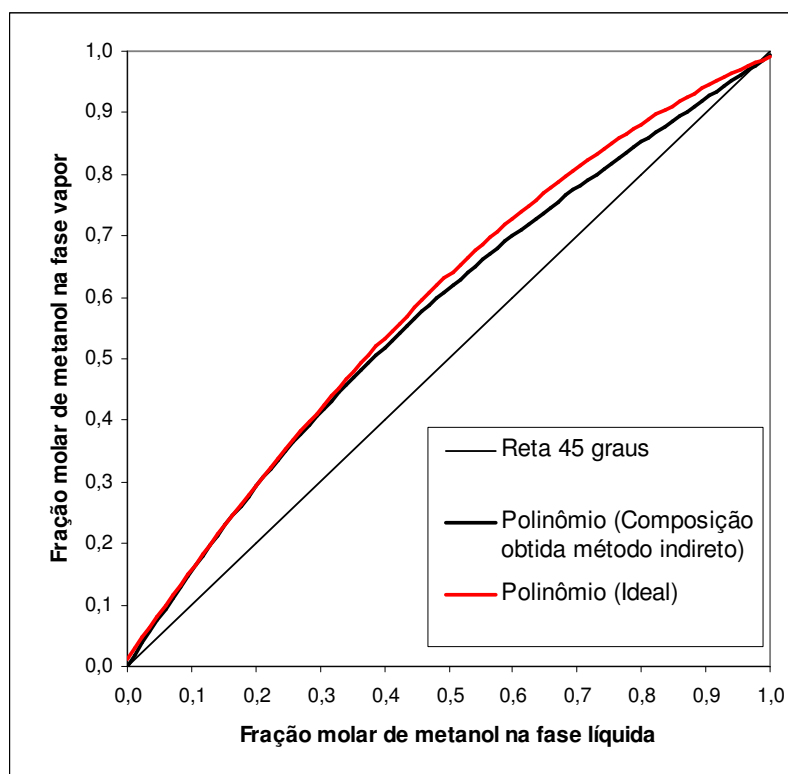


Figura 18 - Curva de equilíbrio da mistura metanol-etanol a 703,5 mmHg experimental e considerando comportamento ideal.

Com os dados de equilíbrio obtidos pelo método indireto, também foi possível relacionar as temperaturas de bolha e orvalho com a composição de metanol no líquido e no vapor, conforme apresentado na figura 19.

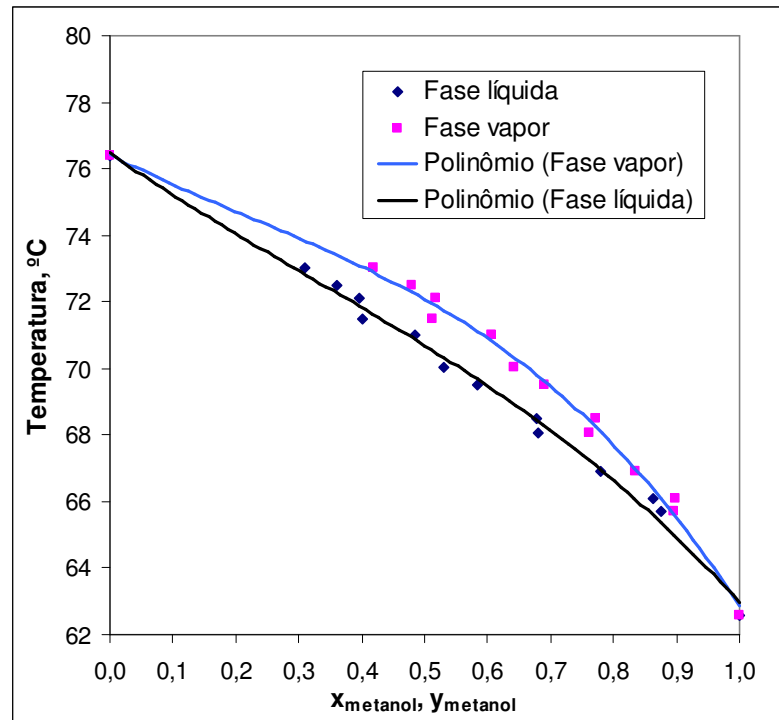


Figura 19 - Temperaturas de bolha e orvalho versus composição de metanol para a mistura binária metanol-etanol a 703,5 mmHg.

A temperatura de bolha (em °C), a 703,5 mmHg, é equacionada como:

$$T_b = -7,1676xa^3 + 6,8814xa^2 - 13,214xa + 76,468 \quad (4.2-6)$$

E a temperatura de orvalho (em °C), a 703,5 mmHg, é equacionada como:

$$T_o = -11,517ya^3 + 7,5641ya^2 - 19,5922ya + 76,418 \quad (4.2-7)$$

As curvas obtidas a partir das equações (4.2-6) e (4.2-7) estão apresentadas na figura 19, mostrando que há uma boa representatividade em relação aos valores experimentais obtidos.

De novo, os dados de temperatura de bolha e orvalho a 703,5 mmHg foram comparados com os da literatura a 760 mmHg, conforme mostrados na figura 20.



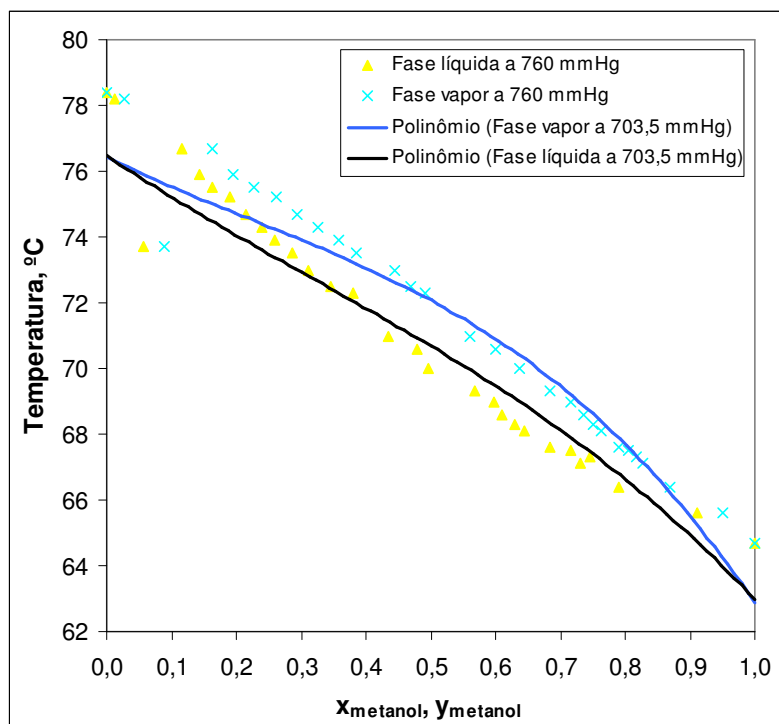


Figura 20 - Temperaturas de bolha e orvalho versus composição de metanol para a mistura binária metanol-etanol a 703,5 mmHg e a 760 mmHg.

Observando-se a figura 20, nota-se que existe uma certa diferença entre as curvas de bolha e orvalho a 703,5 mmHg e os pontos obtidos da literatura a 760 mmHg. Essa discrepância aparentemente é bem maior, comparada com a curva de composição no equilíbrio líquido-vapor (ver figura 17).

Então, ressalta-se que são utilizados, na modelagem matemática do presente trabalho, os dados de equilíbrio e as curvas de bolha e orvalho obtidas experimentalmente, à pressão de 703,5 mmHg, para a mistura em questão (os dados a 760 mmHg foram apresentados apenas para efeito de comparação).

No presente estudo, são necessárias informações sobre as entalpias de vaporização da mistura metanol e etanol.

Os valores da entalpia molar de vaporização dos componentes puros foram obtidos da literatura (YAWS, 1977):

- Entalpia molar de vaporização do metanol: 8.323,2 kcal/kmol
- Entalpia molar de vaporização do etanol: 9.319,6 kcal/kmol

A entalpia da mistura líquida é calculada por (TREYBAL, 1980):

$$H_L = C_{p_L}(t_L - t_0) + \Delta H_s \quad (4.2-8)$$

onde  $C_{p_L}$  é o calor específico da mistura líquida, calculado ponderando-se o calor específico do metanol,  $C_{p_a}$ , e o calor específico do etanol,  $C_{p_b}$ , com a composição da mistura (hipótese 15);  $t_L$  é a temperatura de bolha;  $t_0$  é a temperatura de referência; e  $\Delta H_s$  é o calor de solução, considerado nulo (hipótese 14).

A entalpia da mistura de vapor saturado é calculada por (TREYBAL, 1980):

$$H_G = y[C_{p_a}(t_G - t_0) + \lambda_a] + (1 - y)[C_{p_b}(t_G - t_0) + \lambda_b] \quad (4.2-9)$$

onde,  $t_G$  é a temperatura de orvalho,  $\lambda_a$ , a entalpia específica de vaporização do metanol, e  $\lambda_b$ , a do etanol.

Com isso, pode-se construir o gráfico da entalpia de vapor saturado da mistura metanol-etanol versus  $y$  e da entalpia do líquido saturado versus  $x$ , conforme mostrado na figura 21.

As distâncias verticais entre as duas curvas quando  $x$  é igual a 0 e a 1 representam, respectivamente, os valores do calor latente molar do etanol e do metanol. Observa-se que estes dois valores são relativamente próximos.

Nota-se que as linhas da figura 21 são praticamente retas paralelas, ou seja, o valor da entalpia molar de vaporização da mistura em questão varia muito pouco em relação à composição da mistura. Logo, pode-se considerar que a hipótese H12 é válida, ou seja, as vazões molares da fase líquida (assim como da fase vapor) podem ser consideradas constantes ao longo de uma seção da coluna em que não há retiradas laterais ou alimentação.

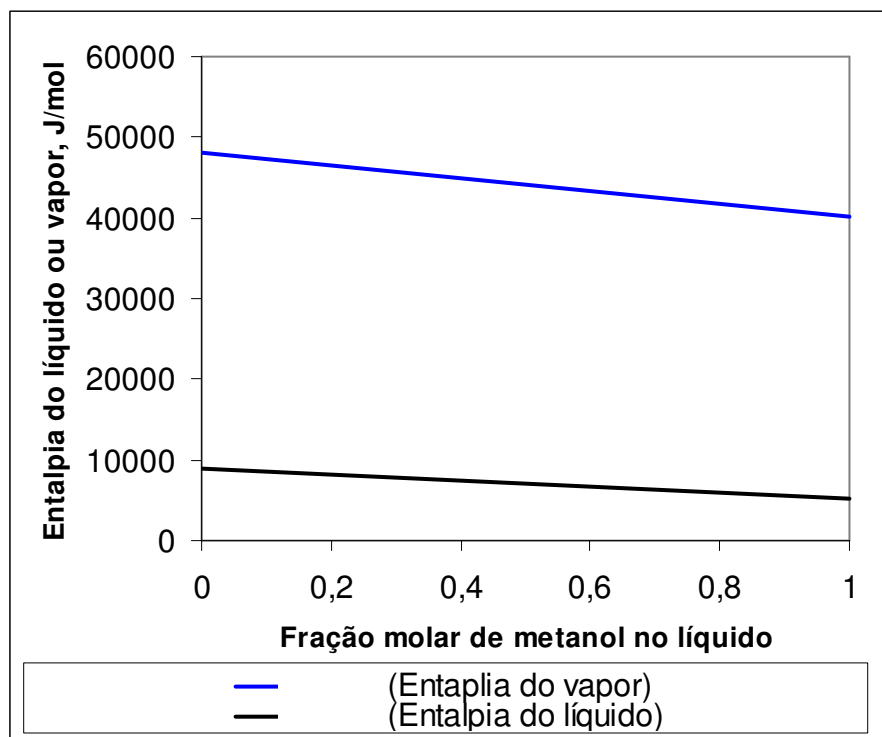


Figura 21 – Diagrama entalpia-composição para misturas metanol-etanol a 703,5 mmHg.

## 4.3 MATERIAIS E MÉTODOS

### 4.3.1 Descrição da unidade experimental

Os experimentos deste estudo foram realizados em um sistema de destilação em batelada, montado no Laboratório de Propriedades dos Fluidos Derivados de Petróleo do Departamento de Engenharia Química da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Uma foto da instalação utilizada está apresentada na figura 22.

Utilizou-se uma coluna (ver (1) na figura 22) de 3,4 cm de diâmetro interno, composta por cinco pratos perfurados de área ativa igual a 2,2 cm<sup>2</sup>/prato, área do “downcomer” igual a 2,1 cm<sup>2</sup>, e altura de selo de 1,5 cm. Ao topo da coluna, está acoplado um condensador (2) de vidro, do tipo serpentina por onde passa água como fluido de resfriamento em contracorrente, e provido de sifão para refluxo. O

refervedor (3) utilizado foi um balão de vidro de capacidade para 2000 mL, provido de manta de aquecimento elétrico com potência nominal de 480 W, podendo ser alterada através de um transformador variador de tensão elétrica. O balão é provido de um dispositivo para retirada e retorno de amostras ao longo do ensaio (4).



Figura 22 - Fotografia da instalação de destilação em batelada.

Há termômetros, posicionados no topo da coluna (5) e no fervedor (6), que auxiliam no monitoramento do ensaio; tais termômetros foram aferidos previamente, utilizando-se um banho termostático a diversas temperaturas, e comparando-se as suas medidas com a de um termômetro ASTM (divisão 0,1 °C), considerado como padrão. Nesses testes de aferição, foram selecionados os termômetros que apresentaram medição consistente com a do padrão.

Existe na saída do condensador um indicador (7) para estimar a vazão do destilado. Este indicador, mostrado na figura 23, é composto por dois tubos de vidro concêntricos. O tubo interno contém, ao longo da sua extensão, furos verticais; todo o líquido condensado passa por este primeiro, e dependendo da vazão, irá escoar por um certo furo, sendo assim, é possível visualizar as diferenças de níveis de

líquido com as diferentes vazões. Quanto maior a vazão, maior será o nível de líquido e, com isso, o condensado sai por um furo situado a uma altura mais acima e, em seguida, é descarregado através da mangueira na base do dispositivo (ver a figura 23), sendo coletado num béquer como destilado.

A água utilizada como líquido de resfriamento do condensador vem da rede pública, à temperatura ambiente, portanto. A água que sai do condensador é desprezada diretamente na rede coletora de esgoto.

Na figura 24, estão mostrados detalhes dos componentes principais da instalação: coluna (a), refervedor (b) e condensador (c).

#### **4.3.2 Materiais e equipamentos**

A seguir, estão relacionados os equipamentos e acessórios usados nos ensaios, com as suas principais especificações.

- Coluna de pratos perfurados;
- Condensador de vidro provido com sifão para refluxo;
- Balão de vidro de fundo redondo de três bocas de 2000 mL;
- Manta de aquecimento, marca Fisatom, modelo 202, potência nominal de 480 W;
- Potenciômetro com variador de tensão elétrica tipo ATV-115-M, nº 543, marca STP, (entrada: 115V; 60Hz – saída: 0 a 130V; 11,5A max; 1,5 kVA max - 1 fase);
- 2 termômetros de vidro, marca Incoterm, escala externa de -10 a 110°C e divisão de 1°C;
- Termômetro de vidro, marca Labor, escala interna de -10 a 110°C;
- Indicador de vazão qualitativo, apresentado na figura 23;
- 3 béqueres de vidro de 1000 mL;
- 2 béqueres de vidro de 100 mL;
- Pérolas de vidro;
- Cronômetro digital;
- 2 pipetas de 5 mL;
- Pipetador;

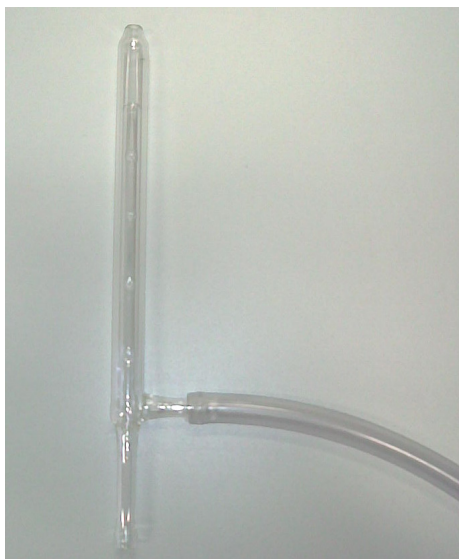


Figura 23 - Indicador de vazão de destilado.

- 10 a 15 frascos de vidro de 10, 15 ou 20 mL com rolha de borracha;
- Balança semi-analítica, marca Bel, divisão de 0,01g;
- Mangueiras de silicone;
- Barômetro de mercúrio, divisão de 0,1 mmHg;
- Refratômetro Abbe tipo WYA, marca Biobrix, modelo 2WA-J, precisão de  $\pm 0,0002$ ;
- Banho ultratermostático com circulador, marca Quimis, precisão de  $\pm 1,5^{\circ}\text{C}$ , sensibilidade de  $0,1^{\circ}\text{C}$ ;
- Água destilada;
- Álcool metílico P.A.;
- Álcool etílico absoluto P.A.



(a)



(b)



(c)

Figura 24 - Detalhes da instalação.  
(a) coluna de destilação, (b) rebovedor com dispositivo para retirada de amostra, (c) condensador.

### 4.3.3 Procedimento

#### 4.3.3.1 Carga e aquecimento

Carrega-se o balão do refulvedor com cerca de 800 g de mistura de composição conhecida, adicionam-se as pérolas de vidro para que a ebulição seja homogênea. Abre-se a entrada de água no condensador e regula-se a vazão de água, de modo que o líquido condensado retorne à coluna sub-resfriado (abaixo de 30°C), para minimizar perdas de vapor pelo respiro do condensador para a atmosfera.

Determina-se a pressão atmosférica, utilizando o barômetro de mercúrio.

Inicia-se o aquecimento, selecionando 70 (escala de 0 a 130) no potenciômetro; este valor foi selecionado para todos os ensaios, pois, nesta condição, havia a formação de selo no “downcomer” de todos os pratos, não ocorriam afogamento, choro, nem arraste de líquidos nos pratos da coluna, por inspeção visual. Inicialmente, opera-se com refluxo total até que todos os selos tenham sido formados na coluna, o que ocorre após cerca de 40 minutos.

#### 4.3.3.2 Determinação da vazão de vapor do topo

Em seguida, abre-se, de modo brusco e total, a válvula para a coleta do destilado (refluxo nulo, portanto), cronometra-se o tempo correspondente (menor que um minuto) a uma quantidade coletada em um béquer, e fecha-se a válvula, retornando-se à condição de refluxo total. Considera-se esta vazão medida deste modo direto como a do vapor que sai do topo da coluna. Retorna-se o produto coletado durante essa medição ao balão, para manter a massa total do sistema fixa. O retorno é feito, injetando o produto com uma pipeta através de um tubo imerso no balão. Este procedimento é repetido três vezes tanto no início como no final do ensaio; considera-se, para efeito de cálculos, o valor médio obtido destas medições. Mede-se a composição do destilado através do seu índice de refração a fim de



converter a vazão do vapor de topo, medida experimentalmente em base mássica, para base molar.

A vazão do refluxo é calculada a partir da diferença entre este valor e a do destilado.

#### *4.3.3.3 Ensaio propriamente dito*

Após a determinação descrita acima é que se inicia o ensaio propriamente dito. A válvula de coleta do destilado é aberta e inicia-se a contagem do tempo, acionando o cronômetro. Esta válvula deve ser aberta de modo que haja refluxo na coluna e que os selos nos “downcomers” sejam mantidos.

Neste instante e depois periodicamente (em intervalos de 30 min a 1h), medem-se as temperaturas do destilado (considerada igual à do refluxo), do vapor do topo da coluna, no refeedor, da água de entrada e saída do condensador, e determinam-se as vazões de destilado, e de saída da água do condensador; coletam-se amostras do destilado e do produto no refeedor para determinação da composição; e no caso de operação com refluxo constante, coleta-se uma amostra do pote de destilado para a determinação da composição média do destilado acumulado.

Na operação com refluxo constante, não se altera a vazão de destilado.

Por outro lado, na operação com refluxo variável, deve-se ajustá-lo de modo a manter a composição do destilado constante ao longo da experiência. Como o tempo requerido para a determinação desta composição através do índice de refração provocaria uma defasagem no monitoramento, acompanha-se a temperatura da saída da coluna, e quando esta se eleva, significando a alteração da composição, aumenta-se a taxa de refluxo, diminuindo-se a vazão de destilado de modo que esta temperatura retorne ao valor anterior. Este procedimento gera uma sucessão de comportamentos discretos (“degraus”), pois, na realidade, opera-se em intervalos de refluxo constante com pequenas oscilações da composição do produto; foi adotado esse modo operacional nos ensaios, pois a instalação não permite um ajuste sensível, de modo contínuo, do refluxo durante o experimento. Mas, como a

composição é praticamente constante (a sua variação nesses “degraus” é muito pequena), ao final do ensaio, faz-se uma média das composições medidas ao longo do ensaio.

Na saída do condensador, dispõe-se de um indicador de vazão de destilado qualitativo, conforme descrito anteriormente (ver figura 23). Então, é possível visualizar o aumento ou diminuição da vazão, verificando a altura de nível de líquido no indicador. Ressalta-se que a determinação efetiva da vazão é feita, medindo-se a massa de destilado e o tempo de coleta desta quantidade.

As quantidades retiradas para a determinação da composição são pequenas, em torno de 1 g. No entanto, todas as quantidades são anotadas para serem contabilizadas no balanço de massa.

Para evitar a perda do material coletado até a leitura do índice de refração, todos os frascos contendo as amostras eram tampados imediatamente após a coleta.

Ao término do ensaio, mede-se o índice de refração das amostras a 20°C, e medem-se a quantidade e a composição da mistura restante no balão. Antes das medições do índice de refração, calibra-se o refratômetro com água destilada.

## **4.4 RESULTADOS E DISCUSSÃO**

### **4.4.1 Análise preliminar dos resultados**

Iniciaram-se os ensaios de modo que fosse possível coletar o máximo de informações para posteriores comparações com os dados previstos pelos modelos. Mediram-se as composições do destilado,  $x_D(\theta)$ , e da mistura no refeedor,  $x_W(\theta)$  em função do tempo de ensaio; as temperaturas de refluxo ( $T_r$ ), do líquido do refeedor ( $T_{xW}$ ), e do vapor na saída da coluna ( $T_{oT}$ ); a quantidade de destilado ( $D$ ), as quantidades inicial ( $W_i$ ) e final ( $W_f$ ) de mistura no refeedor; a vazão de destilado

( $\dot{D}$ ), a vazão de vapor ( $\dot{V}_1$ ), a vazão de água de resfriamento do condensador ( $\dot{m}_a$ ); as temperaturas de entrada ( $T_{ea}$ ) e saída ( $T_{sa}$ ) da água; e a pressão atmosférica ( $P$ ).

Realizaram-se quatro ensaios de destilação em batelada, operando com refluxo constante, e os dados obtidos estão apresentados na tabela 5.

Tabela 5 - Dados dos ensaios de destilação operando com refluxo constante.

Dado	Ensaio			
	I	II	III	IV
Re	3	3	4	3
$\dot{D}$ , mol/s	0,000725	0,000615	0,000466	0,000662
$T_r$ , K	298,0	298,1	297,3	295,9
$W_i$ , mol	18,92	12,02	19,57	25,39
$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,854	0,845	0,727	0,935
$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,895	0,846	0,710	0,919
$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,878	0,808	0,639	0,911
$x_D$ ( $\theta_3$ )	-	-	0,584	0,892
$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,845	0,723	0,533	0,877
$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,557	0,534	0,274	0,588
$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,513	0,455	0,224	0,559
$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,473	0,360	0,198	0,536
$x_W$ ( $\theta_3$ )	-	-	0,165	0,496
$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,418	0,254	0,142	0,458
$\dot{V}_1$ , mol/s	0,00288	0,00268	0,00236	0,00268
$\dot{m}_a$ , mol/s	0,908	0,837	0,907	0,719
$T_{ea}$ , K	298,0	298,1	297,3	295,9
$T_{sa}$ , K	299,2	299,7	298,2	297,7
$P$ , mmHg	702,2	701,2	706,2	703,2

Outros quatro ensaios foram realizados para a destilação em batelada, operando com composição de destilado constante e taxa de refluxo variável ( $Re$  ( $\theta$ )), e, na tabela 6, são apresentados os dados coletados durante os ensaios.

Tabela 6 - Dados dos ensaios de destilação operando com composição do destilado constante.

Dado	Ensaio			
	V	VI	VII	VIII
Re ( $\theta_i$ )	2	2	3	3
Re ( $\theta_1$ )	3	2	-	6
Re ( $\theta_2$ )	18	4	-	22
Re ( $\theta_3$ )	-	8	-	-
Re ( $\theta_f$ )	-	9	19	58
Tr, K	297,6	298,2	296,7	295,8
Wi, mol	23,32	21,47	15,20	19,08
$x_D$	0,953	0,952	0,579	0,859
$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,817	0,826	0,207	0,497
$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,763	0,789	-	0,430
$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,694	0,772	-	0,391
$x_W$ ( $\theta_3$ )	-	0,723	-	-
$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,666	0,705	0,157	0,381
$\dot{V}_1$ , mol/s	0,00309	0,00310	0,00238	0,00277
$m_a$ , mol/s	0,478	0,676	1,04	0,499
Tea, K	297,6	298,2	296,7	295,8
Tsa, K	299,5	299,3	297,8	298,4
P, mmHg	704,2	703,4	702,8	705,6

De modo que se pudesse verificar a consistência dos dados dos ensaios para prosseguir com a validação, fez-se um balanço de massa para verificar a porcentagem de perda de massa (mol) em cada ensaio, a qual é apresentada na tabela 7. Calculou-se a porcentagem de perda pela equação (4.4-1), onde  $m_{amostras}$  é a quantidade retirada para cada determinação do índice de refração.

$$\%Perda = \left[ 1 - \left( \frac{Wf + D + \sum m_{amostras}}{Wi} \right) \right] 100 \quad (4.4-1)$$

Tabela 7 - Porcentagem de perda de massa nos ensaios de destilação em batelada.

Ensaio	Perda, %
I	7
II	8
III	4
IV	5
V	7
VI	7
VII	0
VIII	5

Observou-se que a perda de massa era pequena, de no máximo 8%, e, portanto, em relação ao balanço de massa, os ensaios foram aparentemente bem conduzidos.

Para verificar a hipótese H3 (quantidade de líquido retido na coluna desprezível), foram medidas as composições do produto no refeedor no final do ensaio,  $x_W(\theta_n)$ , quando o aquecimento já foi desligado, e imediatamente antes,  $x_W(\theta_{n-1})$ , quando ainda há líquido nos pratos da coluna. Os dois valores são relacionados pela equação (4.2-2), onde  $m_p$  é a massa retida em cada prato e  $x_p$  é a fração molar do metanol no respectivo prato.

$$x_W(\theta_n) = \frac{x_W(\theta_{n-1}) \cdot W(\theta_{n-1}) + \sum x_p m_p}{W(\theta_{n-1}) + \sum m_p} \quad (4.4-2)$$

Constatou-se que a diferença entre os valores de  $x_W(\theta_n)$  e  $x_W(\theta_{n-1})$  é de apenas em torno de 1,5%. Com isso, pode-se admitir que a massa retida na coluna ( $\sum m_p$ ) é pequena, pois praticamente não influenciou na composição no refeedor.

Durante um dado ensaio de destilação em batelada, operando com refluxo constante, foram retiradas amostras do destilado e a partir do respectivo índice de refração, obteve-se a sua composição ( $x_D$ ). Ao mesmo tempo, foi medida a temperatura do vapor de topo ( $To_T$ ), com isso determinou-se a fração molar de metanol ( $x_{DT}$ ) pelo diagrama de temperatura de orvalho versus composição. Estes valores estão apresentados na figura 25.

Apesar de ter menor precisão que o índice de refração para a determinação da composição, pode-se verificar que  $x_{DT}$  possui a mesma tendência que a composição determinada pelo índice de refração ( $x_D$ ).

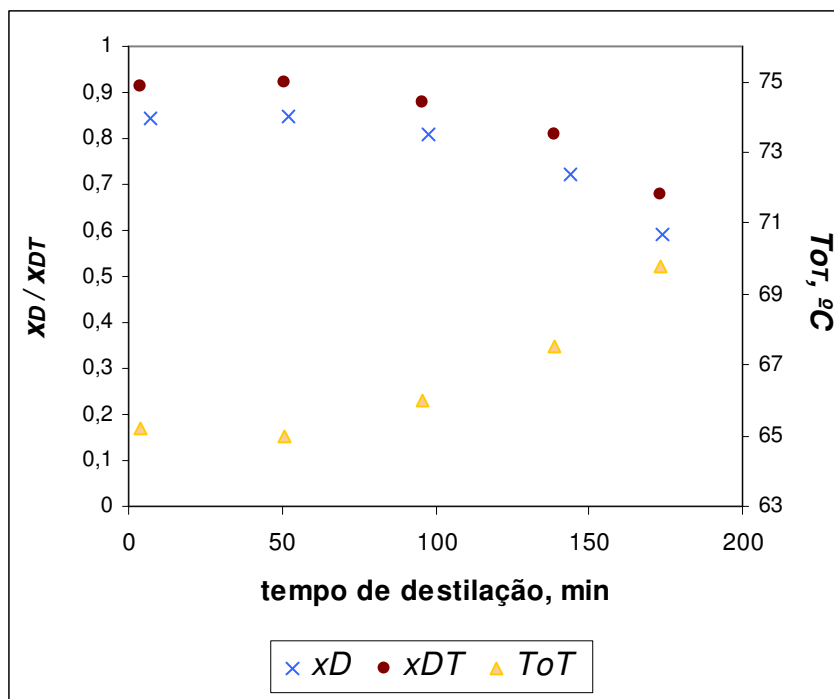


Figura 25 - Variação da composição de destilado ao longo de um ensaio com refluxo constante.

Observa-se, como esperado, o aumento da temperatura do vapor do topo/saída da coluna ao longo do tempo, e a diminuição do teor de metanol no destilado, confirmado através das duas determinações (índice de refração e temperatura de orvalho). Observa-se ainda que há uma discrepância sistemática entre os pares de valores, porém com a mesma tendência. Vale ressaltar que, para os cálculos subsequentes (item 4.4), foi considerado o valor da composição a partir do índice de refração por ser um método mais confiável.

O mesmo procedimento foi feito com o produto de refeedor, desta vez com amostras retiradas do refeedor e, a partir do respectivo índice de refração, obteve-se sua composição ( $x_W$ ). Ao mesmo tempo, foi medida a temperatura da mistura no refeedor ( $T_{X_W}$ ), com isso determinou-se a fração molar de metanol ( $x_{WT}$ ) pelo diagrama de temperatura de bolha versus composição. Estes valores estão apresentados na figura 26. Observa-se, de novo, a existência de uma discrepância entre os pares de valores, mas com a mesma tendência.

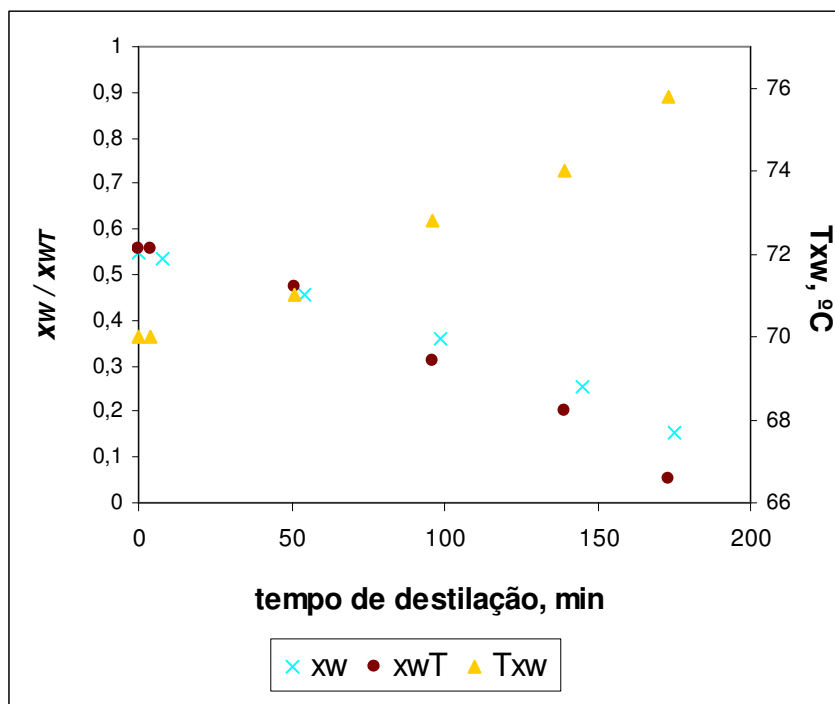


Figura 26 - Variação da composição no refeedor ao longo de um ensaio com refluxo constante.

O mesmo procedimento foi feito para um ensaio de destilação em batelada operando com refluxo variável, mas com composição do destilado constante. A figura 27 apresenta os valores da fração molar de metanol no destilado, e a figura 28, no refeedor.

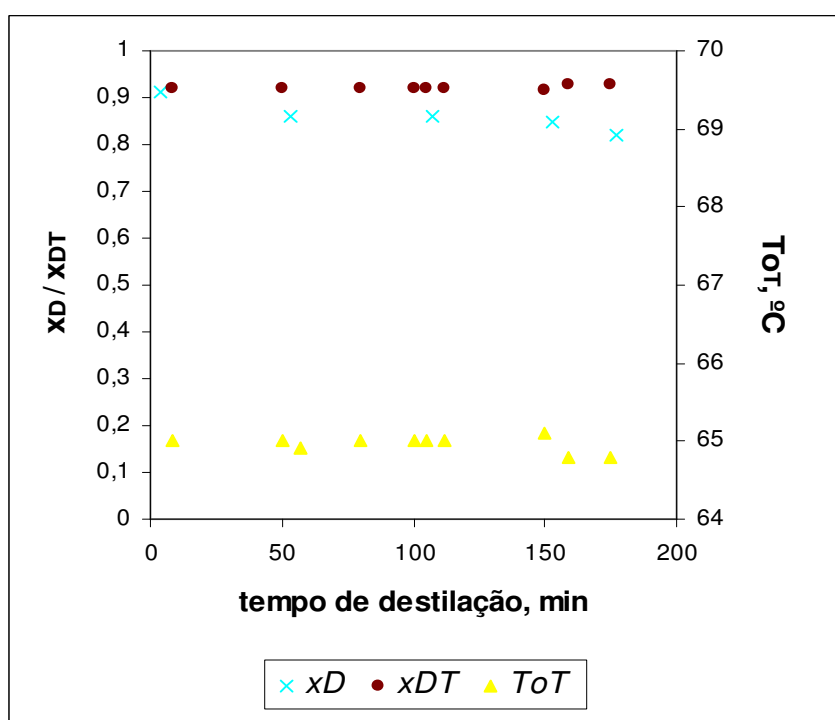


Figura 27 – Acompanhamento da composição de destilado ao longo de um ensaio com refluxo variável.

É possível notar na figura 27 que a composição do destilado é mantida praticamente constante.

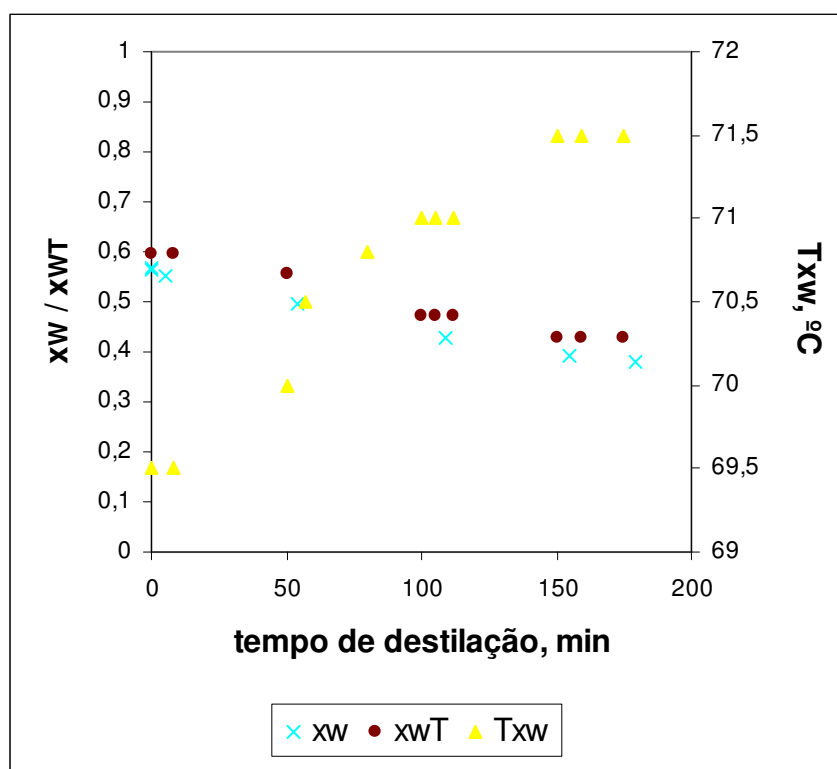


Figura 28 - Variação da composição no retervedor ao longo de um ensaio com refluxo variável.

Observa-se, pela figura 28, a diminuição do teor de metanol no retervedor como no caso anterior.

O destilado sai sub-resfriado do condensador (escoamento contracorrente) cujo fluido de resfriamento é a água. Porém, constatou-se na prática que a temperatura do destilado foi menor que a temperatura de entrada da água. Uma explicação plausível é que, além da troca de calor no condensador propriamente dito, houve um resfriamento subsequente no trajeto até o recipiente de destilado (onde foi medida a sua temperatura). Vale lembrar que a temperatura no laboratório onde foram feitos os ensaios em geral era menor que a da água de resfriamento (ambiente com ajuste de ar condicionado).

Então, para efeito de cálculo, adotou-se o valor da temperatura de refluxo igual à temperatura de entrada da água, que é o limite termodinâmico para o escoamento em contracorrente.

Convém destacar, no entanto, que a influência desta aproximação nos resultados é desprezível, pois a variação de entalpia sensível é pequena (da ordem



de 3%) comparada com a latente (ver os termos entre colchetes no segundo membro da equação (3.5-1)).

#### 4.4.2 Validação experimental do modelo matemático

A validação foi realizada, comparando-se os dados obtidos experimentalmente com os dados previstos pelo modelo. Foram considerados, para ambos os modos de operação, o tempo de destilação, a quantidade de destilado e de mistura no refeedor, o número de estágios ideais, a vazão de água de resfriamento necessária no condensador, e no caso da destilação com refluxo constante, também a composição média do destilado acumulado. Estas foram as variáveis viáveis de determinação experimental.

As diferenças entre os valores experimentais e os previstos pelo modelo foram expressas em forma de porcentagem e foram calculadas, subtraindo-se o valor experimental do valor previsto, dividindo-se pelo valor previsto, e multiplicando-se por cem. E as variáveis comparadas nos instantes 1, 2, 3 e final de um ensaio de destilação são expressas como:  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $v_3$ , e  $v_f$ , e essas variáveis são o tempo de destilação ( $\theta$ ), a quantidade de destilado ( $D$ ), a composição média do destilado acumulado  $\bar{x}_D$ , e a quantidade de mistura no refeedor ( $W$ ).

Apresentar-se-ão a seguir as comparações das variáveis dos ensaios de destilação em batelada operando com refluxo constante (ensaio de I a IV), e posteriormente, da operação com composição do destilado constante (ensaio de V a VIII).

A primeira variável comparada foi o tempo de destilação, a tabela 8 apresenta os tempos parciais e totais dos ensaios com refluxo constante.

Tabela 8 - Comparação dos tempos parciais e totais de destilação em batelada operando com refluxo constante obtidos experimentalmente, e previstos pelo modelo.

Ensaio		$\theta_1$ , s	$\theta_2$ , s	$\theta_3$ , s	$\theta_f$ , s
I	Experimental	2760	5100	-	<b>7980</b>
	Previsto	3133	5324	-	<b>7917</b>
	Diferença, %	12	4	-	<b>-1</b>
II	Experimental	3300	5940	-	<b>8520</b>
	Previsto	2523	5946	-	<b>8291</b>
	Diferença, %	-31	0,1	-	<b>-3</b>
III	Experimental	2940	5940	8220	<b>9600</b>
	Previsto	3060	6005	8317	<b>10186</b>
	Diferença, %	4	1	1	<b>6</b>
IV	Experimental	3060	5220	8100	<b>10260</b>
	Previsto	2923	5054	7881	<b>10254</b>
	Diferença, %	-5	-3	-3	<b>-0,1</b>

Observou-se que a diferença encontrada entre os valores previsto e experimental para o tempo de destilação total ( $\theta_f$ ) era pequena, de até 6%.

Outro dado comparado foi a quantidade de destilado, e os valores obtidos e as diferenças entre os valores experimentais e previstos pelo modelo são apresentados na tabela 9. As diferenças não foram maiores que 14%.

Tabela 9 - Comparação das quantidades de destilado parciais e totais de destilação em batelada operando com refluxo constante obtidas experimentalmente, e previstas pelo modelo.

Ensaio		D1, mol	D2, mol	D3, mol	Df, mol
I	Experimental	-	4,10	-	<b>6,02</b>
	Previsto	-	3,86	-	<b>5,74</b>
	Diferença, %	-	-6	-	<b>-5</b>
II	Experimental	1,57	3,66	-	<b>5,09</b>
	Previsto	2,42	4,35	-	<b>5,93</b>
	Diferença, %	35	16	-	<b>14</b>
III	Experimental	1,43	2,80	3,88	<b>4,75</b>
	Previsto	1,94	2,91	4,12	<b>4,99</b>
	Diferença, %	27	4	6	<b>5</b>
IV	Experimental	1,93	3,35	5,22	<b>6,79</b>
	Previsto	2,01	3,45	5,61	<b>7,35</b>
	Diferença, %	4	3	7	<b>8</b>

No caso da destilação em batelada operando com refluxo constante, a composição do destilado vai sendo alterada durante a destilação, e, portanto pode-

se comparar a composição média do destilado acumulado obtida experimentalmente e a prevista pelo modelo. Observando-se a tabela 10, pode-se notar que a diferença para a composição final ( $\bar{x}_D f$ ) foi de no máximo 1%.

Tabela 10 - Comparação da composição do destilado para destilação com refluxo constante obtida experimentalmente, e prevista pelo modelo.

Ensaio		$\bar{x}_D 1$	$\bar{x}_D 2$	$\bar{x}_D 3$	$\bar{x}_D f$
I	Experimental	-	-	-	-
	Previsto	-	-	-	-
	Diferença, %	-	-	-	-
II	Experimental	-	0,730	-	-
	Previsto	-	0,840	-	-
	Diferença, %	-	13	-	-
III	Experimental	0,696	-	0,659	<b>0,668</b>
	Previsto	0,727	-	0,682	<b>0,660</b>
	Diferença, %	4	-	3	<b>-1</b>
IV	Experimental	0,923	0,916	0,904	<b>0,909</b>
	Previsto	0,927	0,922	0,914	<b>0,907</b>
	Diferença, %	0,5	0,6	1,1	<b>-0,2</b>

Também se comparou a quantidade de mistura restante no refeedor, e a diferença foi de no máximo 13%, como é mostrada na tabela 11.

Tabela 11 - Comparação da quantidade de mistura restante no refeedor na destilação com refluxo constante obtida experimentalmente, e prevista pelo modelo.

Ensaio		<b>Wf, mol</b>
I	Experimental	<b>11,48</b>
	Previsto	<b>13,18</b>
	Diferença, %	<b>13</b>
II	Experimental	<b>5,86</b>
	Previsto	<b>6,09</b>
	Diferença, %	<b>4</b>
III	Experimental	<b>13,74</b>
	Previsto	<b>14,58</b>
	Diferença, %	<b>6</b>
IV	Experimental	<b>17,34</b>
	Previsto	<b>18,04</b>
	Diferença, %	<b>4</b>

Conforme visto no item 5.5.3, no modo de operação com refluxo variável, a

sua variação foi feita de modo discreto (alteração por degraus em intervalos de tempo definidos). Então, calculou-se o tempo de cada intervalo, utilizando o modelo de refluxo constante, e somaram-se todos os intervalos, obtendo-se o tempo total de destilação, conforme apresentado na tabela 12 (previsto RC). O tempo calculado desta forma é próximo do obtido experimentalmente, com diferença máxima de 5%. Por outro lado, foi calculado este tempo de destilação através do modelo de destilação com refluxo variável (previsto RV na tabela 12). Pode-se observar que este tempo difere do experimental significativamente, o que é de se esperar, pois os ensaios foram conduzidos como uma sucessão de etapas, operando com refluxo constante.

Tabela 12 - Comparação dos tempos parciais e totais de destilação em batelada operando com composição do destilado constante obtidos experimentalmente, e previstos pelo modelo.

Ensaio		$\theta_1$ , s	$\theta_2$ , s	$\theta_3$ , s	$\theta_f$ , s
V	Experimental	5820	10800	-	<b>14880</b>
	Previsto RC	5414	10003	-	<b>14429</b>
	Diferença RC, %	-7	-8	-	<b>-3</b>
	Previsto RV	8239	14274	-	<b>15924</b>
	Diferença RV, %	29	24	-	<b>7</b>
VI	Experimental	2460	3540	8100	<b>10680</b>
	Previsto RC	2164	3048	7601	<b>10597</b>
	Diferença RC, %	-14	-16	-7	<b>-1</b>
	Previsto RV	7573	10381	17047	<b>19304</b>
	Diferença RV, %	68	66	52	<b>45</b>
VII	Experimental	-	-	-	<b>3000</b>
	Previsto RC	-	-	-	<b>2865</b>
	Diferença RC, %	-	-	-	<b>-5</b>
	Previsto RV	-	-	-	<b>3922</b>
	Diferença RV, %	-	-	-	<b>24</b>
VIII	Experimental	3300	6060	-	<b>7740</b>
	Previsto RC	3350	5872	-	<b>7342</b>
	Diferença RC, %	1	-3	-	<b>-5</b>
	Previsto RV	7745	10131	-	<b>10898</b>
	Diferença RV, %	57	40	-	<b>29</b>

A tabela 13 apresenta a comparação da quantidade de destilado prevista pelo modelo e obtida experimentalmente. Uma vez que o cálculo desta quantidade é feito da mesma forma nos dois modos de operação, não foi necessário fazer a distinção entre os valores previstos pelo modelo de refluxo constante e pelo modelo de composição do destilado constante.

A quantidade de destilado coletada ao longo do ensaio é medida através de pesagem (método direto), mas, por outro lado, esta quantidade final pode ser obtida através de um segundo modo (método indireto), pela diferença entre as quantidades inicial e final no refeedor. Os valores obtidos nos ensaios realizados estão apresentados na tabela 13, assim como os respectivos resultados previstos pelo modelo. Nota-se, que a diferença entre o valor previsto e o experimental pelo modo indireto é menor (de no máximo 10%), ao passo que a discrepância em relação ao valor medido diretamente foi um pouco maior (14 a 27%). Este fato pode ser explicado pela evaporação do destilado durante o ensaio, o que não ocorre para o produto remanescente no refeedor considerado no método indireto.

Tabela 13 - Comparação das quantidades de destilado parciais e totais de destilação com composição do destilado constante obtidas experimentalmente, e previstas pelo modelo.

Ensaio		D1, mol	D2, mol	D3, mol	Df, mol
V	Previsto	6,59	11,07	-	<b>12,26</b>
	Experimental (método direto)	5,88	9,49	-	<b>10,21</b>
	Diferença (método direto), %	11	14	-	<b>17</b>
	Experimental (método indireto)	-	-	-	<b>11,84</b>
	Diferença (método indireto), %	-	-	-	<b>3</b>
VI	Previsto	4,81	6,38	9,61	<b>10,47</b>
	Experimental (método direto)	2,81	3,78	6,81	<b>7,81</b>
	Diferença (método direto), %	41	41	29	<b>25</b>
	Experimental (método indireto)	-	-	-	<b>9,44</b>
	Diferença (método indireto), %	-	-	-	<b>10</b>
VII	Previsto	-	-	-	<b>1,79</b>
	Experimental (método direto)	-	-	-	<b>1,54</b>
	Diferença (método direto), %	-	-	-	<b>14</b>
	Experimental (método indireto)	-	-	-	<b>1,79</b>
	Diferença (método indireto), %	-	-	-	<b>0</b>
VIII	Previsto	3,00	4,34	-	<b>4,66</b>
	Experimental (método direto)	2,25	3,24	-	<b>3,42</b>
	Diferença (método direto), %	25	25	-	<b>27</b>
	Experimental (método indireto)	-	-	-	<b>4,72</b>
	Diferença (método indireto), %	-	-	-	<b>-1</b>

Na destilação com refluxo variável, em princípio, a composição do destilado é mantida constante ao longo do tempo. Mas nos ensaios realizados, devido ao ajuste da vazão do destilado, houve pequenas oscilações deste valor (desvio em torno de 3%). Com isso, no cálculo da quantidade de mistura restante no refeedor previsto pelo modelo (ver tabela 14), adotou-se o valor médio encontrado em cada ensaio.

Tabela 14 - Comparação da quantidade de mistura restante no refeedor nos ensaios de destilação com composição do destilado constante obtida experimentalmente, e prevista pelo modelo.

Ensaio		<b>Wf, mol</b>
V	Experimental	<b>11,48</b>
	Previsto	<b>11,06</b>
	Diferença, %	<b>-4</b>
VI	Experimental	<b>12,03</b>
	Previsto	<b>11,00</b>
	Diferença, %	<b>-9</b>
VII	Experimental	<b>13,42</b>
	Previsto	<b>13,41</b>
	Diferença, %	<b>-0,04</b>
VIII	Experimental	<b>14,36</b>
	Previsto	<b>14,42</b>
	Diferença, %	<b>0,4</b>

Observando-se a tabela 14, nota-se que a diferença não é superior a 9%.

Em todos os ensaios de destilação em batelada, determinou-se pelo modelo o número de estágios ideais, apresentado na tabela 15.

Tabela 15 - Número de estágios ideais obtidos nos ensaios de destilação em batelada operando com refluxo constante e com composição do destilado constante.

Ensaio	Número de estágios ideais
I	9
II	8
III	10
IV	10
V	8
VI	9
VII	5
VIII	6

Notou-se que o número de estágios ideais era maior que os disponíveis na instalação experimental (cinco pratos reais e o refeedor, em geral considerado como estágio ideal). Então, surgiu a hipótese de que, após o prato de topo, poderia ocorrer separação, já que o trajeto que o vapor percorre até o condensador é relativamente extenso (em relação à diferença de altura entre pratos), propiciando uma razoável área de contato (ver figura 22).

Com o objetivo de verificar esta hipótese, inseriu-se uma seringa no prato do topo da coluna, mostrada na figura 29, para a coleta de uma amostra e

determinação da composição de metanol naquele ponto, e este valor foi comparado à composição do destilado propriamente dito.

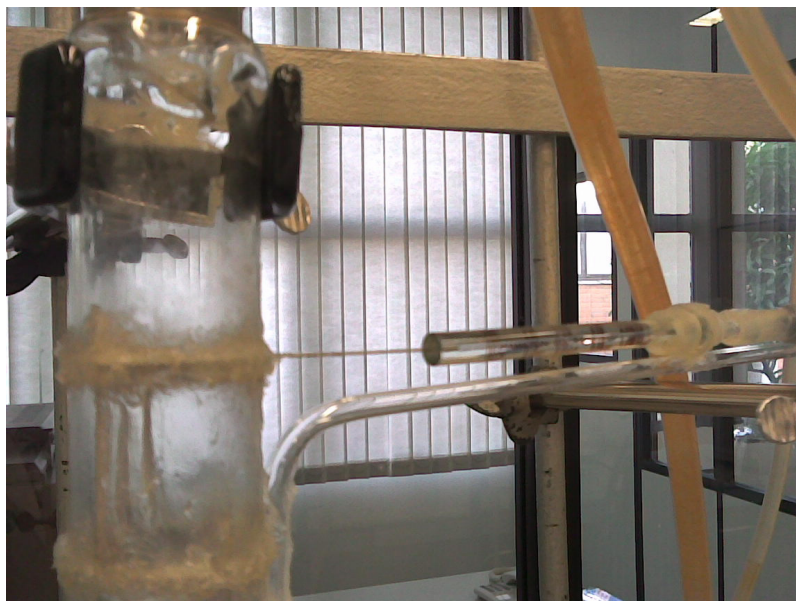


Figura 29 - Fotografia da seringa posicionada no prato de topo.

Realizaram-se três ensaios com diferentes composições da mistura de carga, operando com refluxo total. Em cada ensaio, foram coletadas amostras do refervedor, do prato de topo, e do destilado por três vezes, fez-se uma média da fração molar de metanol em cada ponto, e calcularam-se os números de estágios ideais, pelo método McCabe-Thiele, existentes entre o refervedor e o prato de topo, e entre o refervedor e o condensador. Os resultados são apresentados na tabela 16.

Tabela 16 - Determinação do número de estágios ideais existentes na instalação de destilação em batelada, operando com refluxo total.

Amostra	Fração molar de metanol	Número de estágios ideais entre o refervedor e o prato do topo	Número de estágios ideais entre o refervedor e o condensador
Destilado	0,790		
Prato do topo	0,696	5	6
Refervedor	0,213		
Destilado	0,933		
Prato do topo	0,862	5	7
Refervedor	0,536		
Destilado	0,965		
Prato do topo	0,958	6	7
Refervedor	0,847		

Notou-se que a fração molar de metanol no destilado era maior que a do prato do topo da coluna, indicando, portanto, que há separação também acima do prato de topo, e que esta separação corresponde a um acréscimo de 1 a 2 estágios ideais (operando com refluxo total). Mas, o número de estágios ideais previsto pelo modelo, de modo geral, resultou ainda maior que o disponível na instalação experimental, mesmo contando com o dispositivo de contato suplementar após o prato de topo. E sendo assim, o número de estágios ideais calculado não pode ser considerado um parâmetro de validação do modelo.

Mas, levando em conta as demais variáveis consideradas na verificação, pode-se admitir que o modelo matemático desenvolvido reproduz as condições práticas, sendo, em princípio, adequado para a realização das simulações matemáticas, desconsiderando-se os fatores na extrapolação de escala.

#### **4.5 CONSIDERAÇÕES SOBRE A PARTE EXPERIMENTAL E VALIDAÇÃO DO MODELO**

De modo geral, pode-se dizer que a operação de destilação em batelada com refluxo constante é mais fácil que a com composição de destilado constante, e, portanto, do primeiro modo, obtiveram-se resultados mais próximos ao previsto pelo modelo. Por conseguinte, a diferença maior encontrada com o segundo modo de operação (composição de destilado constante) pode ser devida, em parte, à dificuldade operacional na instalação utilizada em laboratório.

Já que as diferenças encontradas entre os valores das variáveis de processo previstos pelo modelo matemático e os obtidos experimentalmente foram, de modo geral, relativamente pequenas, pode-se admitir o modelo validado para a instalação de laboratório usada nos ensaios. Por outro lado, não serão considerados os efeitos de extrapolação de escala, e este modelo será utilizado para simulações matemáticas em escala industrial.

Um outro aspecto que dá algum suporte à consistência da modelagem matemática feita neste trabalho é a sua solução através da planilha eletrônica, obtendo-se resultados de modo robusto e único, o que mostra compatibilidade entre



o número de equações e de variáveis dependentes calculadas pelo modelo (grau de liberdade igual a zero).

Além disso, uma outra verificação foi feita. Em Kister (1992), há três exemplos resolvidos (com valores numéricos), envolvendo parte do modelo desenvolvido no presente estudo (apenas a parte de balanços de massa), com uma mistura binária composta de benzeno e tolueno. Adotando-se os dados de entrada desses três exemplos que envolvem tanto a destilação com refluxo constante como composição de destilado constante, compararam-se os resultados de Kister (1992) com os calculados pelo modelo deste trabalho, e, de novo, encontrou-se uma boa consistência.

## 5 ESTIMATIVA DOS CUSTOS DE OPERAÇÃO E EQUIPAMENTOS

Além da análise técnica dos modos de operação de destilação em batelada, também serão comparados os aspectos econômicos. As estimativas dos custos são divididas em custos operacionais e custos de equipamentos.

### 5.1 CONSIDERAÇÃO SOBRE A PARTE ECONÔMICA

Neste item, serão descritos alguns aspectos necessários para o entendimento dos critérios dos cálculos de custos e lucros, adotados neste trabalho.

Considera-se como o tempo total de uma batelada a somatória do tempo de carga, aquecimento, destilação propriamente dita, resfriamento, descarga, e espera (entre um lote e outro). Adotou-se um tempo fixo de espera igual a uma hora, o tempo de destilação é o tempo calculado conforme descrito no modelo matemático, e os demais tempos foram agrupados, e estimados proporcionalmente em função da carga, ou seja, multiplicando-se a quantidade carregada em kmol por 40 s/kmol (valor adotado).

Ao longo de uma batelada, as áreas necessárias do condensador e do refeedor podem variar, já que, em alguns casos, a vazão de vapor que deixa a coluna não é constante ao longo de uma dada batelada. Nesses casos, serão considerados os valores das áreas máximas necessárias, de modo que se atenda a demanda na “pior situação”.

As áreas de troca de calor do condensador e do refeedor são funções dos coeficientes globais de troca térmica,  $U_c$  e  $U_r$ , respectivamente. Para este estudo, foram considerados valores constantes, iguais a  $850 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  para  $U_c$  e  $1800 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  para  $U_r$  (OPPENHEIMER; SØRENSEN, 1997)

Na estimativa dos custos de utilidades (vapor de aquecimento e água de resfriamento), serão necessários os valores médios das suas vazões. A vazão média é calculada pela relação entre a quantidade total consumida num dado lote pela duração correspondente a essa batelada.

As referências consultadas para as estimativas dos custos de equipamentos apresentam os valores em dólar. Neste trabalho, utilizou-se, na taxa de conversão, o valor de R\$ 1,6/US\$.

A produção de metanol é determinada a partir da fração molar de metanol multiplicada pela quantidade destilada ( $x_D \cdot D$ ).

O valor deste destilado adotou-se igual a R\$ 240 /kmol de metanol, o que é equivalente a cerca de R\$ 6/kg.

Neste estudo, não se consideraram os custos de montagem e manutenção da instalação nem das infra-estruturas de utilidades, apenas os referentes aos seus consumos na operação. Também não foram considerados juros, impostos, financiamentos e taxas.

Também não são levados em conta, nos estudos de casos feitos, o valor agregado no resíduo final da destilação nem a sua eventual redestilação.

Porém, vale ressaltar que, a pesar destas simplificações, como se trata de um estudo comparativo, não se invalidam, em princípio, as tendências encontradas nem os resultados de comparação (pode haver uma distorção de valores absolutos).

## 5.2 ESTIMATIVA DOS CUSTOS OPERACIONAIS

Consideraram-se como custos operacionais os de mão de obra, do vapor de aquecimento no refeedor e da água de resfriamento no condensador. Os índices de custo adotados são apresentados na tabela 17.

Tabela 17- Índices de custos operacionais adotados.

Item	Índice de custo
mão de obra	4,00 R\$/h.pessoa
vapor de aquecimento	0,08 R\$/kg*, **
água de resfriamento	0,23 R\$/m <sup>3</sup> **

Fonte: \*EVARISTO; FIGUEIREDO, 2008

\*\*ROSSI, 2005

Para todos os casos abordados, considerar-se-ão necessárias três pessoas para a realização das operações.

Os custos operacionais por hora são calculados, multiplicando-se a vazão média de consumo de vapor ou água pelo seu respectivo índice, e no caso da mão de obra multiplicando-se a quantidade de pessoas envolvidas na operação pelo índice. Já o custo por batelada é obtido, multiplicando-se o custo por hora pelo tempo de destilação para vapor e água; ou multiplicando-se o custo por hora da mão de obra pelo tempo total da batelada.

### 5.3 ESTIMATIVA DOS CUSTOS DOS EQUIPAMENTOS

Os cálculos dos custos do condensador e do refeedor foram realizados utilizando a equação (5.3-1) (BAASEL, 1990):

$$\text{custo do equipamento} = \text{custo base} (F_d + F_p) F_m \quad (5.3-1)$$

onde o custo base é dado por:

$$\text{custo base} = \text{custo unitário} (\text{área})^{0,64} \quad (5.3-2)$$

Adotou-se, para o custo unitário, o valor de U\$1082,00 (BAASEL, 1990) tanto para o condensador quanto para o refeedor; este valor refere-se a aço inoxidável como material de construção do equipamento, e a área de troca térmica é dada em ft<sup>2</sup>.

O custo do equipamento (em U\$) também é função de seu tipo, representado pelo fator  $F_d$  (para o refeedor,  $F_d$  é igual a 1,35, e para um condensador, é igual a 1), é função da pressão, representada pelo fator  $F_p$  (que é igual a 0 para pressões de até 150 psia), e é função ainda do material de construção do casco/tubo, representado pelo fator  $F_m$ , que, para aço inoxidável, é apresentado na tabela 18, uma vez que é relacionado à área (BAASEL, 1990).

Tabela 18 – Valores dos fatores para trocadores de calor construídos de aço inoxidável.

Área, ft <sup>2</sup>	F <sub>m</sub>
Até 100	2,50
100 a 500	3,10
500 a 1000	3,26
1000 a 5000	3,75
5000 a 10000	4,50

Fonte: BAASEL, 1990.

O custo do casco da coluna de destilação foi estimado, utilizando o método proposto por TURTON et al., 1998:

$$\text{custo da coluna} = \text{custo base} ( B_1 + B_2 F_M F_P ) \quad (5.3-3)$$

onde o custo base refere-se ao de uma coluna, operando a pressão atmosférica, e é obtido por:

$$\log \text{custo base} = K_1 + K_2 \log H_{col} + K_3 (\log H_{col})^2 \quad (5.3-4)$$

Os fatores  $K_1$ ,  $K_2$  e  $K_3$  dependem do diâmetro da coluna (ver tabela 19). Os fatores são válidos para colunas com altura de até 50 m e diâmetro de até 4 m. E  $H_{col}$  é igual à altura da coluna em metros.

Tabela 19 – Fatores para cálculo do custo do casco da coluna.

Diâmetro (m)	$K_1$	$K_2$	$K_3$
0,3	3,3392	0,5538	0,2851
0,5	3,4746	0,5893	0,2053
1,0	3,6237	0,5262	0,2146
1,5	3,7559	0,6361	0,1069

(continua)

(continuação)

Diâmetro (m)	$K_1$	$K_2$	$K_3$
2,0	3,9484	0,4623	0,1717
2,5	4,0547	0,4620	0,1558
3,0	4,110	0,6094	0,0490
4,0	4,3919	0,2859	0,1842

Fonte: TURTON et al., 1998.

Para o fator  $K_1$ , realizou-se uma regressão dos dados tabelados, resultando na equação:

$$K_1 = -0,0238.d^2 + 0,3721.d + 3,264 \quad (5.3-5)$$

onde  $d$  é o diâmetro da coluna dado em m.

Os valores dos fatores  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $F_M$  e  $F_P$  da equação (5.3-3) estão apresentados na tabela 20, a seguir.

Tabela 20 – Fatores utilizados no cálculo do custo do casco da coluna de destilação.

	Fator	Aplicação
$B_1$	1,62	Vaso horizontal
$B_2$	1,47	Vaso horizontal
$F_M$	1,00	Construído de aço inoxidável
$F_P$	4,0	Pressão atmosférica

Fonte: TURTON et al., 1998.

O diâmetro da coluna,  $d$ , foi estimado, de modo simplificado, em função da vazão de vapor que passa pela coluna:

$$d = \sqrt{\frac{4\dot{\phi}}{\pi V_s}} \quad (5.3-6)$$

onde  $\dot{\phi}$  é a vazão volumétrica calculada, dividindo-se a vazão mássica de vapor que passa pela coluna pela densidade média da mistura do metanol e etanol. Adotou-se, por simplificação, um valor fixo para a velocidade superficial do vapor pela coluna,  $V_s$ , igual a 0,8 m/s (valor típico em condições normais).

Adotando-se um valor fixo para o espaçamento entre os pratos perfurados de 0,6 m, a altura da coluna,  $H_{col}$ , é calculada em função do número de pratos reais (N/E), acrescido de 1 m (valor arbitrário) como “folga”, conforme a equação (5.3-7):

$$H_{col} = 0,6 * ( N / E + 1 ) + 1 \quad (5.3-7)$$

onde  $N$  é o número de pratos ideais e  $E$  é a eficiência global da coluna, adotada igual a 0,7 (valor típico) neste estudo.

O custo do prato da coluna de destilação é calculado por (BAASEL, 1990):

$$custo\ do\ prato = custo\ base( F_s + F_i + F_{mc} ) \quad (5.3-8)$$

onde o custo base é calculado em função do diâmetro do prato, apresentado na tabela 21, o fator  $F_s$  é função dos espaçamentos entre os pratos, o fator  $F_i$  é função do tipo de prato, e o fator  $F_{mc}$  é função do material de construção do prato.

Tabela 21 – Custo base do prato em função de seu diâmetro.

Diâmetro (m)	Custo base (US\$)
3,0	558
2,7	484
2,4	394
2,1	297
1,8	208
1,5	148
1,2	96

(continua)

(continuação)

Diâmetro (m)	Custo base (US\$)
0,9	78
0,6	51

Fonte: BAASEL, 1990

Com os dados da tabela 21, realizou-se uma regressão matemática, e o custo base pode ser obtido pela equação (5.3-9).

$$\text{custo base} = 62,219.d^2 - 9,3405.d + 27,567 \quad (5.3-9)$$

sendo o custo base em US\$ e o diâmetro, em m, conforme indicados na tabela 21.

Os valores dos demais fatores da equação (5.3-8) admitidos para os cálculos estão apresentados na tabela 22.

Tabela 22 – Fatores utilizados no cálculo do custo dos pratos da coluna de destilação.

	Fator	Aplicação
$F_s$	1	Espaçamento de 24 in. (0,60 m)
$F_i$	0	Prato perfurado
$F_{mc}$	1,7	Construído de aço inoxidável

Fonte: BAASEL, 1990

Então, o custo dos pratos é calculado, multiplicando-se o número de pratos reais, dado pela relação N/E da equação (5.3-7), pelo respectivo custo unitário, estimado pela equação (5.3-8).

A estimativa do custo dos equipamentos “por hora” é relativamente complexa. Envolve, além dos valores de aquisição em si, os custos de projeto, montagem, infra-estrutura, custos financeiros, valores da taxa de juros, vida útil deles etc. No entanto, como isso está além do escopo do presente trabalho, o custo horário dos equipamentos foi estimado, de modo simplista, pela equação (5.3-10), adotando-se um tempo de depreciação de 10 anos, operando em 12 meses/ano e por 720



horas/mês.

$$\text{custo do equipamento ( R\$ / h )} = \frac{\text{custo do equipamento ( R\$ )}}{10 \times 12 \times 720} \quad (5.3-10)$$

As comparações dos modos de destilação estudados foram feitas, observando os custos por hora e por batelada, e o lucro mensal.

O lucro mensal é calculado da seguinte forma:

$$\text{Lucro mensal} = \text{receita mensal} - \text{custo mensal} \quad (5.3-11)$$

onde a receita mensal é igual ao valor unitário do destilado multiplicado pela produção mensal, que é obtida, por sua vez, multiplicando-se a produção por batelada pelo número de bateladas; e o número de bateladas por mês é igual ao número de horas por mês (720 h) dividido pela duração total de uma batelada. E o custo mensal é igual ao custo por batelada multiplicado pelo número de bateladas.

## 6 ANÁLISE DOS RESULTADOS DE SIMULAÇÃO

Neste capítulo, apresentam-se os estudos de casos, feitos a partir de simulações matemáticas do modelo desenvolvido.

Os estudos são subdivididos em três cenários: instalação existente (“rating”), coluna existente, mas com a substituição do condensador e do refeedor (“revamping”), e projeto de uma instalação (“design”) com coluna nova e trocadores de calor novos, e em cada cenário, são estudadas variantes num dado modo de destilação (intramodo) ou comparados modos diferentes (entre modos).

Os estudos serão designados por RC-I, RC-II etc. quando se tratam de análise intramodo de processos com refluxo constante. Para os de refluxo variável, serão nomeados de RV-I, RV-II etc. e, para os estudos de comparação entre modos distintos, usa-se a notação de C-I, C-II etc.

Os modos de operação possíveis de simulação são: com taxa de refluxo constante (RC) ou com composição do destilado constante (refluxo variável, portanto), sendo que o segundo pode ser obtido, mantendo-se a vazão de destilado constante (RV-DC), ou mantendo-se a vazão do vapor que deixa a coluna constante (RV-V1C).

As principais premissas dos estudos de casos estão apresentadas a seguir:

- Os valores dos coeficientes globais de troca térmica no condensador ( $U_c$ ) e no refeedor ( $U_r$ ) são considerados constantes durante a batelada e em todos os casos estudados, com valores iguais a  $850 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  e  $1800 \text{ W/m}^2 \text{ K}$  respectivamente (OPPENHEIMER; SØRENSEN, 1997);
- A temperatura do refluxo da coluna, durante a batelada em todos os casos estudados, foi adotada igual a  $323 \text{ K}$ ;
- A pressão do vapor de aquecimento é constante durante a batelada, igual a  $300 \text{ kPa}$  (absoluta) em todos os casos estudados;
- As temperaturas da água de resfriamento na entrada e na saída do condensador também são fixas, com valores iguais a  $301 \text{ K}$  e  $311 \text{ K}$  respectivamente;
- A demanda pelo produto destilado é ilimitada, ou seja, tudo que é produzido é

vendido;

- O tempo de depreciação dos equipamentos é de 10 anos;
- O produto de interesse é o metanol;
- Para os cálculos do custo da coluna, considerou-se um valor de eficiência global da coluna de 70%;
- Não se consideram custos de montagem da instalação;
- Não se consideram custos das infra-estruturas de utilidades;
- Não são levados em conta, nos estudos de casos feitos, o valor agregado no resíduo final da destilação nem a sua eventual redestilação.

As outras considerações feitas estão comentadas anteriormente (ver 3.1 e 5.1).

Como critérios de análise em cada caso estudado, são considerados diversos parâmetros de comparação.

O tempo de destilação, para uma dada produção, interessa ser o menor possível. Para tanto, se a quantidade de destilado é fixa, a sua vazão deve ser a mais alta possível. Assim, o número de lotes que pode ser produzido por mês será maior e, com isso, a receita será maior.

Para se obter uma maior produção de metanol (produto desejado) no destilado, a sua quantidade no resíduo final da destilação deve ser a mínima possível. Por outro lado, vale ressaltar que, no caso de destilação com refluxo constante, a pureza do produto destilado diminui ao longo do processo. Então, deve-se interromper o processo quando se atinge a composição mínima desejada no destilado acumulado, isto é, a quantidade de produto remanescente no refeedor não pode violar essa especificação.

Para um dado processo, convém que as vazões da água de resfriamento e do vapor de aquecimento sejam baixas, assim como os seus consumos, reduzindo assim os custos operacionais da destilação. Analogamente, para um menor custo dos equipamentos, é interessante, para uma dada produção, que o número de estágios de separação da coluna e as áreas do condensador e do refeedor necessárias sejam as menores possíveis.

Uma melhor separação pode ser conseguida tanto graças a uma taxa de refluxo mais alta como através de um maior número de estágios de separação.

Quando se trabalha com uma taxa de refluxo maior, necessitam-se de menos pratos ideais, mas, por outro lado, de maiores áreas do condensador e do refeedor. Além disso, as vazões da água de resfriamento e do vapor de aquecimento, assim como os respectivos consumos, terão de ser mais altas, quando se opta por uma operação sob refluxo maior. Nos estudos, a seguir, serão analisados esses aspectos para os diversos modos de destilação.

Portanto, para contemplar todos os parâmetros citados, o critério final de comparação dos modos operacionais consiste em se atingir o máximo lucro mensal.

Então, estudou-se para instalações existentes e para o projeto de novos trocadores de calor ou novas instalações:

- a influência da quantidade de mistura carregada no refeedor
- a influência da vazão de destilado
- a influência do aumento da taxa de refluxo
- a influência do aumento das dimensões da instalação

Na tabela 23, estão relacionados todos os casos estudados no presente trabalho, com as suas características principais, subdivididos nos três cenários mencionados. Nos estudos de “rating”, os casos comparados têm o mesmo número de estágios ideais, mesma área de troca térmica no condensador, e mesma área de troca térmica no refeedor; nos estudos de “revamping”, os casos comparados têm número de estágios ideais iguais; e no estudos de “design”, o número de estágios e as áreas são diferentes.

Tabela 23 – Relação dos estudos de casos.

Estudo	Cenário	Principal variável estudada	Parâmetros fixos	Finalidade
RC-I	Rating	Carga inicial	$x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, R_e, x_D$	Produtividade
RC-II	Rating	Taxa de refluxo	$W_i, x_{wi}, x_{wf}$	Produto mais puro
RC-III	Rating	Taxa de refluxo	$x_D, W_b, x_{wi}$	Redução da quantidade de metanol residual
RV-I	Rating	Carga inicial	$x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, R_{e\text{ inicial}}, x_D$	Produtividade

(continua)

(continuação)

Estudo	Cenário	Principal variável estudada	Parâmetros fixos	Finalidade
RV-II	Rating	Taxa de refluxo inicial e final	$W_i, x_{wi}, x_{wf}$	Produto mais puro
RV-III	Rating	Variação da taxa de refluxo em função do tempo de destilação	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, R_e \text{ inicial}, D, W_f, x_D$	Produtividade
C-I	Rating	Modo operacional (influência do $x_D$ )	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, x_D$	Maior lucro mensal
C-II	Rating	Modo operacional	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, x_D$	Maior lucro mensal
C-III	Rating	Modo operacional	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, x_D$	Maior lucro mensal
RC-IV	Revamping	Vazão de destilado	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, R_e, D, W_f, x_D$	Produtividade
RV-IV	Revamping	Vazão de destilado	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, R_e, D, W_f, x_D$	Produtividade
C-IV	Revamping	Modo operacional (influência de $\dot{D}$ )	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, x_D$	Maior lucro mensal
C-V	Revamping	Modo operacional (influência de $W_i$ )	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, D, W_f, x_D$	Maior lucro mensal
C-VI	Revamping	Modo operacional (influência de $R_e$ )	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, D, W_f, x_D$	Maior lucro mensal
C-VII	Revamping	Modo operacional (influência de $R_e$ )	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, \theta_f, x_D$	Maior lucro mensal
RC-V	Design	Taxa de refluxo versus número de estágios	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, D, W_f, \theta_f, x_D$	Maior lucro mensal
RV-V	Design	Taxa de refluxo versus número de estágios	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, D, W_f, x_D$	Maior lucro mensal
RV-VI	Design	Taxa de refluxo versus número de estágios	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, \theta_f, x_D$	Maior lucro mensal
RV-VII	Design	Taxa de refluxo versus número de estágios	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, \theta_f, x_D$	Maior lucro mensal
C-VIII	Design	Modo operacional	$W_i, x_{wi}, x_{wf}, D, W_f, \theta_f, x_D$	Maior lucro mensal

Pode-se observar, pela tabela 23, que alguns estudos (por exemplo, RC-I, RV-I e C-V) contemplam uma mesma proposta de estudo e têm, portanto, uma elevada interface. De fato, em RC-I, tendo sido fixas algumas variáveis de processo ( $x_{wi}, x_{wf}, \dot{D}, R_e, x_D$ ), deseja-se analisar a influência da carga inicial na produtividade (em outras palavras, no próprio lucro mensal), para o modo de destilação sob refluxo

constante. Essa mesma variável é analisada no RV-I, quando se opera com composição de destilado constante e, finalmente, comparam-se os dois modos no estudo C-V avaliando-se a diferença de seus resultados em função da carga inicial.

Devido a essa interface, para facilitar a análise e a comparação, os resultados dos estudos correlatos (por exemplo, RC-I, RV-I e C-V) serão agrupados numa mesma tabela, em dois “blocos”, um de refluxo constante e outro de variável, e em cada bloco, têm-se um ou mais casos (para este exemplo, ver a tabela 24 no item 6.1.1.1).

No estudo de caso RC-I, interessam apenas os dados do “primeiro bloco” (“Simulação Refluxo Constante”). Posteriormente, na ocasião do estudo RV-I, usam-se, para a análise, os dados do “segundo bloco” (“Simulação Refluxo Variável”). Finalmente no estudo comparativo C-V, esta tabela 24 será novamente empregada, mas, confrontando-se os resultados correlatos (ou seja, com mesmo valor de  $W_i$ ) obtidos em cada modo de destilação.

Por outro lado, em algumas situações, não há essa paridade de estudos, tratando-se de estudos “isolados” (RC-III e C-II). Obviamente, nesses casos, as tabelas de resultados são apresentadas sem o agrupamento mencionado antes (cada estudo terá a sua tabela individual).

Nas tabelas de resultados, a seguir, consta na primeira coluna um número seqüencial de referência da linha, para facilitar a sua menção no texto.

## **6.1 ESTUDO DE INSTALAÇÕES EXISTENTES**

Neste item, serão consideradas instalações existentes, ou seja, para cada caso em estudo, os tamanhos dos equipamentos (coluna de destilação, condensador, refeedor) são os mesmos. As comparações serão realizadas entres os modos de operação, e também em cada modo de operação.

Vale ressaltar que, para esse cenário, como as áreas de troca térmica dos equipamentos são fixas, há um limite máximo para a vazão do vapor de topo. No caso da destilação sob refluxo variável e vazão de destilado constante (RV-DC), a vazão desse vapor tem de ser aumentada gradativamente ao longo do processo

(exatamente para suprir o aumento da taxa de refluxo). Então, a área de troca térmica disponível no condensador deve ser compatível com a requerida para condensar a vazão do vapor ao final da destilação (valor máximo), analogamente para o refeedor em questão. Para os modos de destilação sob refluxo constante (RC) e refluxo variável com vazão de vapor de topo constante (RV-V1C), não há essa preocupação, pois ocorrem apenas pequenas variações na vazão do vapor que sai da coluna durante a destilação em face da mudança da composição do produto de topo.

Quando a vazão do vapor pelo topo da coluna não varia muito, as vazões (em kg por hora) tanto da água de resfriamento pelo condensador, como do vapor d'água no refeedor são praticamente constantes em cada caso estudado. Mas, como o tempo de destilação pode ser diferente, os consumos dessas utilidades (em kg) podem ser distintos.

### **6.1.1 Operação com refluxo constante**

#### *6.1.1.1 Estudo de caso RC-I*

Neste estudo, avalia-se um caso de uma instalação existente composta por uma coluna de 12 pratos ideais, um condensador de área igual a 105 m<sup>2</sup> e um refeedor de área igual a 29 m<sup>2</sup>. A variável entre os casos é a quantidade de carga. Deseja-se saber se há um ganho significativo no aumento de escala.

A vazão de destilado é a mesma nos casos estudados assim como a taxa de refluxo externo e as composições da carga inicial, do produto final remanescente no refeedor e do destilado.

Permanecem inalteradas as vazões de água e de vapor nos trocadores de calor, devido ao fato de os equipamentos serem os mesmos, conforme mencionado antes. Como esperado, o tempo de destilação e a quantidade de produto destilado aumentam linearmente com a quantidade de carga inicial, conforme se nota através dos resultados no “primeiro bloco” da tabela 24 (“Simulação Refluxo Constante”).

Tabela 24 – Resultados de simulação dos estudos RC-I, RV-I, e C-V.

Simulação Refluxo Constante						Simulação Refluxo Variável					
Identificação:	Caso base RC	Caso 3a RC	Caso 3b RC	Caso 3c RC		Identificação:	Caso base RV	Caso 3a RV	Caso 3b RV	Caso 3c RV	
1	<b>Dados de entrada</b>					1	<b>Dados de entrada</b>				
2	$D$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	0,011	2	$D$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	0,011
3	$W_i$ , kmol	200	300	400	800	3	$W_i$ , kmol	200	300	400	800
4	Re	6	6	6	6	4	$x_D$	0,90	0,90	0,90	0,90
5	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,927	0,927	0,927	0,927	5	Re ( $\theta_i$ )	4	4	4	4
6	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,917	0,917	0,917	0,917	6	Re ( $\theta_1$ )	5	5	5	5
7	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,904	0,904	0,904	0,904	7	Re ( $\theta_2$ )	6	6	6	6
8	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,884	0,884	0,884	0,884	8	Re ( $\theta_3$ )	7	7	7	7
9	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,861	0,861	0,861	0,861	9	Re ( $\theta_f$ )	8	8	8	8
10	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	0,400	10	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	0,400
11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,360	0,360	0,360	11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	0,340	0,340	0,340
12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,320	0,320	0,320	12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	0,300	0,300	0,300
13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,280	0,280	0,280	13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	0,270	0,270	0,270
14	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	0,250	14	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	0,250
16	<b>Resultados de simulação</b>					16	<b>Resultados de simulação</b>				
17	N	12	12	12	12	17	N	12	12	12	12
18	D, kmol	46	69	92	183	18	D, kmol	46	69	92	185
19	$\theta_i$ , s	4132	6198	8263	16527	19	$\theta_i$ , s	3818	5728	7637	15274
20	$W_i$ , kmol	154	231	308	617	20	$W_i$ , kmol	154	231	308	615
21	$\bar{x}_D \cdot D$ , kmol	41	62	83	166	21	$x_D \cdot D$ , kmol	42	62	83	166
22	$\bar{m}_a$ , kg	281942	422913	563884	1127767	22	$\bar{m}_a$ , kg	258004	387005	516007	1032014
23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	245658	245658	245658	245658	23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	243245	243245	243245	243245
24	$\bar{S}$ , Kg	5857	8785	11713	23427	24	$\bar{S}$ , Kg	5367	8050	10734	21467
25	$\bar{S}$ , Kg/h	5103	5103	5103	5103	25	$\bar{S}$ , Kg/h	5060	5060	5060	5060
26	$A_c$ , m <sup>2</sup>	105	105	105	105	26	$A_c$ , m <sup>2</sup>	133	133	133	133
27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	29	29	29	29	27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	37	37	37	37
28	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90	0,90	28	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90	0,90
30	<b>Custos, R\$/h</b>					30	<b>Custos, R\$/h</b>				
31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00
32	Água	56,50	56,50	56,50	56,50	32	Água	55,95	55,95	55,95	55,95
33	Vapor	408,24	408,24	408,24	408,24	33	Vapor	404,79	404,79	404,79	404,79
34	Condensador	6,76	6,76	6,76	6,76	34	Condensador	7,86	7,86	7,86	7,86
35	Refrervedor	3,28	3,28	3,28	3,28	35	Refrervedor	3,85	3,85	3,85	3,85
36	Coluna e pratos	5,48	5,48	5,48	5,48	36	Coluna e pratos	6,45	6,45	6,45	6,45
37	Total	492,25	492,25	492,25	492,25	37	Total	490,89	490,89	490,89	490,89
39	<b>Custos, R\$/batelada</b>					39	<b>Custos, R\$/batelada</b>				
40	Mão de obra	52,44	72,66	92,88	173,76	40	Mão de obra	51,39	71,09	90,79	169,58
41	Água	64,85	97,27	129,69	259,39	41	Água	59,34	89,01	118,68	237,36
42	Vapor	468,53	702,80	937,07	1874,14	42	Vapor	429,35	644,02	858,70	1717,39
43	Condensador	29,56	40,95	52,35	97,94	43	Condensador	33,67	46,58	59,48	111,10
44	Refrervedor	14,31	19,83	25,35	47,43	44	Refrervedor	16,47	22,78	29,09	54,34
45	Coluna e pratos	23,93	33,15	42,38	79,29	45	Coluna e pratos	27,62	38,20	48,79	91,13
46	Total	653,62	966,67	1279,72	2531,93	46	Total	617,84	911,69	1205,53	2380,90
48	<b>Outros resultados</b>					48	<b>Outros resultados</b>				
49	Lucro, R\$/mês	1.531.980,73	1.660.124,52	1.732.474,61	1.853.491,40	49	Lucro, R\$/mês	1.572.066,91	1.706.577,93	1.782.722,86	1.910.410,96
50	Lotes/mês	165	119	93	50	50	Lotes/mês	168	122	95	51

O aumento da carga também reflete no aumento da quantidade final remanescente (ver linha 20 na tabela 24), das quantidades de água de resfriamento e do vapor de aquecimento (ver linha 22 e 24 na tabela 24), requeridas no processo.



Com isso, o custo operacional em cada batelada é maior quando se aumenta a carga, mas, em compensação, a produção por lote também cresce.

Em princípio, já que o tempo de destilação aumenta proporcionalmente com a carga, poderia esperar-se que o lucro mensal não se alterasse, pois a redução do número de lotes produzidos mensalmente poderia ser compensada pelo aumento da quantidade produzida em cada batelada.

No entanto, observa-se, pelos resultados de simulação mostrados na tabela 24, que o lucro mensal aumenta um pouco com o aumento de escala. Este ganho se deve ao fato da diluição do tempo de espera entre uma batelada e outra, uma vez que o tempo de espera é fixo e os demais tempos contabilizados (destilação, carga, aquecimento, descarga) são proporcionais à carga.

De fato, conforme visto no capítulo 5, o tempo de espera é de 3600 s (fixo). Para o caso onde a carga inicial é de 200 kmol, o tempo total de processo é igual a 15700 s, e para o caso onde a carga é de 800 kmol, o tempo total é de 52100 s. Então, dividindo-se o tempo de espera pelo tempo total, para o primeiro caso, tem-se 23% e para o último, 7% (ver tabela 25), o que significa que, quando se aumenta a carga inicial no revedor, o ganho (lucro mensal maior) se dá pela diminuição do tempo de espera em um mês.

Tabela 25 – Resultados de simulação do estudo RC-I.

W <sub>i</sub> , kmol	$\theta$ total, s	$\theta$ espera, s	$\theta$ espera/ $\theta$ total (%)	$\theta$ espera mensal, h
200	15700	3600	23	165
300	21800	3600	16	119
400	27900	3600	13	93
800	52100	3600	7	50

Portanto, desconsiderando-se o custo de um revedor com volume maior, pode-se concluir que, quanto maior a carga, maior será o lucro.

### 6.1.1.2 Estudo de caso RC-II

No estudo RC-II, a carga inicial e a sua composição são fixas, assim como a composição do resíduo final. Deseja-se comparar o que ocorre quando se deseja alterar a composição do produto, ou seja, produzir um produto mais puro, utilizando uma instalação composta de uma coluna de 12 pratos ideais, um condensador de área igual a 105 m<sup>2</sup> e um refeedor de área igual a 29 m<sup>2</sup>. Neste estudo, comparam-se os casos onde a pureza do produto varia de 0,85 a 0,95, e para isto, como o número de estágios de separação é fixo (instalação existente), é necessário aumentar a taxa de refluxo em que se opera em cada caso e diminuir a vazão de destilado.

Vale ressaltar que, em todos os outros estudos, tem-se adotado que a fração molar de metanol no destilado especificada deva ser de, no mínimo, 0,90. Mas, no caso específico do RC-II, em que se quer verificar exatamente a influência da pureza do destilado, considera-se que esse valor mínimo passa a ser de 0,85, a fim de aumentar a faixa de análise.

Nota-se, observando a tabela 26, que ocorre um aumento da quantidade de energia necessária (ver linha 50) conforme se aumenta a pureza do produto requerido. Há um aumento também no tempo de destilação, já que, para se obter um produto com maior pureza, foi necessário aumentar o refluxo, diminuindo a vazão de destilado.

O custo por hora para obter produtos de diferente composição não se altera muito, mas o lucro será afetado, pois, para incrementar a pureza do produto em 0,1 de fração molar do metanol (de 0,85 para 0,95), é necessário um tempo de destilação quase três vezes maior para a obtenção de uma mesma quantidade de produto de topo, já que é preciso aumentar o refluxo e diminuir a vazão de retirada do destilado, conforme visto antes.

Pelos resultados obtidos, então, conclui-se que a solução mais econômica, com maior lucro mensal, consiste em obter um destilado de “mínima” pureza, desde que seja atendida a especificação comercial (no caso estudado, com fração molar de metanol igual a 0,85).

Tabela 26 – Resultados de simulação dos estudos RC-II, RV-II, e C-I.

Simulação Refluxo Constante						Simulação Refluxo Variável						
Identificação:	Caso RC 8d	Caso base RC	Caso RC 8c	Caso RC 8b	Caso RC 8a	Identificação:	Caso RV-DC 8f	Caso RV-DC 8b	Caso RV-DC 8c	Caso RV-DC 8d	Caso RV-DC 8e	
1	<b>Dados de entrada</b>					<b>Dados de entrada</b>						
2	$D$ , kmol/s	0,016	0,011	0,009	0,007	0,005	$D$ , kmol/s	0,012	0,009	0,006	0,005	0,003
3	$W_i$ , kmol	200	200	200	200	200	$W_i$ , kmol	200	200	200	200	200
4	Re	4	6	8	10	15	$x_D$	0,85	0,9	0,93	0,94	0,95
5	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,895	0,927	0,945	0,950	0,958	Re ( $\theta_i$ )	3	4	6	7	9
6	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,880	0,917	0,940	0,945	0,952	Re ( $\theta_1$ )	4	5	7	9	12
7	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,850	0,904	0,930	0,940	0,945	Re ( $\theta_2$ )	4	6	8	11	15
8	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,810	0,884	0,920	0,930	0,940	Re ( $\theta_3$ )	5	7	10	13	19
9	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,765	0,861	0,910	0,920	0,943	Re ( $\theta_f$ )	6	8	11	15	22
10	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	0,400	0,400	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	0,400	0,400
11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,360	0,360	0,360	0,360	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	0,340	0,340	0,340	0,340
12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,320	0,320	0,320	0,320	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	0,300	0,300	0,300	0,300
13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,280	0,280	0,280	0,280	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	0,270	0,270	0,270	0,270
14	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	0,250	0,250	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	0,250	0,250
16	<b>Resultados de simulação</b>					<b>Resultados de simulação</b>						
17	N	12	12	12	12	12	N	12	12	12	12	12
18	$D$ , kmol	50	46	44	44	43	$D$ , kmol	50	46	44	43	43
19	$\theta_i$ , s	3162	4132	5146	6259	9051	$\theta_i$ , s	3775	4816	6337	8186	11384
20	$W_r$ , kmol	150	154	156	156	157	$W_r$ , kmol	150	154	156	157	157
21	$\bar{x}_{D,D}$ , kmol	42	41	41	41	41	$x_{D,D}$ , kmol	43	42	41	41	41
22	$\bar{m}_a$ , kg	221576	281942	346018	417538	599250	$\bar{m}_a$ , kg	218547	258004	328730	407795	533317
23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	252303	245658	242042	240139	238343	$\bar{m}_a$ , Kg/h	208416	192843	186760	179342	168651
24	$\bar{S}$ , Kg	4560	5857	7221	8729	12553	$\bar{S}$ , Kg	4511	5367	6870	8541	11192
25	$\bar{S}$ , Kg/h	5192	5103	5051	5020	4993	$\bar{S}$ , Kg/h	4302	4011	3903	3756	3539
26	$A_c$ , m <sup>2</sup>	105	105	105	105	105	$A_c$ , m <sup>2</sup>	104	105	105	105	105
27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	29	29	28	28	28	$A_r$ , m <sup>2</sup>	29	29	28	28	28
28	$\bar{x}_D$	0,85	0,90	0,93	0,94	0,95						
30	<b>Custos, R\$/h</b>					<b>Custos, R\$/h</b>						
31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	12,00	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	12,00
32	Água	58,03	56,50	55,67	55,23	54,82	Água	47,94	44,35	42,95	41,25	38,79
33	Vapor	415,35	408,24	404,12	401,60	399,43	Vapor	344,17	320,91	312,24	300,48	283,15
34	Condensador	6,75	6,76	6,77	6,76	6,76	Condensador	6,70	6,78	6,76	6,75	6,77
35	Refrervedor	3,31	3,28	3,25	3,24	3,23	Refrervedor	3,34	3,31	3,26	3,25	3,24
36	Coluna e pratos	5,54	5,48	5,44	5,42	5,40	Coluna e pratos	5,58	5,54	5,46	5,43	5,42
37	Total	500,99	492,25	487,25	484,25	481,63	Total	419,72	392,90	382,68	369,16	349,37
39	<b>Custos, R\$/batelada</b>					<b>Custos, R\$/batelada</b>						
40	Mão de obra	49,21	52,44	55,82	59,53	68,84	Mão de obra	51,25	54,72	59,79	65,95	76,61
41	Água	50,96	64,85	79,58	96,03	137,83	Água	50,27	59,34	75,61	93,79	122,66
42	Vapor	364,77	468,53	577,72	698,28	1004,25	Vapor	360,90	429,35	549,61	683,25	895,39
43	Condensador	27,69	29,56	31,51	33,53	38,76	Condensador	28,63	30,90	33,66	37,10	43,20
44	Refrervedor	13,59	14,31	15,13	16,07	18,51	Refrervedor	14,25	15,11	16,27	17,86	20,71
45	Coluna e pratos	22,71	23,93	25,30	26,87	30,96	Coluna e pratos	23,81	25,26	27,19	29,86	34,63
46	Total	528,93	653,62	785,06	930,32	1299,14	Total	529,10	614,68	762,12	927,81	1193,21
48	<b>Outros resultados</b>					<b>Outros resultados</b>						
49	Lucro, R\$/mês	1.697.656,48	1.531.980,73	1.401.535,07	1.288.763,68	1.064.408,14	Lucro, R\$/mês	1.630.371,84	1.476.995,44	1.312.852,98	1.163.420,49	967.396,11
50	Consumo de energia, J	9,79E+09	1,26E+10	1,55E+10	1,87E+10	2,70E+10	Consumo de energia, J	9,69E+09	1,15E+10	1,48E+10	1,83E+10	2,40E+10

### 6.1.1.3 Estudo de caso RC-III

Este estudo tem, por objetivo, a redução da fração molar de metanol restante

no refeedor, obtendo-se o mesmo produto destilado, em uma instalação existente composta por uma coluna de 12 pratos ideais, um condensador de área igual a 105 m<sup>2</sup> e um refeedor de área igual a 30 m<sup>2</sup>.

A opção da redução da quantidade de metanol residual é prolongar a destilação. Mas, para que a qualidade do produto destilado não venha a ser prejudicada, ficando fora da especificação comercial, a destilação deve ser conduzida com uma taxa de refluxo maior.

Então, para se atingir o objetivo citado acima, a taxa de refluxo a ser mantida constante precisa ser maior, já que o número de estágios de separação é fixo na instalação existente. Na figura 30, mostra-se a relação entre a fração molar de metanol na carga remanescente (resposta física do processo) com a taxa de refluxo necessária (recurso operacional para atingir essa composição).

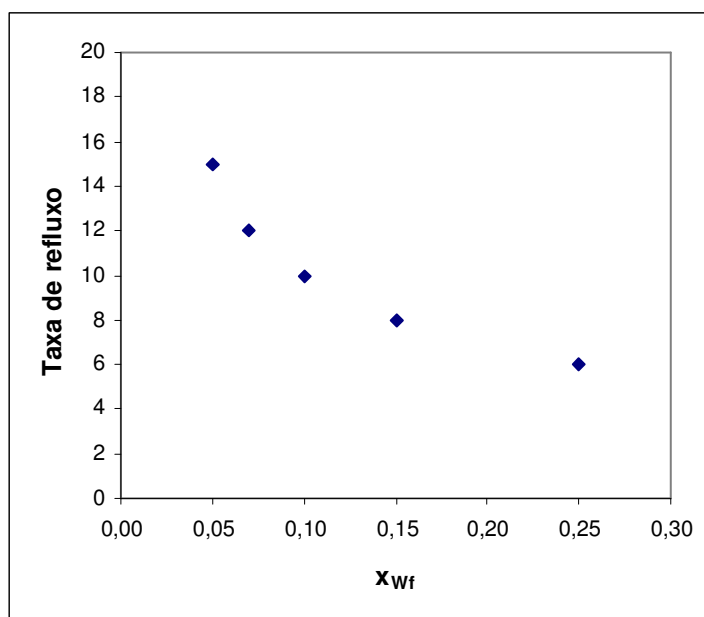


Figura 30 - Relação entre a taxa de refluxo e a composição da mistura restante no refeedor para o estudo RC-III.

Por outro lado, quando se eleva a taxa de refluxo em uma instalação existente, como a vazão do vapor de topo deve ser mantida constante, diminui-se a vazão de destilado e, com isso, há um aumento no tempo de destilação para se obter uma mesma quantidade de destilado.

Os resultados de simulação estão apresentados na tabela 27.

Tabela 27 – Resultados de simulação do estudo RC-III.

Simulação Refluxo Constante						
Identificação:	Caso base RC	Caso RC 2d	Caso RC 2g	Caso RC 2f	Caso RC 2e	
1	<b>Dados de entrada</b>					
2	$D$ , kmol/s	0,011	0,009	0,007	0,006	0,005
3	$W_i$ , kmol	200	200	200	200	200
4	Re	6	8	10	12	15
5	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,927	0,940	0,950	0,949	0,955
6	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,917	0,920	0,930	0,940	0,945
7	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,904	0,900	0,850	0,900	0,920
8	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,884	0,880	0,760	0,820	0,800
9	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,861	0,790	0,690	0,600	0,530
10	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	0,400	0,400
11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,300	0,280	0,300	0,300
12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,250	0,150	0,170	0,200
13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,200	0,120	0,120	0,090
14	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,150	0,100	0,070	0,050
16	<b>Resultados de simulação</b>					
17	N	12	12	12	12	12
18	D, kmol	46	66	75	79	83
19	$\theta_i$ , s	4132	7805	10803	13579	17578
20	$W_i$ , kmol	154	134	125	121	117
21	$\bar{x}_D \cdot D$ , kmol	41	60	67	72	74
22	$m_a$ , kg	281942	524955	722765	911366	1167824
23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	245658	242144	240851	241611	239167
24	S, Kg	5857	10987	15184	19154	24553
25	$\bar{S}$ , Kg/h	5103	5068	5060	5078	5028
26	$A_c$ , m <sup>2</sup>	105	104	104	104	104
27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	29	29	29	30	30
28	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90
30	<b>Custos, R\$/h</b>					
31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	12,00
32	Água	56,50	55,69	55,40	55,57	55,01
33	Vapor	408,24	405,45	404,79	406,22	402,26
34	Condensador	6,76	6,73	6,73	6,73	6,70
35	Refrervedor	3,28	3,32	3,35	3,38	3,38
36	Coluna e pratos	5,48	5,44	5,43	5,45	5,43
37	Total	492,25	488,63	487,69	489,36	484,78
39	<b>Custos, R\$/batelada</b>					
40	Mão de obra	52,44	64,68	74,68	83,93	97,26
41	Água	64,85	120,74	166,24	209,61	268,60
42	Vapor	468,53	878,99	1214,73	1532,28	1964,21
43	Condensador	29,56	36,29	41,87	47,10	54,33
44	Refrervedor	14,31	17,88	20,82	23,65	27,39
45	Coluna e pratos	23,93	29,32	33,80	38,14	44,00
46	Total	653,62	1147,90	1552,13	1934,72	2455,79
48	<b>Outros resultados</b>					
49	Lucro, R\$/mês	1.531.980,73	1.768.594,86	1.693.456,25	1.568.813,82	1.362.309,45
50	Receita/mês	1.639.672,75	1.921.927,86	1.873.034,30	1.767.976,26	1.580.464,15
51	Bat/mês	165	134	116	103	89
52	Produção/mês, kmol	6832	8008	7804	7367	6585

Na figura 31, está mostrada a influência da composição da carga remanescente no retervedor no tempo de destilação, na produção (número de lotes) mensal e no lucro por mês correspondente. Para coadunar as escalas do eixo das ordenadas, adota-se um fator multiplicativo de 100 para o número de lotes produzidos por mês.

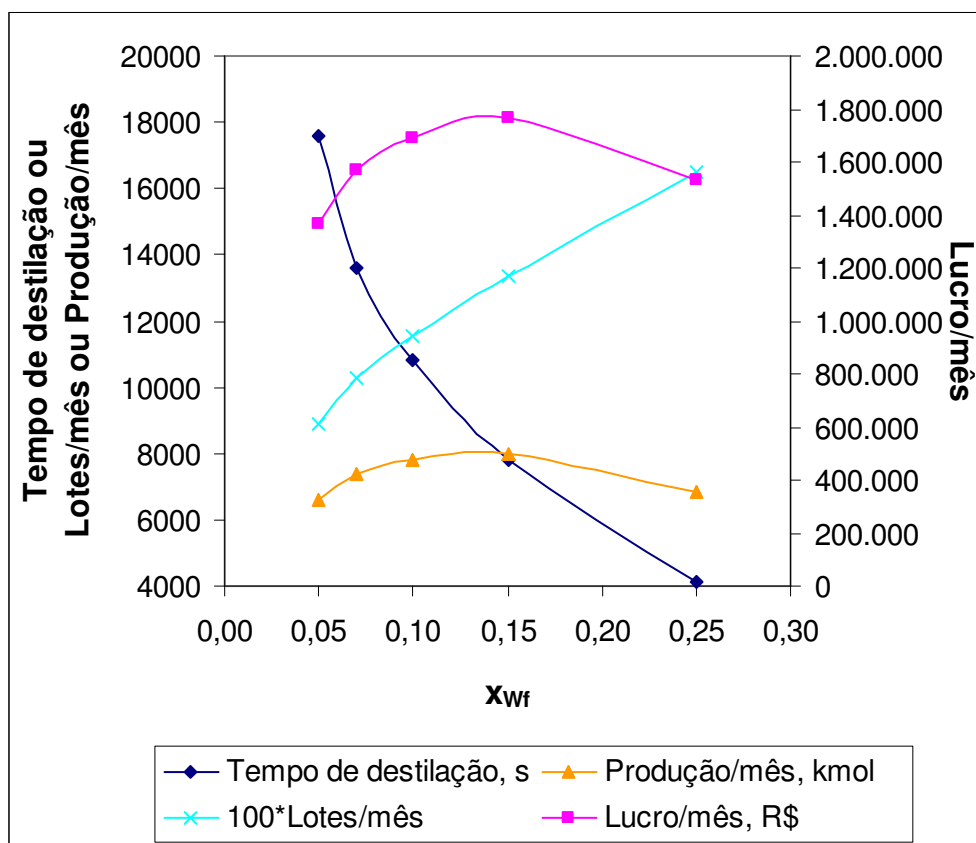


Figura 31 - Relação entre a composição final da mistura no retervedor e o tempo de destilação, número de lotes produzidos, produção mensal e lucro mensal para o estudo RC-III.

Observa-se, pela figura 31, que há uma variação no lucro mensal em relação ao valor da fração molar de metanol no produto remanescente no retervedor ( $x_{wf}$ ) e, ainda, que há uma situação em que este lucro é máximo.

Este comportamento pode ser interpretado do seguinte modo. Ao se diminuir  $x_{wf}$ , a produção por lote aumenta (passa mais metanol, produto desejado, para o destilado). Conforme visto antes, para diminuir  $x_{wf}$ , o recurso operacional numa instalação existente consiste em operar a coluna com uma taxa de refluxo maior, “sacrificando” a vazão de destilado.

O aumento da quantidade produzida é sempre melhor; no entanto, para

produzir mais, sob as condições já mencionadas anteriormente, demanda-se mais tempo, e há um ponto em que este aumento do tempo faz com que a receita diminua, já que a produção mensal diminui.

Então, o número de bateladas por mês diminui com o aumento da taxa de refluxo de operação, já que o tempo de destilação é maior.

Primeiro, comparam-se os casos de taxas de refluxo iguais a 6 e 8. Quando se eleva a taxa de refluxo de 6 para 8, para que a composição de metanol restante no refeedor passe de 0,25 para 0,15, leva-se mais tempo na destilação. No entanto, o custo maior por levar mais tempo a batelada é compensado pela produção maior.

Por outro lado, quando se eleva a taxa de refluxo de 8 para 15, ocorre uma reversão, a redução no número de bateladas mensais, o que implica na diminuição da produção mensal e da receita mensal, reduz o lucro mensal drasticamente.

Portanto, existe um valor ótimo da taxa de refluxo ou da composição na carga final, referente ao máximo lucro mensal.

Conclui-se, então, que dentre os casos estudados, é mais vantajoso destilar até a fração molar de metanol igual a 0,15 no produto restante no refeedor (ver figura 31) e com taxa de refluxo igual a 8 (ver figura 30).

## **6.1.2 Operação com composição de destilado constante**

### *6.1.2.1 Estudo de caso RV-I*

Neste estudo, avalia-se a operação com composição de destilado constante (refluxo variável com vazão de destilado constante) em uma instalação existente composta de 12 pratos ideais, condensador de 133 m<sup>2</sup> e refeedor de 37 m<sup>2</sup>. A variável entre os casos é, de novo, a quantidade de carga, como no estudo RC-I. Como esperado, o tempo de destilação e a quantidade de produto destilado aumentam proporcionalmente com a quantidade carregada (ver tabela 24, apresentada anteriormente no item 6.1.1.1).

Na tabela 28, nota-se que, como no estudo RC-I, o aumento da carga inicial

acarreta num melhor aproveitamento da capacidade da instalação (o tempo ocioso mensal é reduzido). Portanto, têm-se as mesmas conclusões anteriores.

Tabela 28 – Resultados de simulação do estudo RV-I.

Wi, kmol	$\theta$ total, s	$\theta$ espera, s	$\theta$ espera/ $\theta$ total (%)	$\theta$ espera mensal, h
200	14500	3600	25	179
300	21300	3600	17	122
400	27200	3600	13	95
800	50900	3600	7	51

#### 6.1.2.2 Estudo de caso RV-II

No estudo RV-II, análogo ao RC-II, deseja-se comparar o que ocorre quando se deseja alterar a composição do produto destilado, utilizando uma instalação composta de 12 pratos ideais, condensador de 105 m<sup>2</sup> e refeedor de 29 m<sup>2</sup>. Neste estudo, de refluxo variável mantendo-se a vazão de destilado constante (RV-DC), comparam-se os casos onde a pureza do produto varia de 0,85 a 0,95, e para isto, é necessário aumentar a taxa de refluxo e diminuir a vazão de destilado.

Nota-se, observando a tabela 26, anteriormente apresentada (ver item 6.1.1.2), que, como no caso da operação com refluxo constante (ver item 6.1.1.2), ocorre um aumento da quantidade de energia necessária conforme se aumenta a pureza requerida dos produtos. Há um aumento também no tempo de destilação e um aumento do produto remanescente no refeedor (mesmas constatações no estudo RC-II do item 6.1.1.2).

O custo por hora, de novo, é praticamente o mesmo, porém é necessário mais que o dobro do tempo na destilação, pois é necessário aumentar o refluxo e diminuir a vazão de retirada do destilado entre os casos estudados.

Analogamente ao caso RC-II, o maior lucro mensal é obtido quando a pureza do produto requerida é a mínima requerida (no caso, fração molar de metanol no destilado de 0,85) uma vez que, neste caso, o tempo de destilação é o menor de



todos, pois se trabalha com taxas de refluxo menores e maior vazão de retirada do produto.

### *6.1.2.3 Estudo de caso RV-III*

Na operação com refluxo variável, há diferentes modos de se aumentar o refluxo: este pode ser elevado mais rapidamente no início e mais lentamente no final, ou o oposto, ou ainda, pode ser aumentado de modo uniforme.

Neste estudo, a vazão do destilado é fixa, inicia-se sempre com taxa de refluxo externo igual a 3 e termina-se com 10, mas, em cada caso estudado, a velocidade da variação desta faixa é distinta.

O modo como o refluxo é variado em função do tempo de destilação gera alteração no próprio tempo da destilação para produzir uma mesma quantidade do mesmo produto, e também no lucro mensal. Então, o objetivo deste estudo RV-III é verificar qual o melhor procedimento de modo que se tenham um menor tempo de destilação, uma maior capacidade (quantidade destilada por mês) e, conseqüentemente, um maior lucro mensal.

No “segundo bloco” da tabela 29, estão mostrados os resultados completos desse estudo de caso.

Tabela 29 – Resultados de simulação dos estudos RV-III e C-III.

Simulação Refluxo Constante					Simulação Refluxo Variável							
Identificação:	Caso RC 7a	Caso RC 7b	Caso RC 7c		Identificação:	Caso RV-DC 7b	Caso RV-DC 7c	Caso RV-DC 7d	Caso RV-DC 7f	Caso RV-V1C 7b	Caso RV-V1C 7c	Caso RV-V1C 7f
<b>Dados de entrada</b>					<b>Dados de entrada</b>							
1					$\bar{D}_i$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	0,011	0,031	0,031	0,031
2	$\bar{D}_i$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	$\bar{D}_f$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	0,011	0,011	0,011	0,011
3	$\bar{D}_f$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	$\bar{W}_i$ , kmol	200	200	200	200	200	200	200
4	$\bar{W}_i$ , kmol	200	200	200	$x_D$	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90
5	Re	10	10	5	Re ( $\theta_i$ )	3,0	3,0	3,0	3,0	3,0	3,0	3,0
6	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,960	0,955	0,941	Re ( $\theta_1$ )	6,0	4,0	4,5	7,0	6,0	4,0	7,0
7	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,945	0,930	0,925	Re ( $\theta_2$ )	7,0	5,0	5,0	9,8	7,0	5,0	9,8
8	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,936	0,900	0,890	Re ( $\theta_3$ )	7,5	7,0	5,5	9,9	7,5	7,0	9,9
9	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,930	0,690	0,830	Re ( $\theta_f$ )	10,0	10,0	10,0	10,0	10,0	10,0	10,0
10	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,900	0,660	0,740	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,500	0,500	0,500	0,500	0,500	0,500	0,500
11	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,500	0,500	0,500	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,290	0,400	0,380	0,250	0,290	0,400	0,250
12	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,300	0,420	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,270	0,340	0,350	0,210	0,270	0,340	0,210
13	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,200	0,320	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,260	0,260	0,320	0,205	0,260	0,260	0,205
14	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,100	0,250	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,200	0,200	0,200	0,200	0,200	0,200	0,200
15	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,200	0,095	0,200								
<b>Resultados de simulação</b>					<b>Resultados de simulação</b>							
17	N	12	12	12	N	12	12	12	12	12	12	12
18	D, kmol	81	100	86	D, kmol	86	86	86	86	86	86	86
19	$\theta_i$ , s	7279	9010	7773	$\theta_i$ , s	5841	6794	6476	4864	4145	4145	4145
20	$\theta_i$ , s	7279	9010	7773	$\bar{W}_i$ , kmol	114	114	114	114	114	114	114
21	$\bar{W}_i$ , kmol	119	100	114	$x_{D,D}$ , kmol	77	77	77	77	77	77	77
22	$\bar{x}_{D,D}$ , kmol	76	91	77	$\bar{m}_a$ , kg	436847	433055	443571	398236	444160	444160	444160
23	$\bar{m}_a$ , kg	775693	968388	456362	$\bar{m}_a$ , Kg/h	269244	229463	246576	294749	385768	385768	385768
24	$\bar{m}_a$ , Kg/h	383647	386941	211355	$\bar{S}$ , Kg	9128	8994	9229	8351	9281	9226	9314
25	$\bar{S}$ , Kg	16201	20274	9426	$\bar{S}$ , Kg/h	5626	4766	5130	6181	8061	8013	8089
26	$\bar{S}$ , Kg/h	8013	8101	4365	$A_c$ , m <sup>2</sup>	163	163	163	163	163	163	163
27	$A_c$ , m <sup>2</sup>	169	168	91	$A_r$ , m <sup>2</sup>	46	46	46	46	46	46	46
28	$A_r$ , m <sup>2</sup>	46	48	25	$\bar{x}_D$	0,94	0,90	0,90				
29	$\bar{x}_D$	0,94	0,90	0,90								
<b>Custos, R\$/h</b>					<b>Custos, R\$/h</b>							
31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	12,00	12,00	12,00
32	Água	88,24	89,00	48,61	Água	61,93	52,78	56,71	67,79	88,73	88,73	88,73
33	Vapor	641,03	648,07	349,23	Vapor	450,06	381,26	410,44	494,47	644,89	641,07	647,14
34	Condensador	9,16	9,14	5,36	Condensador	8,94	8,94	8,94	8,94	8,94	8,94	8,94
35	Refervedor	4,42	4,78	3,01	Refervedor	4,42	4,42	4,42	4,42	4,42	4,42	4,42
36	Coluna e pratos	7,12	7,18	5,00	Coluna e pratos	7,12	7,12	7,12	7,12	7,12	7,12	7,12
37	Total	761,97	770,17	423,20	Total	544,47	466,52	499,63	594,75	766,10	762,28	768,35
38	Total	761,97	770,17	423,20								
<b>Custos, R\$/batelada</b>					<b>Custos, R\$/batelada</b>							
40	Mão de obra	62,93	68,70	64,58	Mão de obra	58,14	61,31	60,25	54,88	52,48	52,48	52,48
41	Água	178,41	222,73	104,96	Água	100,47	99,60	102,02	91,59	102,16	102,16	102,16
42	Vapor	1296,10	1621,90	754,06	Vapor	730,22	719,54	738,34	668,08	742,51	738,11	745,10
43	Condensador	48,04	52,33	28,84	Condensador	43,31	45,68	44,89	40,88	39,10	39,10	39,10
44	Refervedor	23,16	27,36	16,17	Refervedor	21,40	22,57	22,18	20,20	19,32	19,32	19,32
45	Coluna e pratos	37,36	41,12	26,89	Coluna e pratos	34,51	36,40	35,77	32,58	31,15	31,15	31,15
46	Total	1646,00	2034,14	995,50	Total	988,05	985,10	1003,45	908,22	986,72	982,32	989,31
47	Total	1646,00	2034,14	995,50								
<b>Outros resultados</b>					<b>Outros resultados</b>							
49	Lucro, R\$/mês	2.283.540,86	2.475.839,63	2.347.540,96	Lucro, R\$/mês	2.604.670,68	2.470.119,09	2.510.943,13	2.771.806,02	2.885.467,53	2.886.191,66	2.885.040,97
50	Lucro, R\$/mês	2.283.540,86	2.475.839,63	2.347.540,96								

Na tabela 30, a seguir, estão mostradas as variações da taxa de refluxo para os diversos casos simulados, todos com taxa de refluxo variável e vazão de destilado constante (RV-DC).

Tabela 30 – Variação da taxa de refluxo e respectivo tempo de destilação para casos RV-DC.

Caso RV-DC 7b		Caso RV-DC 7c		Caso RV-DC 7d		Caso RV-DC 7f	
Re	Tempo, s	Re	Tempo, s	Re	Tempo, s	Re	Tempo, s
3,0	0	3,0	0	3,0	0	3,0	0
6,0	4480	4,0	3190	4,5	3490	7,0	4170
7,0	4830	5,0	4590	5,0	4200	9,8	4720
7,5	5000	7,0	5970	5,5	4860	9,9	4790
10,0	5840	10,0	6790	10,0	6480	10,0	4860

Observando a figura 32 e a tabela 29, nota-se que o maior lucro mensal é obtido quando se chega ao refluxo máximo em menos tempo, como ocorre no caso RV-DC 7f. A diferença de tempo entre o modo que levou mais tempo (caso RV-DC 7c) e o que levou menos tempo (caso RV-DC 7f) é de 40%. Essa diferença repercute num aumento de capacidade de 1774 kmol por mês e um lucro mensal adicional de R\$ 300.000,00.

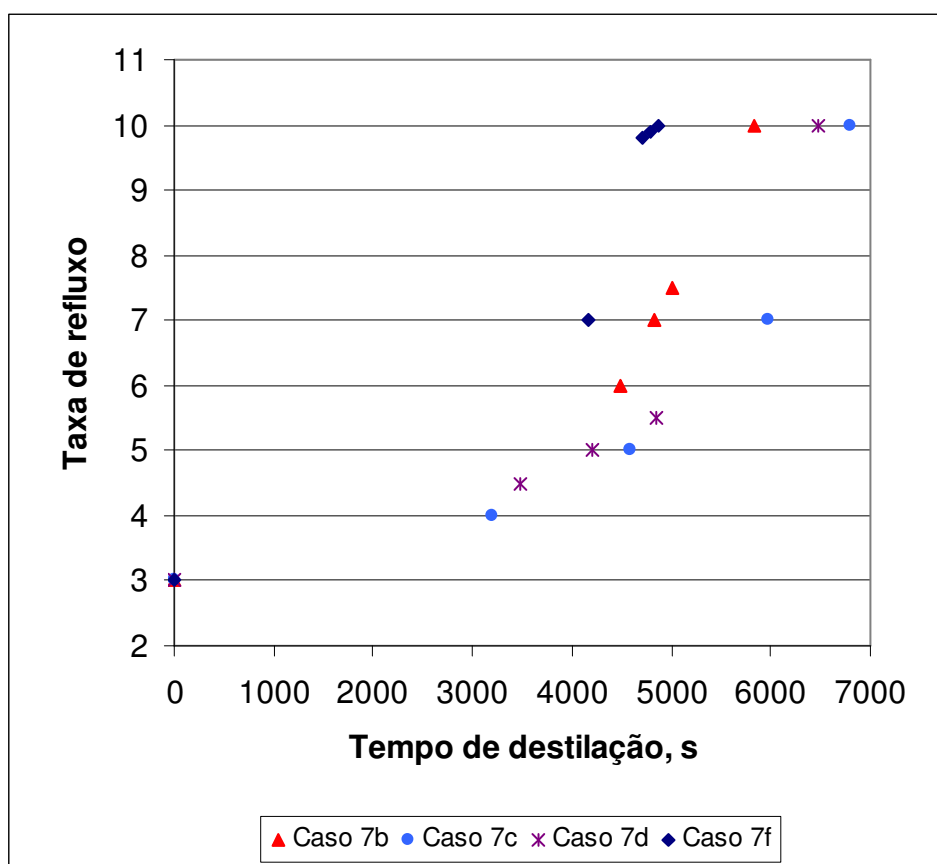


Figura 32 - Taxa de refluxo versus tempo de destilação para o estudo RV-III.

Conforme mencionado, a operação com taxa de refluxo variável, no presente estudo de caso RV-III, foi feita com vazão de destilado constante e aumento gradativo da vazão do vapor pelo topo da coluna de destilação. Mas, por outro lado, pode-se aumentar a taxa de refluxo através da redução da vazão de destilado ao longo do processo, mantendo-se a vazão de topo constante. Neste caso, distinto do que foi observada para RV-III, a velocidade com que se varia a taxa de refluxo não influi no lucro mensal (ver linha 50 dos casos RV-V1C 7b e 7c na tabela 29), pois o tempo de destilação é o mesmo (ver linha 20 dos casos RV-V1C 7b e 7c na tabela 29). Essas considerações serão melhor discutidas no estudo comparativo C-III (item 6.1.3.3).

### **6.1.3 Comparação**

#### *6.1.3.1 Estudo de caso C-I*

Seja uma instalação composta por 12 pratos ideais, um condensador de área igual a  $105 \text{ m}^2$  e um refeedor de área igual a  $29 \text{ m}^2$ . Neste estudo, comparam-se os casos onde a pureza do produto destilado deve ser incrementada de 0,85 até 0,95. Os resultados para essa análise estão apresentados na tabela 26 (anteriormente apresentada, ver item 6.1.1.2, estudo RC-II). No caso do modo de refluxo variável, a vazão do destilado é mantida fixa (RV-DC), isto é, o aumento do refluxo faz-se às custas do aumento da vazão do vapor de topo.

Neste estudo, não foi incluído na comparação o modo de destilação com refluxo variável, mantendo-se a vazão do vapor de topo constante (RV-V1C). Uma comparação mais abrangente, envolvendo todos os processos (RC, RV-DC e RV-V1C), é feita no próximo estudo (C-II) no item 6.1.3.2.

Tanto para o modo de destilação sob refluxo constante (RC) como para o de composição do produto de topo constante (RV-DC), observa-se que, para se obter um produto mais puro, é necessário, para uma instalação já existente, aumentar a taxa de refluxo (no modo RC) ou a taxa de refluxo inicial (no modo RV-DC) e diminuir a vazão de destilado, à medida que a pureza do destilado deve atingir uma

especificação mais rigorosa. Com isso, para se obter uma dada quantidade de destilado, requer-se um tempo maior de destilação.

Pode-se notar que o tempo de destilação na operação com refluxo variável (RV-DC) é sempre maior que o do refluxo constante (RC) e, portanto, a capacidade de produção mensal é menor no primeiro modo.

Na figura 33, está mostrado o consumo de energia (em J) necessário para cada um dos modos de destilação estudados, em função da pureza do destilado.

Observa-se que o modo RV-DC requer menos energia para se obter a mesma quantidade e composição do produto destilado. Com isso, os custos operacionais neste modo de operação são menores em relação aos de destilação com refluxo constante. Isso está evidenciado também na figura 34.

Mas, como a capacidade de destilação na operação sob refluxo constante é maior, devido ao menor tempo requerido num lote, o lucro mensal deste modo é ligeiramente superior ao de refluxo variável (em torno de 4 a 10%, ver tabela 26).

Conforme visto antes, observando a tabela 26 e a figura 33, os dois modos de operações requerem diferentes cargas térmicas para se obter a mesma quantidade e composição do produto e esta diferença torna-se mais acentuada à medida que a pureza do destilado é maior.

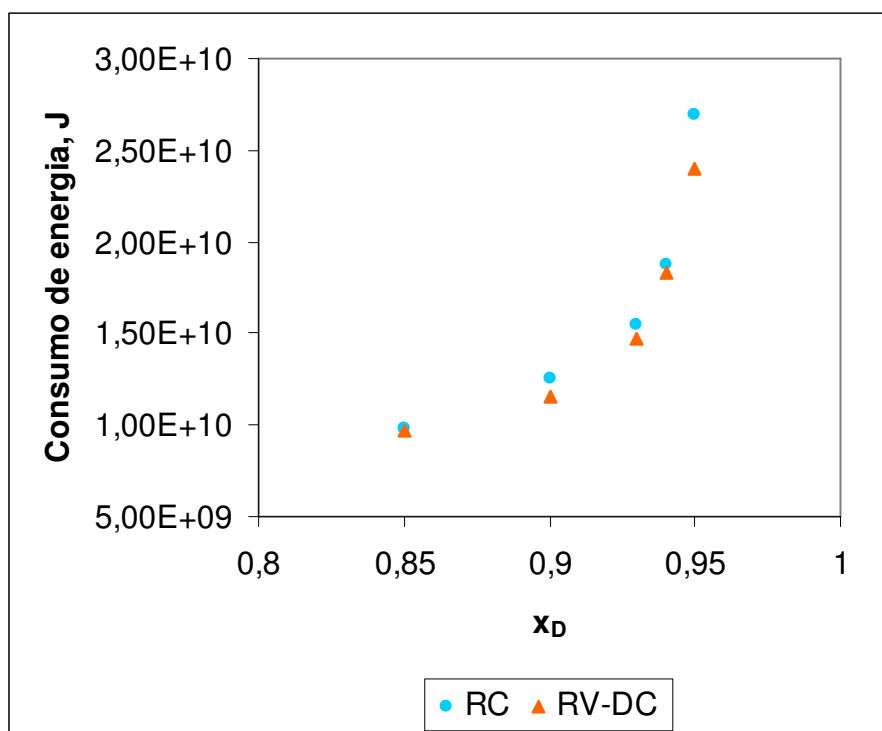


Figura 33 - Consumo de energia versus composição do destilado para o estudo C-I.

Essa constatação obtida através da simulação matemática está de acordo com a observação de STICHLMAIR; FAIR, 1998: geralmente, menos energia é requerida para a operação com concentração de destilado constante (refluxo variável) e esta diferença é especialmente maior para destilações de pureza maior.

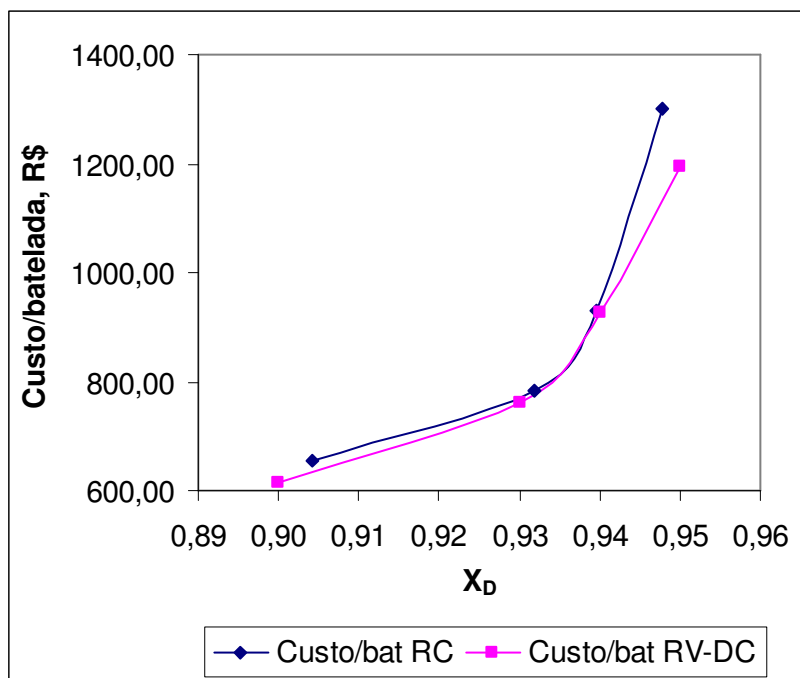


Figura 34 - Custo por batelada versus composição do destilado para o estudo C-I.

### 6.1.3.2 Estudo de caso C-II

Neste estudo, avalia-se um caso de uma instalação existente composta de uma coluna com 9 pratos ideais, condensador de área de troca térmica igual a 194 m<sup>2</sup>, e refeedor com área igual a 54 m<sup>2</sup>.

Comparam-se um caso de destilação com refluxo constante e os dois casos de refluxo variável, a saber, o caso RV-DC 2c em que a taxa de refluxo varia através da variação da vazão de vapor que deixa a coluna, mantendo-se a vazão de destilado constante, e o caso RV-V1C 2d em que a taxa de refluxo varia através da variação da vazão de destilado, mantendo-se a vazão do vapor de topo constante.

A finalidade deste estudo é diminuir o tempo de destilação, aumentar o

número de lotes por mês, e aumentar, com isso, o lucro mensal.

Conforme mencionado antes, para os casos RV-DC, a vazão do vapor de topo aumenta ao longo da destilação, requerendo, com isso, uma área crescente de troca térmica, tanto no refeedor como no condensador. Então, na tabela 31, estão mostrados os valores dessas áreas (inicial e final da destilação). Para a instalação física, adota-se o valor máximo dos dois.

O consumo de energia é maior na operação com refluxo constante ( $2,34 \cdot 10^{10}$  J), seguido da operação com refluxo variável, quando se mantém a vazão de destilado constante ( $1,94 \cdot 10^{10}$  J), e refluxo variável com vazão de vapor de topo constante ( $1,15 \cdot 10^{10}$  J).

Observa-se que o tempo de destilação com RV-V1C é bem inferior ao RV-DC (ver linha 20 da tabela 31), que o consumo de utilidades é menor, e que, portanto, o lucro mensal também é maior. Os custos por hora são maiores, porém, como a duração da batelada é bem menor, os custos por batelada são menores.

Os custos totais de operação por batelada para refluxo constante são maiores que para refluxo variável, embora o tempo de destilação seja menor.

Portanto, dentre estes modos de operar, o melhor é com refluxo variável e vazão do vapor de topo constante (RV-V1C): menor consumo de energia, menor tempo, maior capacidade, maior lucro mensal (23% a mais em relação ao RC e 26% em relação ao RV-DC, ver linha 52 na tabela 31).

Tabela 31 – Resultados de simulação do estudo C-II.

<b>Simulação Refluxo Constante</b>			<b>Simulação Refluxo Variável</b>		
<b>Identificação:</b>		Caso RC 2c	<b>Identificação:</b>		Caso RV-DC 2c    Caso RV-V1C 2d
1	<b>Dados de entrada</b>		<b>Dados de entrada</b>		
2	$D_i$ , kmol/s	0,011	$D_i$ , kmol/s	0,008	0,021
3	$D_f$ , kmol/s	0,011	$D_f$ , kmol/s	0,008	0,008
4	$W_i$ , kmol	200	$W_i$ , kmol	200	200
5	Re	12	$x_D$	0,9	0,9
6	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,920	Re ( $\theta_i$ )	6	6
7	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,910	Re ( $\theta_1$ )	9	9
8	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,900	Re ( $\theta_2$ )	11	11
9	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,880	Re ( $\theta_3$ )	14	14
10	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,860	Re ( $\theta_f$ )	17	17
11	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400
12	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	0,340
13	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	0,300
14	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	0,270
15	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250
17	<b>Resultados de simulação</b>		<b>Resultados de simulação</b>		
18	N	9	N	9	9
19	D, kmol	46	D, kmol	46	46
20	$\theta_i$ , s	4136	$\theta_i$ , s	4935	2014
21	$W_f$ , kmol	154	$W_f$ , kmol	154	154
22	$\bar{x}_D \cdot D$ , kmol	41	$x_D \cdot D$ , kmol	42	42
23	$m_a$ , kg	524081	$m_a$ , kg	432902	258004
24	$\bar{m}_a$ , Kg/h	456166	$\bar{m}_a$ , Kg/h	315827	461279
25	S, Kg	10919	S, Kg	9030	5379
26	$\bar{S}$ , Kg/h	9504	$\bar{S}$ , Kg/h	6588	9618
27	$A_c$ , m <sup>2</sup> (mínima)	188	$A_c$ , m <sup>2</sup> (mínima)	75	194
28	$A_c$ , m <sup>2</sup> (máxima)	194	$A_c$ , m <sup>2</sup> (máxima)	194	194
29	$A_r$ , m <sup>2</sup> (mínima)	51	$A_r$ , m <sup>2</sup> (mínima)	20	51
30	$A_r$ , m <sup>2</sup> (máxima)	53	$A_r$ , m <sup>2</sup> (máxima)	54	54
31	$\bar{x}_D$	0,90			
33	<b>Custos, R\$/h</b>		<b>Custos, R\$/h</b>		
34	Mão de obra	12,00	Mão de obra	12,00	12,00
35	Água	104,92	Água	72,64	106,09
36	Vapor	760,34	Vapor	527,04	769,42
37	Condensador	10,02	Condensador	10,01	10,02
38	Refrervedor	5,13	Refrervedor	5,16	5,16
39	Coluna e pratos	6,64	Coluna e pratos	6,69	6,70
40	Total	899,06	Total	633,54	909,40
42	<b>Custos, R\$/batelada</b>		<b>Custos, R\$/batelada</b>		
43	Mão de obra	52,45	Mão de obra	55,12	45,38
44	Água	120,54	Água	99,57	59,34
45	Vapor	873,55	Vapor	722,41	430,35
46	Condensador	43,82	Condensador	45,99	37,90
47	Refrervedor	22,41	Refrervedor	23,69	19,52
48	Coluna e pratos	29,04	Coluna e pratos	30,73	25,32
49	Total	1141,81	Total	977,51	617,82
51	<b>Outros resultados</b>		<b>Outros resultados</b>		
52	Lucro, R\$/mês	1.451.618,95	Lucro, R\$/mês	1.409.571,03	1.780.493,35



### 6.1.3.3 Estudo de caso C-III

Tem-se uma instalação existente, composta por uma coluna de 12 pratos ideais, um condensador de área de troca térmica em torno de  $165 \text{ m}^2$  e um refeedor de área igual a  $46 \text{ m}^2$ . Anteriormente (ver estudo RV-III no item 6.1.2.3), foi visto que, na operação com refluxo variável, o caso mais lucrativo era aquele em que fosse atingida a taxa de refluxo final (valor mais alto) mais rapidamente (caso RV-DC 7f). Nesta comparação C-III, deseja-se verificar se já se iniciar com o valor máximo do refluxo variável, mas operando com esta taxa constante, seria mais lucrativo. Uma outra comparação é estudar o comportamento ao se aumentar a taxa de refluxo ao longo da destilação com vazão do vapor de topo mantida constante (e não a de destilado constante, como o foi no RV-III).

Na tabela 29 (ver estudo de caso RV-III, item 6.1.2.3), apresentam-se os resultados de simulação.

Observa-se que, para a operação com refluxo constante, não foi viável, nas simulações matemáticas realizadas no cenário de instalação existente, chegar a um caso com as mesmas condições finais do estudo RV-III. No caso RC 7a, operando-se com taxa de refluxo externo constante igual a 10 (valor final dos casos estudados em RV-III), a pureza do destilado final (fração molar de metanol = 0,96) é maior do que a obtida antes (0,90). Para se atingir exatamente esta pureza, o teor de metanol no produto residual no refeedor precisa ser menor, conforme os resultados da tabela 29, para o caso RC 7b (fração molar de metanol no resíduo igual a 0,095, ao invés de 0,200 como nos casos estudados em RV-III). Foi feita ainda uma outra simulação (ver caso RC 7c), com taxa de refluxo externo constante de 5, menor que a anterior que era de 10, com vistas de obter condições finais similares às do refluxo variável e viabilizar a comparação. Mas, neste caso RC 7c, as áreas de troca térmica do condensador e do refeedor necessárias no processo são completamente distintas das adotadas no estudo RV-III, o que desconfigura o cenário de “rating”. Essa comparação será retomada numa outra situação com “maior grau de liberdade”, em que serão “projetados” os equipamentos necessários ao processo (ver o estudo C-VIII).

Mas, em todo caso, o lucro mensal da operação com refluxo constante, nos três casos analisados (RC 7a, 7b e 7c), não supera o do melhor caso para refluxo

variável com vazão de destilado constante (caso RV-DC 7f), anteriormente apontado como o mais rentável.

Na tabela 29, estão mostrados também os resultados de simulação para os casos de operação com refluxo variável com vazão do vapor de topo constante (ver os casos RV-V1C 7b, 7c e 7f).

Nota-se que, conforme mencionado, a velocidade com que se aumenta a taxa de refluxo não afeta praticamente o valor do lucro mensal (em todos, em torno de R\$ 2.886.000 mensais).

Mas, por outro lado, este valor é ligeiramente maior do que o obtido no melhor caso do estudo RV-III (RV-DC 7f).

Então, sob as premissas do presente trabalho e para as condições estudadas, o melhor modo operacional, para uma instalação existente, consiste em destilar o produto com refluxo variável, mantendo-se a vazão do vapor de topo constante ao longo da destilação (e reduzindo-se a do destilado, portanto).

## **6.2 ESTUDO DE INSTALAÇÃO EXISTENTE COM SUBSTITUIÇÃO DOS TROCADORES DE CALOR**

Neste item, serão consideradas instalações com coluna existente, mas com possível substituição dos trocadores de calor.

### **6.2.1 Operação com refluxo constante**

#### *6.2.1.1 Estudo de caso RC-IV*

No estudo RC-IV, deseja-se comparar o que ocorre quando se quer reduzir o tempo de destilação de uma instalação composta de 12 pratos ideais. Para isso,

comparam-se casos em que se opera com vazões diferentes de destilado (as vazões do vapor de topo também serão diferentes em cada caso estudado, para manter a taxa de refluxo constante). Na tabela 32 estão apresentados os resultados.

Tabela 32 – Resultados de simulação dos estudos RC-IV, RV-IV e C-IV.

Simulação Refluxo Constante					Simulação Refluxo Variável					
Identificação:	Caso base RC	Caso RC 1a	Caso RC 1b	Caso RC 1c	Identificação:	Caso base RV	Caso RV 1a	Caso RV 1b	Caso RV 1c	
1	<b>Dados de entrada</b>				1	<b>Dados de entrada</b>				
2	$D$ , kmol/s	0,011	0,020	0,040	0,060	$D$ , kmol/s	0,0111	0,02	0,04	0,06
3	$W_i$ , kmol	200	200	200	200	$W_i$ , kmol	200	200	200	200
4	Re	6	6	6	6	$x_D$	0,90	0,90	0,90	0,90
5	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,927	0,927	0,927	0,927	Re ( $\theta_1$ )	4	4	4	4
6	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,917	0,917	0,917	0,917	Re ( $\theta_1$ )	5	5	5	5
7	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,904	0,904	0,904	0,904	Re ( $\theta_2$ )	6	6	6	6
8	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,884	0,884	0,884	0,884	Re ( $\theta_3$ )	7	7	7	7
9	$x_D$ ( $\theta_4$ )	0,861	0,861	0,861	0,861	Re ( $\theta_4$ )	8	8	8	8
10	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,400	0,400	0,400	0,400	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,400	0,400	0,400	0,400
11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,360	0,360	0,360	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	0,340	0,340	0,340
12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,320	0,320	0,320	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	0,300	0,300	0,300
13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,280	0,280	0,280	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	0,270	0,270	0,270
14	$x_W$ ( $\theta_4$ )	0,250	0,250	0,250	0,250	$x_W$ ( $\theta_4$ )	0,250	0,250	0,250	0,250
16	<b>Resultados de simulação</b>				16	<b>Resultados de simulação</b>				
17	N	12	12	12	12	N	12	12	12	12
18	$D$ , kmol	46	46	46	46	$D$ , kmol	46	46	46	46
19	$\theta_1$ , s	4132	2293	1147	764	$\theta_1$ , s	3818	2119	1060	706
20	$W_b$ , kmol	154	154	154	154	$W_b$ , kmol	154	154	154	154
21	$\bar{x}_D \cdot D$ , kmol	41	41	41	41	$x_D \cdot D$ , kmol	42	42	42	42
22	$m_a$ , kg	281942	281942	281942	281942	$m_a$ , kg	258004	258004	258004	258004
23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	245658	442627	885254	1327881	$\bar{m}_a$ , Kg/h	243245	438279	876558	1314837
24	$S$ , Kg	5857	5857	5857	5857	$S$ , Kg	5367	5367	5367	5367
25	$\bar{S}$ , Kg/h	5103	9195	18389	27584	$\bar{S}$ , Kg/h	5060	9117	18234	27351
26	$A_c$ , m <sup>2</sup>	105	189	379	568	$A_c$ , m <sup>2</sup>	133	240	479	719
27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	29	51	103	154	$A_r$ , m <sup>2</sup>	37	66	132	198
28	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90	0,90					
30	<b>Custos, R\$/h</b>				30	<b>Custos, R\$/h</b>				
31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00
32	Água	56,50	101,80	203,61	305,41	Água	55,95	100,80	201,61	302,41
33	Vapor	408,24	735,56	1471,13	2206,69	Vapor	404,79	729,35	1458,69	2188,04
34	Condensador	6,76	9,86	15,36	23,90	Condensador	7,86	11,46	21,43	27,78
35	Refrervador	3,28	5,02	9,00	11,67	Refrervador	3,85	5,89	10,57	13,70
36	Coluna e pratos	5,48	7,87	9,77	13,76	Coluna e pratos	6,45	10,31	12,08	16,88
37	Total	492,25	872,12	1720,87	2573,43	Total	490,89	869,81	1716,38	2560,81
39	<b>Custos, R\$/batelada</b>				39	<b>Custos, R\$/batelada</b>				
40	Mão de obra	52,44	46,31	42,49	41,21	Mão de obra	51,39	45,73	42,20	41,02
41	Água	64,85	64,85	64,85	64,85	Água	59,34	59,34	59,34	59,34
42	Vapor	468,53	468,53	468,53	468,53	Vapor	429,35	429,35	429,35	429,35
43	Condensador	29,56	38,05	54,40	82,08	Condensador	33,67	43,67	75,36	94,96
44	Refrervador	14,31	19,38	31,87	40,07	Refrervador	16,47	22,46	37,16	46,82
45	Coluna e pratos	23,93	30,39	34,58	47,26	Coluna e pratos	27,62	39,29	42,47	57,72
46	Total	653,62	667,50	696,72	744,01	Total	617,84	639,84	685,87	729,21
48	<b>Outros resultados</b>				48	<b>Outros resultados</b>				
49	Lucro, R\$/mês	1.531.980,73	1.732.132,91	1.881.997,05	1.930.256,55	Lucro, R\$/mês	1.572.066,91	1.762.619,58	1.900.726,55	1.946.151,54
50	Receita, R\$/mês	1.639.672,75	1.856.667,28	2.023.674,50	2.086.226,52	Receita, R\$/mês	1.675.932,82	1.883.506,06	2.041.156,05	2.099.738,97
51	Custo, R\$/mês	107.692,02	124.534,36	141.677,44	155.969,97	Custo, R\$/mês	103.865,90	120.886,48	140.429,50	153.587,43

Então, dentre os casos analisados, convém trabalhar com a maior vazão de destilado, e com trocadores de calor de áreas maiores, uma vez que o custo maior dos equipamentos é compensado pelo aumento da produção mensal, gerando o maior lucro mensal (ver linha 49 na tabela 32).

## **6.2.2 Operação com composição de destilado constante**

### *6.2.2.1 Estudo de caso RV-IV*

Deseja-se estudar o comportamento da mesma instalação do RC-IV, mas operando sob refluxo variável com vazão de destilado constante.

Opera-se com as mesmas taxas de refluxo inicial e final em todos os casos, mesma composição das misturas inicial e final no refeedor. O que se varia entre os casos, de novo, é a vazão do destilado (ver linha 2, no “segundo bloco” da tabela 32) e as áreas dos trocadores de calor (ver linhas 26 e 27 na tabela 32). Analogamente ao caso RC-IV, o consumo de energia em si não é afetado pelo aumento da vazão de destilado. Embora as áreas dos trocadores de calor tenham que ser maiores devido à maior vazão do vapor pela coluna, observa-se um aumento no lucro mensal em face da redução do tempo de processo e do aumento da capacidade de destilação.

## **6.2.3 Comparação**

### *6.2.3.1 Estudo de caso C-IV*

Neste estudo, propõe-se comparar o efeito da redução do tempo de destilação de uma instalação composta de 12 pratos ideais, operando com refluxo constante, e com refluxo variável RV-DC.

Para ambos os modos de operação, recorre-se ao aumento da vazão de destilado para reduzir o tempo de destilação. Os resultados estão na tabela 32, já apresentada no item 6.2.1.1.

O que primeiro se pode notar é que o aumento da vazão de destilado em uma coluna existente requer um aumento nas áreas do condensador e do refeedor (devido ao aumento da vazão do vapor de topo) para todos os casos, tanto para operação com refluxo constante tanto para operação com refluxo variável.

Para ambos os modos de operação, apesar dos gastos maiores devido ao aumento dos custos dos trocadores de calor, o lucro mensal também é maior, pois com a redução do tempo de destilação, é possível realizar mais bateladas por mês.

Comparando-se os pares com a mesma vazão de destilado, nota-se que as áreas dos trocadores de calor dos casos de refluxo variável são maiores que para os de refluxo constante, o tempo de destilação e a energia necessária são menores, e o lucro mensal é maior. Portanto, nesta comparação, o modo mais recomendado de destilação é o de refluxo variável, com composição do destilado constante.

Por outro lado, vale ressaltar que, embora os valores das vazões horárias das utilidades sejam próximos nos dois modos de operação, as quantidades consumidas no caso de refluxo variável são menores, pois o seu tempo de processo é menor.

Na figura 35, apresentam-se o custo, a receita e o lucro mensais em função do número de lotes produzidos por mês. Nota-se que, como a quantidade produzida em cada lote é fixa (ver linha 21 na tabela 32), o faturamento mensal cresce linearmente com o número de bateladas.

Por outro lado, o aumento dos custos cresce, mas não varia linearmente com o número de lotes produzidos por mês, pois parte dos custos envolvidos (dos equipamentos e de mão de obra) não varia proporcionalmente com este número.

Com isso, dependendo da taxa de crescimento da receita em relação à dos custos, em função da quantidade produzida, pode-se esperar um valor ótimo dessa produção. Um exemplo típico desta situação está mostrado na figura 36. Nota-se que existe um ponto a partir do qual os custos superam a receita, tendo-se então prejuízo. Vale destacar que este exemplo não corresponde a nenhum dos casos estudados neste trabalho.

De fato, no cenário considerado neste estudo C-IV, devido ao elevado valor atribuído ao produto destilado em relação aos custos envolvidos, não se observa essa situação mencionada, isto é, qualquer aumento de produção sempre é

vantajoso, conforme se observa pela figura 35.

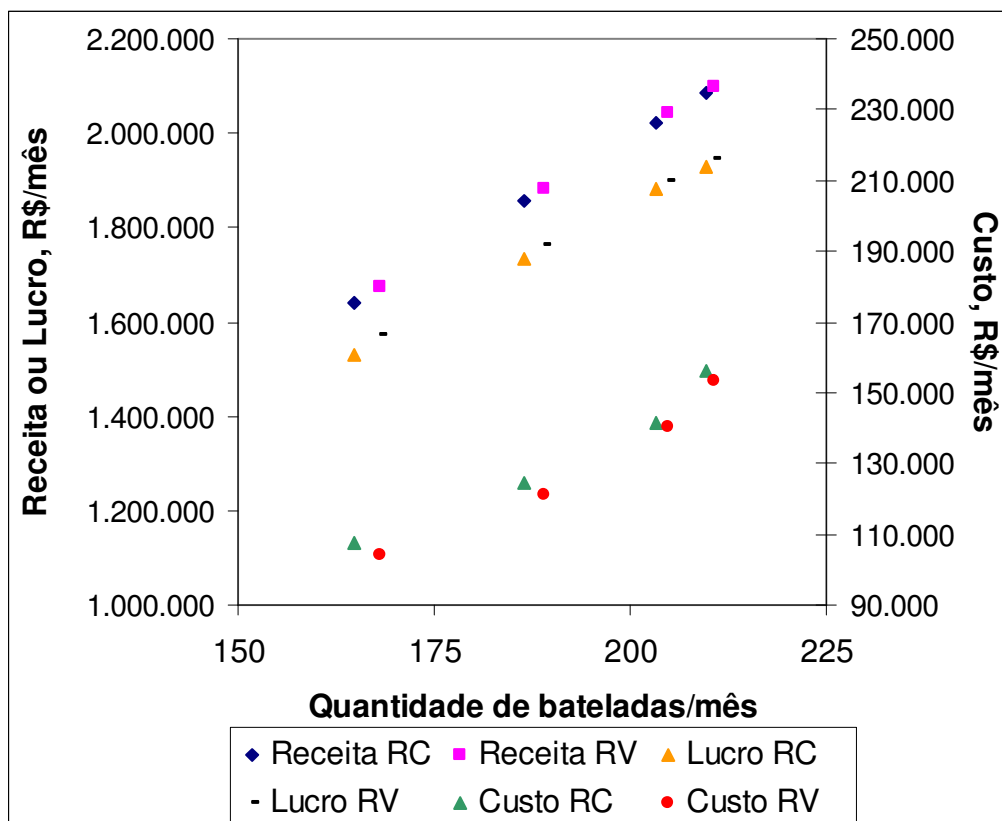


Figura 35 – Avaliação econômica em função do número de bateladas mensais para o estudo C-IV.

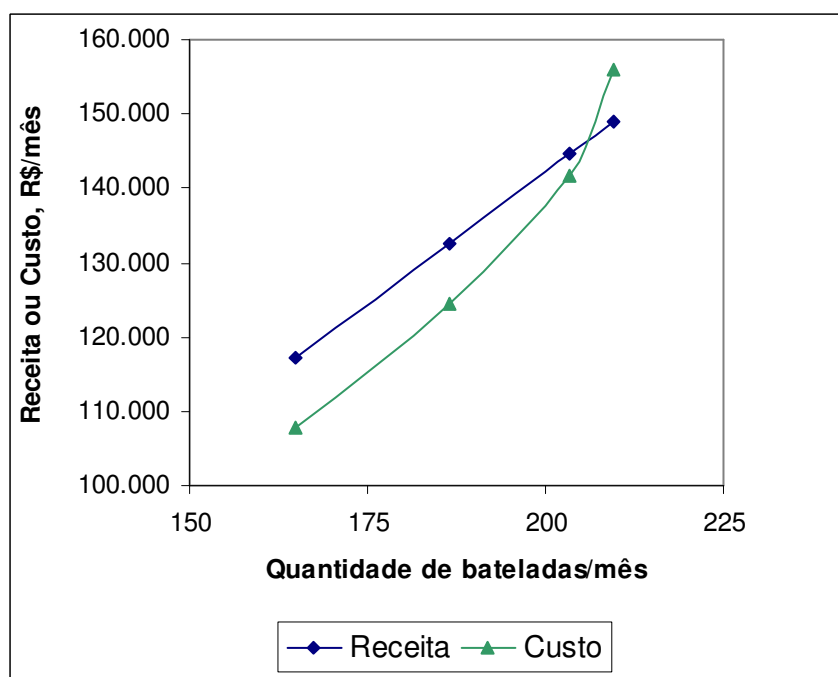


Figura 36 - Exemplo de variação da receita ou custo em função do número de bateladas.

### 6.2.3.2 Estudo de caso C-V

Neste estudo de casos, tem-se uma coluna de destilação com 12 pratos ideais, e deseja-se operar com a mesma vazão de destilado, e obter o mesmo produto. Não “se dispõe ainda” dos trocadores de calor, e suas áreas serão objetos de estudo, e além disto, deseja-se escolher também qual o melhor modo de operar, refluxo constante (RC) ou refluxo variável com vazão de destilado constante (RV-DC). Mantêm-se fixas, para todos os casos comparados neste estudo, a vazão e a composição do destilado, e as taxas de refluxo.

Conforme apresentado na tabela 24 (ver item 6.1.1.1), quando se tem a mesma carga, o lucro mensal é maior para operações com refluxo variável; embora as áreas dos trocadores neste caso sejam maiores, o tempo de destilação é menor, podendo então processar maior quantidade de produto por mês.

Os custos operacionais quando se opera com refluxo constante também são um pouco mais altos que os de refluxo variável, pois se consome mais água e mais vapor, isto porque a destilação é mais longa. Por outro lado, como os trocadores são menores, os custos dos equipamentos são mais baixos para a destilação com refluxo constante. Contudo, como o custo do vapor de aquecimento representa o maior peso nos custos totais, a operação com refluxo constante torna-se mais onerosa.

Em suma, no estudo C-V, o melhor modo de operação é a destilação com refluxo variável e vazão de destilado constante.

### 6.2.3.3 Estudo de caso C-VI

Nesta comparação entre as operações com refluxo constante (RC) e refluxo variável com vazão de destilado constante (RV-DC), usa-se uma instalação com número fixo de pratos ideais (9, 10 ou 12). O objetivo é obter a mesma quantidade do mesmo produto. Fixam-se a vazão de destilado, a composição do produto e a quantidade carregada. O resultados de simulação estão apresentados na tabela 33.

Tabela 33 – Resultados de simulação dos estudos C-VI, RC-V e RV-V.

Simulação Refluxo Constante					Simulação Refluxo Variável				
Identificação:	Caso base RC	Caso RC 2a	Caso RC 2b		Identificação:	Caso base RV-DC	Caso RV-DC 2a	Caso RV-DC 2b	
1	<b>Dados de entrada</b>				1	<b>Dados de entrada</b>			
2	$\bar{D}$ , kmol/s	0,0111	0,0111	0,0111	2	$\bar{D}$ , kmol/s	0,0111	0,0111	0,0111
3	$W_i$ , kmol	200	200	200	3	$W_i$ , kmol	200	200	200
4	Re	6	8	12	4	$x_D$	0,90	0,90	0,90
5	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,927	0,927	0,927	5	Re ( $\theta_i$ )	4	5	6
6	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,917	0,917	0,917	6	Re ( $\theta_1$ )	5	7	9
7	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,904	0,904	0,904	7	Re ( $\theta_2$ )	6	8	11
8	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,884	0,884	0,884	8	Re ( $\theta_3$ )	7	10	14
9	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,861	0,861	0,861	9	Re ( $\theta_f$ )	8	12	17
10	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	10	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400
11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,360	0,360	11	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	0,340	0,340
12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,320	0,320	12	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	0,300	0,300
13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,280	0,280	13	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	0,270	0,270
14	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	14	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250
16	<b>Resultados de simulação</b>				16	<b>Resultados de simulação</b>			
17	N	12	10	9	17	N	12	10	9
18	$\bar{D}$ , kmol	46	46	46	18	$\bar{D}$ , kmol	46	46	46
19	$\theta_f$ , s	4132	4132	4132	19	$\theta_f$ , s	3818	3697	3601
20	$W_i$ , kmol	154	154	154	20	$W_i$ , kmol	154	154	154
21	$\bar{x}_D \cdot \bar{D}$ , kmol	41	41	41	21	$x_D \cdot \bar{D}$ , kmol	42	42	42
22	$\bar{m}_a$ , kg	281942	362497	523606	22	$\bar{m}_a$ , kg	258004	336996	432902
23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	245658	315846	456222	23	$\bar{m}_a$ , Kg/h	243245	328156	432800
24	$\bar{S}$ , Kg	5857	7539	10904	24	$\bar{S}$ , Kg	5367	7021	9030
25	$\dot{S}$ , Kg/h	5103	6569	9501	25	$\dot{S}$ , Kg/h	5060	6837	9028
26	$A_e$ , m <sup>2</sup>	105	135	195	26	$A_e$ , m <sup>2</sup>	133	192	266
27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	29	37	53	27	$A_r$ , m <sup>2</sup>	37	53	73
28	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90	28	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90
30	<b>Custos, R\$/h</b>				30	<b>Custos, R\$/h</b>			
31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	31	Mão de obra	12,00	12,00	12,00
32	Água	56,50	72,64	104,93	32	Água	55,95	75,48	99,54
33	Vapor	408,24	525,52	760,07	33	Vapor	404,79	546,97	722,24
34	Condensador	6,76	7,94	10,05	34	Condensador	7,86	9,95	12,25
35	Refrervador	3,28	3,85	5,13	35	Refrervador	3,85	5,12	6,31
36	Coluna e pratos	5,48	5,67	6,64	36	Coluna e pratos	6,45	7,11	9,39
37	Total	492,25	627,63	898,83	37	Total	490,89	656,62	861,74
39	<b>Custos, R\$/batelada</b>				39	<b>Custos, R\$/batelada</b>			
40	Mão de obra	52,44	52,44	52,44	40	Mão de obra	51,39	50,99	50,67
41	Água	64,85	83,37	120,43	41	Água	59,34	77,51	99,57
42	Vapor	468,53	603,13	872,33	42	Vapor	429,35	561,70	722,41
43	Condensador	29,56	34,72	43,93	43	Condensador	33,67	42,27	51,73
44	Refrervador	14,31	16,82	22,41	44	Refrervador	16,47	21,76	26,64
45	Coluna e pratos	23,93	24,78	29,03	45	Coluna e pratos	27,62	30,21	39,66
46	Total	653,62	815,27	1140,57	46	Total	617,84	784,45	990,69
48	<b>Outros resultados</b>				48	<b>Outros resultados</b>			
49	Lucro, R\$/mês	1.531.980,73	1.505.346,59	1.451.749,08	49	Lucro, R\$/mês	1.572.066,91	1.556.318,22	1.530.991,56



Observa-se que, para um dado número de pratos ideais, a operação com refluxo constante requer áreas menores dos trocadores de calor que o refluxo variável (RV-DC) e maior tempo de destilação. E nota-se ainda que RV-DC obtém maior lucro que RC.

Logo, de novo, o melhor modo de operação, neste estudo comparativo, é a destilação sob refluxo variável, com vazão de destilado constante.

#### *6.2.3.4 Estudo de caso C-VII*

A seguir, serão comparadas as operações com refluxo constante (RC), refluxo variável com vazão de destilado constante (RV-DC) e refluxo variável com vazão do vapor de topo constante (RV-V1C) que têm, em comum, o número de pratos ideais, e deseja-se que o tempo de destilação seja o mesmo (ou seja, mesma produção mensal). Serão avaliadas instalações que contenham 9, 12 e 20 pratos ideais.

Para uma instalação composta por um determinado número de pratos ideais, e para uma batelada de mesma duração, a operação com RV-V1C é a que requer menores áreas para os trocadores de calor, e a operação RV-DC é a que requer maiores áreas.

Observa-se, através dos resultados mostrados na tabela 34, que, para a destilação do mesmo produto no mesmo tempo, usando-se a mesma quantidade de pratos ideais, consome-se a mesma quantidade de energia para ambas as operações com refluxo variável (RV-DC e RV-V1C), embora as áreas dos trocadores sejam diferentes.

Nesse estudo comparativo C-VII, os melhores modos de destilação em que se logra o maior lucro mensal são os sob refluxo variável, seja com vazão de destilado constante ou vazão do vapor de topo constante (valores de lucro mensal muito próximos), ver linha 50 da tabela 34.

Tabela 34 – Resultados de simulação dos estudos C-VII, RV-VI, RV-VII e C-VIII.

Simulação Refluxo Constante					Simulação Refluxo Variável						
Identificação:	Caso RC 10a	Caso base RC	Caso RC 2b		Identificação:	Caso RV-DC 10d	Caso RV-V1c 10d	Caso RV-DC 10a	Caso RV-V1c 10a	Caso RV-DC 10c	Caso RV-V1c 10c
1	<b>Dados de entrada</b>				<b>Dados de entrada</b>						
2	$\bar{D}_i$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	$\bar{D}_i$ , kmol/s	0,011	0,013	0,010	0,014	0,010	0,018
3	$\bar{D}_f$ , kmol/s	0,011	0,011	0,011	$\bar{D}_f$ , kmol/s	0,011	0,009	0,010	0,008	0,010	0,007
4	$\bar{W}_i$ , kmol	200	200	200	$\bar{W}_i$ , kmol	200	200	200	200	200	200
5	Re	4	6	12	$x_D$	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90	0,90
6	$x_D$ ( $\theta_i$ )	0,946	0,927	0,927	Re ( $\theta_i$ )	3,2	3,2	4,0	4,0	6,0	6,0
7	$x_D$ ( $\theta_1$ )	0,933	0,917	0,917	Re ( $\theta_1$ )	3,8	3,8	5,0	5,0	9,0	9,0
8	$x_D$ ( $\theta_2$ )	0,901	0,904	0,904	Re ( $\theta_2$ )	4,3	4,3	6,0	6,0	12,0	12,0
9	$x_D$ ( $\theta_3$ )	0,843	0,884	0,884	Re ( $\theta_3$ )	4,8	4,8	7,0	7,0	15,0	15,0
10	$x_D$ ( $\theta_f$ )	0,789	0,861	0,861	Re ( $\theta_f$ )	5,2	5,2	8,0	8,0	18,0	18,0
11	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	$x_W$ ( $\theta_i$ )	0,400	0,400	0,400	0,400	0,400	0,400
12	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,360	0,360	0,360	$x_W$ ( $\theta_1$ )	0,340	0,340	0,340	0,340	0,340	0,340
13	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,320	0,320	0,320	$x_W$ ( $\theta_2$ )	0,300	0,300	0,300	0,300	0,300	0,300
14	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,280	0,280	0,280	$x_W$ ( $\theta_3$ )	0,270	0,270	0,270	0,270	0,270	0,270
15	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	$x_W$ ( $\theta_f$ )	0,250	0,250	0,250	0,250	0,250	0,250
17	<b>Resultados de simulação</b>				<b>Resultados de simulação</b>						
18	N	20	12	9	N	20	20	12	12	9	9
19	D, kmol	46	46	46	D, kmol	46	46	46	46	46	46
20	$\theta_i$ , s	4188	4132	4132	$\theta_i$ , s	4132	4131	4131	4132	4133	4132
21	$\bar{W}_i$ , kmol	154	154	154	$\bar{W}_i$ , kmol	154	154	154	154	154	154
22	$\bar{x}_D \cdot \bar{D}$ , kmol	42	41	41	$\bar{x}_D \cdot \bar{D}$ , kmol	42	42	42	42	42	42
23	$\bar{m}_a$ , kg	204813	281942	523606	$\bar{m}_a$ , kg	199394	199394	258004	258004	449657	449657
24	$\bar{m}_a$ , Kg/h	176071	245658	456222	$\bar{m}_a$ , Kg/h	173737	173769	224837	224794	391694	391771
25	$\bar{S}$ , Kg	4236	5857	10904	$\bar{S}$ , Kg	4139	4139	5367	5367	9382	9382
26	$\bar{S}$ , Kg/h	3641	5103	9501	$\bar{S}$ , Kg/h	3607	3607	4677	4676	8172	8174
27	$A_c$ , m <sup>2</sup>	76	105	195	$A_c$ , m <sup>2</sup>	86	73	123	95	243	165
28	$A_r$ , m <sup>2</sup>	20	29	53	$A_r$ , m <sup>2</sup>	24	20	34	26	67	46
29	$\bar{x}_D$	0,90	0,90	0,90							
31	<b>Custos, R\$/h</b>				<b>Custos, R\$/h</b>						
32	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	Mão de obra	12,00	12,00	12,00	12,00	12	12
33	Água	40,50	56,50	104,93	Água	39,96	39,97	51,71	51,70	90,09	90,11
34	Vapor	291,29	408,24	760,07	Vapor	288,53	288,58	374,16	374,08	653,78	653,91
35	Condensador	4,78	6,76	10,05	Condensador	5,18	4,66	7,48	6,33	11,57	9,03
36	Refrervedor	2,64	3,28	5,13	Refrervedor	2,91	2,62	3,66	3,09	5,96	4,42
37	Coluna e pratos	8,66	5,48	6,64	Coluna e pratos	9,45	8,60	6,12	5,18	8,75	5,94
38	Total	359,87	492,25	898,83	Total	358,04	356,44	455,12	452,39	782,2	775,4
40	<b>Custos, R\$/batelada</b>				<b>Custos, R\$/batelada</b>						
41	Mão de obra	52,63	52,44	52,44	Mão de obra	52,44	52,44	52,44	52,44	52,44	52,44
42	Água	47,11	64,85	120,43	Água	45,86	45,86	59,34	59,34	103,42	103,42
43	Vapor	338,84	468,53	872,33	Vapor	331,14	331,14	429,35	429,35	750,53	750,53
44	Condensador	20,96	29,56	43,93	Condensador	22,65	20,38	32,67	27,65	50,58	39,45
45	Refrervedor	11,59	14,31	22,41	Refrervedor	12,73	11,45	15,98	13,52	26,05	19,32
46	Coluna e pratos	37,99	23,93	29,03	Coluna e pratos	41,29	37,59	26,73	22,65	38,24	25,95
47	Total	509,10	653,62	1140,57	Total	506,11	498,86	616,50	604,95	1021,3	991,1
49	<b>Outros resultados</b>				<b>Outros resultados</b>						
50	Lucro, R\$/mês	1.556.395,71	1.531.980,73	1.451.749,08	Lucro, R\$/mês	1.559.177,24	1.560.447,24	1.541.046,67	1.542.872,46	1.474.195,31	1.479.239,60
51	Custo, R\$/mês	83.583,96	107.692,02	187.923,67	Custo, R\$/mês	83.388,19	82.197,96	101.580,69	99.672,89	168.255,62	163.296,76
52	Consumo de energia, J	9,09E+09	1,26E+10	2,34E+10	Consumo de energia, J	8,89E+09	8,89E+09	1,15E+10	1,15E+10	2,01E+10	2,01E+10
53	$\bar{V}_i$ inicial, kmol/s	0,056	0,078	0,144	$\bar{V}_i$ inicial, kmol/s	0,044	0,055	0,051	0,071	0,067	0,124
54	$\bar{V}_i$ final, kmol/s	0,056	0,078	0,144	$\bar{V}_i$ final, kmol/s	0,065	0,055	0,092	0,071	0,183	0,124

## 6.3 ESTUDO DE PROJETOS DE INSTALAÇÕES

Neste item, serão avaliadas diferentes instalações, “design” completo, isto é, a coluna, o refeedor e o condensador são “novos”. As comparações serão realizadas entres os modos de operação, e também em cada modo de operação.

### 6.3.1 Operação com refluxo constante

#### 6.3.1.1 Estudo de caso RC-V

Deseja-se obter o mesmo produto e a mesma quantidade deste produto, no mesmo tempo de destilação. Permanecem também inalteradas a vazão de destilado e a carga inicial.

As variáveis deste estudo RC-V são a taxa de refluxo, o número de pratos ideais, e as áreas do condensador e do refeedor, necessárias ao processo.

Foram estudadas três situações, com número de estágios ideais igual a 9, 10 e 12; as taxas correspondentes de refluxo externo, são de 12, 8 e 6, respectivamente.

Quando se deseja operar a uma taxa de refluxo constante, com valores distintos de uma batelada para outra, sem alterar a vazão de destilado, são necessárias diferentes instalações, pois, neste caso, a vazão do vapor que sai do topo da coluna deverá ser distinta.

Por outro lado, uma melhor separação pode ser conseguida através de uma taxa de refluxo mais elevada ou usando-se uma coluna com um número maior de estágios de separação.

Os resultados de simulação deste estudo RC-V estão mostrados na tabela 33 (ver item 6.2.3.3). Observa-se que, para o caso de menor taxa de refluxo, igual a 6 (caso base RC), tem-se o menor custo total por hora (ver linha 37 na tabela 33), em que se obtém o maior lucro mensal (ver linha 49 na tabela 33). A explicação disso é

que, ao se optar por uma taxa de refluxo menor, tanto os consumos das utilidades, como as áreas dos trocadores de calor são menores (somente o número de estágios de separação requerido é maior), comparados com os dos outros casos.

Uma outra observação é que, para o caso de se operar com uma menor taxa de refluxo, as vazões das correntes internas pela coluna são menores. Isso faz com que o diâmetro da coluna compatível com a operação possa ser menor. Então, embora o número de estágios requerido seja mais elevado (por causa da redução da taxa de refluxo), o custo da coluna (ver linha 45 na tabela 33) ainda assim é menor, comparado com os dos outros casos, devido à necessidade de um menor diâmetro da coluna.

Então, nas condições estudadas, é mais interessante optar por uma destilação com menor taxa de refluxo, desde que seja suficiente para a purificação proposta, pois, assim, reduzem-se tanto os custos de instalação como os operacionais.

### **6.3.2 Operação com composição de destilado constante**

#### *6.3.2.1 Estudo de caso RV-V*

Este estudo é de “design” completo, deseja-se obter o mesmo produto, e a mesma quantidade de produto, e verificar qual a melhor instalação para operar com refluxo variável mantendo-se a vazão de destilado constante (portanto a vazão do vapor de topo é variável). Para isto, altera-se a taxa de refluxo inicial para alterar também o número de pratos ideais (as duas variáveis estão inter-relacionadas para uma dada separação desejada, conforme visto antes) e as respectivas áreas dos trocadores de calor.

Mantêm-se fixas a quantidade de carga inicial, a vazão de destilado, a composição do produto e a quantidade destilada. Foram estudadas três situações, com número de estágios ideais igual a 9, 10 e 12; as taxas correspondentes de

refluxo externo, no início da destilação, são de 6, 5 e 4, respectivamente.

Pelos resultados apresentados na tabela 33 (apresentada no item 6.2.3.3), observa-se que, para o caso de maior taxa de refluxo inicial, igual a 6 (caso RV-DC 2b), a destilação pode ser processada no menor tempo (ver linha 19 na tabela 33) entre os três casos estudados.

Mas, o menor custo total por mês ocorre quando a taxa de refluxo inicial é a mínima das analisadas (ver caso base RV-DC, na tabela 33), em que se obtém o maior lucro mensal (ver figura 37). A explicação disso é a mesma comentada no estudo anterior RC-V, item 6.3.1.1.

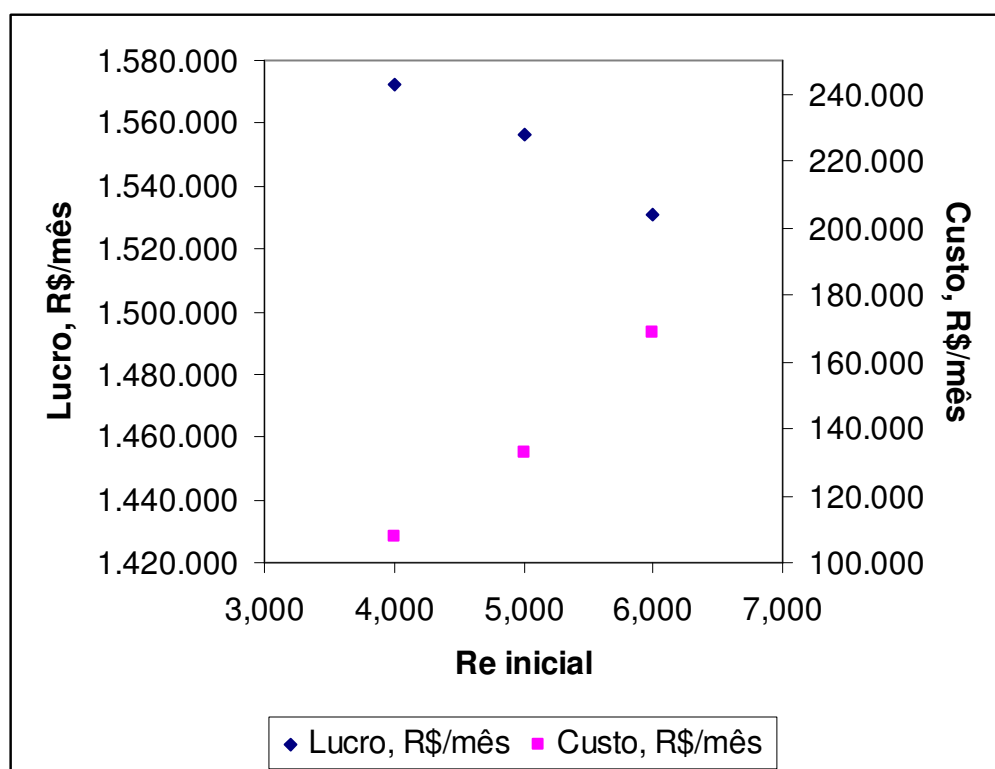


Figura 37 - Avaliação econômica em função da taxa de refluxo inicial para o estudo RV-V.

Então, nas condições estudadas, também é mais interessante optar por uma destilação com menor taxa de refluxo possível, pois, assim, reduzem-se tanto os custos de instalação como os operacionais.

### 6.3.2.2 Estudo de caso RV-VI

Deseja-se dimensionar uma instalação para processar a mesma quantidade de produto no mesmo tempo. Este estudo difere do anterior (RV-V item 6.3.2.1) pois, agora, o tempo de destilação é sempre o mesmo em todos os casos comparados (ao invés de a vazão de destilado ser a mesma, como o foi no RV-V). Estudam-se os casos de 9, 12 e 20 pratos ideais e taxa de refluxo inicial 6; 4; e 3,2 respectivamente, operando com composição de destilado constante e com vazão de destilado constante (a variação do refluxo é devida à variação da vazão do vapor de topo).

Como já visto anteriormente para o estudo de caso C-VII, para operar com uma taxa de refluxo menor, é necessária uma instalação com maior número de estágios de separação, mas, por outro lado, áreas menores dos trocadores de calor (pois a taxa de refluxo é menor), quando se deseja obter o mesmo produto no mesmo tempo. Os resultados deste estudo RV-VI estão na tabela 34 (item 6.2.3.4), observar os casos RV-DC 10d, 10a e 10c.

Assim como no estudo anterior RV-V, obtém-se o maior lucro mensal no caso em que a instalação dispõe de mais pratos ideais e menores áreas dos trocadores de calor. O lucro mensal maior deve-se à redução tanto do custo dos equipamentos (menores áreas dos trocadores de calor, menor diâmetro da coluna) como dos custos operacionais (menores consumos das utilidades) em face da menor taxa de refluxo.

### 6.3.2.3 Estudo de caso RV-VII

Agora, avalia-se a mesma situação apresentada no RV-VI, mas, desta vez, o refluxo varia devido à variação da vazão de destilado (a vazão do vapor que sai do topo da coluna é mantida constante).

Os resultados estão apresentados na tabela 34, no item 6.2.3.4, observar os casos RV-V1C 10d, 10a e 10c.

Nesta verificação, o maior lucro mensal é obtido também na instalação com maior número de pratos ideais, e menores áreas dos trocadores de calor.

### 6.3.3 Comparação

#### 6.3.3.1 Estudo de caso C-VIII

Finalmente, deseja-se concluir qual o melhor modo de operar e qual a melhor instalação para se obter o melhor lucro, obtendo-se o mesmo produto, na mesma quantidade e no mesmo tempo. A carga inicial e a composição inicial assim como a quantidade remanescente final e sua composição mantêm-se fixas em todos os casos analisados.

Serão analisados os modos de destilação, a saber: refluxo constante (RC), refluxo variável com vazão de destilado constante (RV-DC) e refluxo variável com vazão de vapor de topo constante (RV-V1C).

Conforme mencionado anteriormente, para uma dada separação desejada, há as opções de se usar uma coluna com maior número de pratos ou adotar-se uma taxa de refluxo maior. Neste estudo C-VIII, numa primeira análise, serão avaliados os aspectos econômicos dessas duas possibilidades, para um dado modo operacional.

Na figura 38, estão mostrados três casos com número de pratos ideais iguais a 9, 12 e 20 e, para cada um deles, estão representadas as taxas inicial e final de refluxo externo da operação com refluxo variável, necessárias para a obtenção de uma dada quantidade de destilado, de dada composição, num tempo de processo também fixo. Nesta mesma figura, está mostrado, para comparação, o valor da taxa de refluxo externo se a operação é conduzida com ele constante, para uma mesma situação.

Observando a figura 38, nota-se que a taxa de refluxo no modo de operação com refluxo constante (RC) é a metade dos valores da taxa de refluxo inicial e final da operação com composição do destilado constante (RV), quando se deseja a mesma quantidade e qualidade de destilado, num mesmo tempo de destilação.

Por outro lado, comparando-se os lucros mensais (ver tabela 34, no item 6.2.3.4), para um dado modo de destilação, observa-se que o maior valor encontrado refere-se à situação de operar-se com uma taxa de refluxo mais baixa

(requerendo, com isso, um maior número de estágios de separação). Isso ocorre indistintamente nos três processos de destilação (comparar o valor de lucro mensal obtido para a instalação com o número de pratos ideais igual a 20, em cada modo operacional, com os de menor número de estágios).

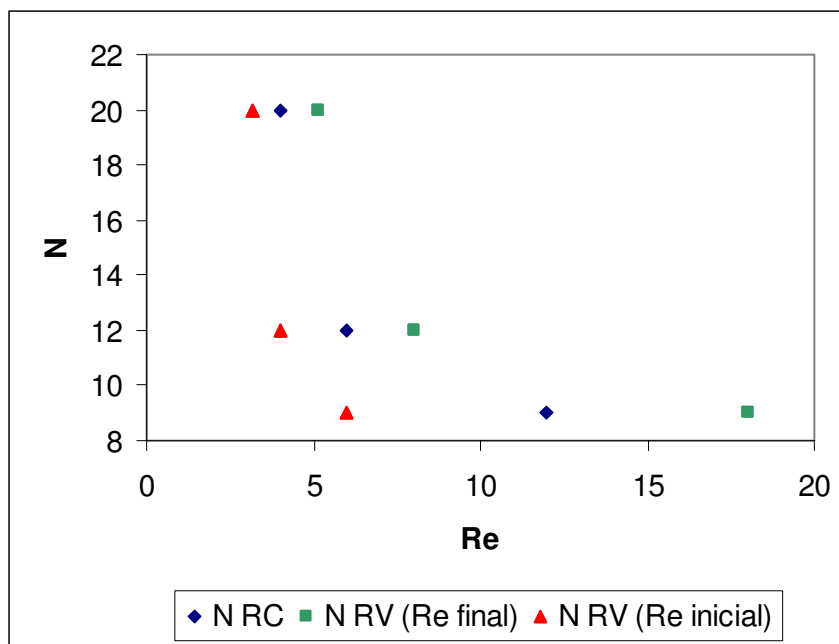


Figura 38 - Número de estágios ideais versus taxa de refluxo para o estudo C-VIII.

Essa constatação já tem sido observada anteriormente e uma explicação encontrada, conforme visto, é que, operando com uma taxa de refluxo mais baixa, os custos das utilidades requeridas são menores, assim como as áreas dos trocadores de calor e o diâmetro da coluna (somente o número de estágios ou a altura da coluna precisa ser maior).

Um aspecto interessante refere-se ao custo da coluna de destilação. Ele pode aumentar ou diminuir em função do número de pratos. De fato, comparando-se os custos das colunas para 9 e 12 estágios ideais, num dado modo operacional (ver tabela 34, no item 6.2.3.4), nota-se que a de menor número de pratos é mais cara. Mas, entre as colunas de 12 e 20 pratos teóricos, ocorre o oposto, ou seja, a mais barata é a com maior número de estágios (20, no caso). Uma interpretação disso é que o custo de uma coluna de destilação depende do seu diâmetro e da altura, em função, por sua vez, do número de estágios de separação disponível. Por outro lado, quando a taxa de refluxo é mais baixa, requerem-se mais pratos (altura da coluna



maior), mas, como as vazões das correntes internas pela coluna (líquido e vapor) são menores, o diâmetro da coluna pode ser reduzido. Então, há uma taxa de refluxo em que o custo da coluna é o mais baixo. Vale ressaltar que, na determinação dessa taxa de refluxo mais econômico, há de se considerar não apenas o custo da coluna envolvida, mas todos os demais custos, tanto dos trocadores de calor como os operacionais, referentes aos consumos das utilidades.

Como os custos operacionais têm-se mostrado determinantes na avaliação econômica de análises anteriores, uma primeira comparação desse estudo C-VIII entre os três processos de destilação é exatamente neste aspecto.

Na figura 39, nota-se que a operação com taxa de refluxo constante (RC) apresenta maior consumo de energia que os dois modos de refluxo variável, e que estes dois modos de refluxo variável requerem a mesma quantidade de energia, pois a vazão do vapor de topo no RV-V1C é aproximadamente igual ao valor médio do RV-DC.

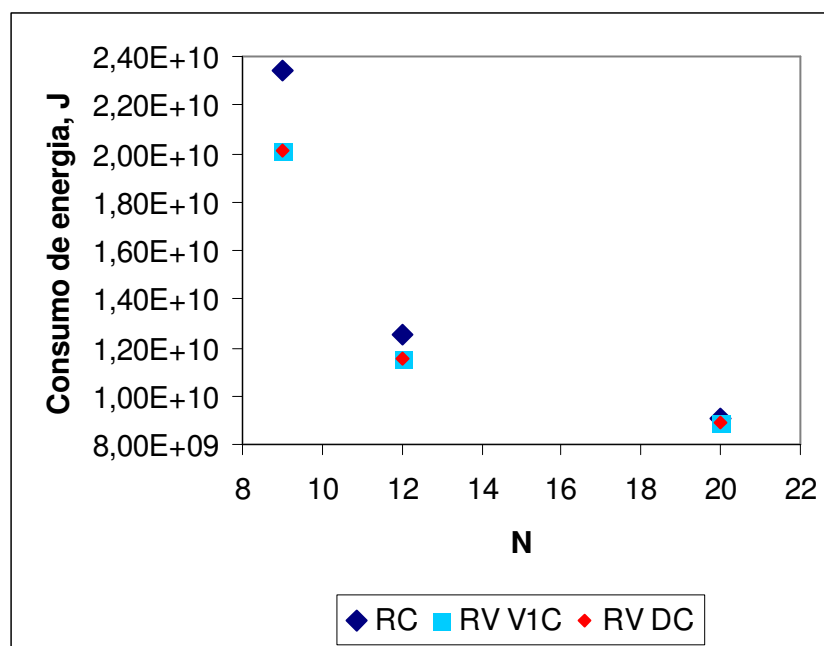


Figura 39 - Consumo de energia versus número de estágios ideais para o estudo C-VIII.

Em termos de áreas de troca térmica dos trocadores de calor, necessárias para uma mesma separação desejada e para um dado número de estágios ideais, observa-se, pela tabela 34, que os valores são crescentes para RV-V1C (requer os menores tamanhos), RC e RV-DC, nessa ordem. Por outro lado, essa diferença se

atenua à medida que o número de estágios de separação da instalação aumenta.

Finalmente, a comparação dos modos operacionais em termos de lucro mensal está apresentada na figura 40 e na tabela 34.

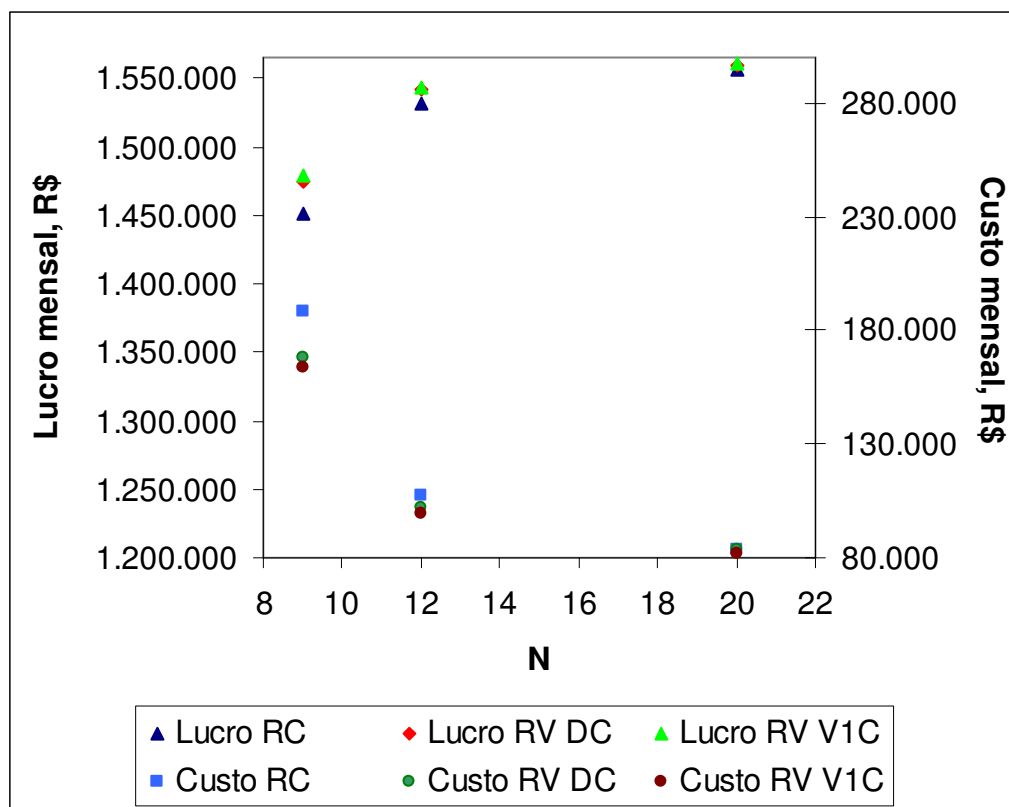


Figura 40 - Lucro e custo versus número de estágios ideais para o estudo C-VIII.

Observando o lucro mensal obtido em todos os casos, linha 50 da tabela 34, o modo mais vantajoso para se operar é o refluxo variável com composição de destilado constante, mantendo-se fixa a vazão do vapor de topo (RV-V1C). Por outro lado, a diferença no ganho deste modo de operação em relação aos outros diminui, à medida que o número de estágios de separação disponível na instalação aumenta. De fato, nota-se, pela figura 40, que para uma coluna de 20 estágios ideais, os três processos conduzem praticamente a um mesmo lucro mensal.

## 7 CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi desenvolvida uma modelagem matemática sobre o estudo dos modos de destilação em batelada. O modelo foi implementado numa planilha eletrônica.

Em escala de laboratório, os resultados preditos pelas simulações matemáticas mostraram-se de acordo com os obtidos experimentalmente.

Em seguida, extrapolando a sua validade em escala industrial, foram feitas diversas simulações sobre o comportamento do processo de destilação de uma mistura binária constituída de metanol e etanol. Foram analisados dois modos: destilação com refluxo constante e com composição do destilado constante ou refluxo variável; para este último, pode-se manter a vazão do destilado constante, ou a vazão do vapor de topo constante.

Para as condições estudadas, quando se opera com composição de destilado constante (refluxo variável), os consumos das utilidades (vapor de aquecimento e água de resfriamento) são menores em relação aos da destilação com refluxo constante.

No caso da destilação sob refluxo variável, quando se mantém a vazão de destilado constante, observou-se que se consegue uma produtividade mais elevada quando se impõe ao processo uma variação dessa taxa “o mais rapidamente possível”. Para o modo de refluxo variável e vazão de vapor constante, não se notou diferença significativa nesse aspecto.

Para uma instalação existente, verificou-se, através das simulações matemáticas feitas dentro das premissas do estudo, que o modo em que o tempo de destilação é menor, se obtém maior produção mensal e portanto, maior lucro mensal, é o de destilação com composição de destilado constante, mantendo-se a vazão do vapor de topo constante.

No caso de projeto de uma instalação nova, constatou-se que é sempre mais econômico optar-se por uma taxa de refluxo menor possível, pois a necessidade de um maior número de estágios de separação, decorrente dessa operação, não representa um custo adicional relevante, em relação aos ganhos (menores custos operacionais, maior lucro mensal).

Quando comparados os modos de destilação estudados, no cenário de uma instalação nova, de novo, o mais vantajoso é o de refluxo variável e vazão do vapor de topo constante, pois requer menores áreas do condensador e do refeedor para uma dada separação num dado tempo de destilação. Por outro lado, à medida que se adota, no projeto, um número maior de estágios de separação na coluna, para processar uma mesma quantidade no mesmo tempo, a diferença de lucro mensal torna-se praticamente indistinta para os processos em questão.

## 8 SUGESTÕES PARA ESTUDOS FUTUROS

O número de variáveis envolvidas num estudo de destilação em batelada é relativamente extensa. Por outro lado, no presente trabalho, foram adotadas algumas simplificações.

Então, para tornar os resultados mais abrangentes e ainda mais realistas num escopo industrial, pode-se sugerir:

- (a) calcular os coeficientes individuais de transporte de calor e o global, tanto no refeedor como no condensador, através das respectivas correlações de projeto, em função das condições de processo, para uma geometria dada (no cenário de “rating”) ou um dimensionamento completo;
- (b) estudar outros dispositivos de contato líquido-vapor, como recheio irregular ou estruturado;
- (c) calcular o diâmetro e a altura da coluna de destilação, usando equações de projeto adequadas;
- (d) considerar a variação da área de troca térmica do refeedor, à medida que diminui a quantidade remanescente, ao longo do processo de destilação;
- (e) incluir, no custo do refeedor, a influência do seu volume;
- (f) incluir, nos cálculos, a estimativa da eficiência de destilação em função das variáveis de processo (geometria do prato, vazões das correntes, propriedades da mistura, taxa de refluxo etc.);
- (g) considerar, no modo de destilação de refluxo constante o fracionamento do produto de topo em potes coletores distintos e proceder posteriormente a sua devida redestilação;
- (h) estimar, de modo mais “preciso”, os tempos das etapas de processo que não são de destilação propriamente dita;
- (i) fazer uma análise de sensibilidade, variando-se os índices e os parâmetros adotados;
- (j) rever os índices de custo e preço adotados, principalmente na avaliação dos custos dos equipamentos e na estimativa da sua depreciação;
- (k) estender o estudo para outras misturas binárias e, eventualmente, multicomponentes;

- (l) considerar a influência da quantidade de líquido retida nos equipamentos (“hold up”);
- (m) usar códigos comerciais de programa de simulação de processo e comparar os resultados obtidos com os previstos pela modelagem fenomenológica.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BAASEL, W. D. **Preliminary chemical engineering plant design**. 2<sup>nd</sup>. ed. New York: Van Nostrand Reinhold, 1990. 572p.

BAROLO, M.; BERTO, F. Composition control in batch distillation: binary and multicomponent mixtures. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, Washington, v. 37, n. 12, p.4689-4698, 1998.

BERNOT, C; DOHERTY, M. F.; MALONE, M. F. Patterns of composition change in multicomponent batch distillation. **Chemical Engineering Science**, v.45, n. 5, p.1207-1221, 1990.

BILLET, R. **Distillation engineering**. New York: Chemical Publishing, 1979. 519p.

BLOCK, B. Batch distillation of binary mixtures provides versatile process operations. **Chemical Engineering**, New York, v. 68, n. 3, p.87-98, 1961.

BLOCK, B. Control of batch distillations. **Chemical Engineering**, New York, v. 74, n. 2, p. 147-150, 1967.

COATES, J.; PRESSBURG, B. S. How to analyze the calculations for batch rectification in tray columns. **Chemical Engineering**, New York, v. 68, n. 2, p. 131-136, 1961.

COWARD, I. The time-optimal problem in binary batch distillation. **Chemical Engineering Science**, London, v. 22, n. 4, p. 503-516, 1967.

DIMOPLON, W. Estimating specific heat of liquid mixtures. **Chemical Engineering**, New York, v. 79, n. 22, p. 64-66, 1972.

DIWEKAR, U. M.; MADHAVAN, K. P. Multicomponent batch distillation column design. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, Washington, v. 30, n. 4, p. 713-721, 1991.

DOMENECH, S.; ENJALBERT, M. Program for simulating batch rectification as a unit operation. **Computers and Chemical Engineering**, New York, v. 5, n. 3, p. 181-184, 1981.

ELLERBE, R. W. Batch distillation basics. **Chemical Engineering**, New York, v. 80, n. 12, p. 110-116, 1973.

EVARISTO, K. S.; FIGUEIREDO, R. S. Custo do vapor em agroindústria. In: CONGRESSO DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE ECONOMIA, ADMINISTRAÇÃO E SOCIOLOGIA RURAL, 46., 2008, Goiânia. Resumos dos trabalhos. Goiânia: UFG, 2008. Disponível em: <<http://www.sober.org.br/palestra/9/393.pdf>> Acesso em: 15 jun. 2008.

FILETI, A. M. F.; CRUZ, S. L.; PEREIRA, J. A. F. R. Control strategies analysis for a batch distillation column with experimental testing. **Chemical Engineering and Processing**, Lausanne, v. 39, n. 2, p. 121-128, 2000.

GEANKOPLIS, C. J. **Transport processes and separation process principles (includes unit operations)**. 4<sup>th</sup>. ed. New Jersey: Prentice Hall, 2003.

GMEHLING, J.; ONKEN, U. **Vapor-liquid equilibrium data collection: Organic hydroxyl compounds alcohols**. Frankfurt: Dechema, 1977. v. I, part 2a.

GORSEK, A.; GLAVIC, P. **Design of batch versus continuous processes**. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 75, p. 709-717, 1997.

GUY, J. L. Modeling batch distillation in multitray columns. **Chemical Engineering**, New York, v. 92, n. 1, p. 99-103, 1983.

HÁLA, E. **Experimental determination of vapor-liquid equilibrium; normal and low-pressure region**. *Collect. Czech. Chem. Commun.*, v.54, p.839-61,1989 apud SALVAGNINI, W. M. Contribuição à metodologia de cálculo do coeficiente de atividade em diluição infinita a partir de dados ebuliométricos para sistemas binários de desvios positivos: proposta de novo método e sua comparação com os existentes. e.2. São Paulo: EPUSP, 1993. 203 p.

Jaeger Trays and Hardware. Disponível em: <[http://www.jaeger.com/trays\\_hdwr.htm](http://www.jaeger.com/trays_hdwr.htm)> Acesso em: 15 jul. 2008.



KIM, Y. H. Optimal design and operation of a multi-product batch distillation column using dynamic model. **Chemical Engineering and Processing**, Lausanne, v. 38, n. 1, p. 61-72, 1999.

KIM, K.; DIWEKAR, U. M. Comparing batch column configurations: parametric study involving multiple objectives. **AIChE Journal**, New York, v. 46, n. 12, p. 2475-2488, 2000.

KISTER, H. Z. **Distillation design**. New York: McGraw-Hill, 1992. 710p.

KJELSTRUP, S.; KOEIJER, G. M. de. Transport equations for distillation of ethanol and water from the entropy production rate. **Chemical Engineering Science**, London, v. 58, n. 7, p. 1147-1161, 2003.

KOPPEL, P. M. Fast way to solve problems for batch distillations. **Chemical Engineering**, New York, v. 79, n. 23, p. 109-112, 1972.

KRELL, E. **Handbook of laboratory distillation**. Amsterdam: Elsevier, 1963. 561p.

KUMANA, J. D. Run batch distillation processes with spreadsheet software. **Chemical Engineering Progress**, New York, v. 86, n. 12, p. 53-57, 1990.

LEWIS, W. K. The efficiency and design of rectifying columns for binary mixtures. **The Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, Easton, v. 14, n. 6, p. 492-496, 1922.

MONROY-LOPERENA, R.; ALVAREZ-RAMIREZ, J. A note on the identification and control of batch distillation columns. **Chemical Engineering Science**, London, v. 58, n. 20, p. 4729-4737, 2003.

MURPHREE, E. V. Rectifying column calculations: with particular reference to N component mixtures. **Industrial and Engineering Chemistry**, Washington, v. 17, n. 7, p. 747-750, 1925.

Newsmart (Nantong) Group. Disponível em: <<http://www.packing-china.com>>  
Acesso em: 15 jul. 2008.

NODA, M.; CHIDA, T.; HASEBE, S.; HASHIMOTO, I. On-line optimization system of pilot scale multi-effect batch distillation system. **Computers and Chemical Engineering**, New York, v. 24, n. 2-7, p. 1577-1583, 2000.

OPPENHEIMER, O.; SØRENSEN, E. Comparative energy consumption in batch and continuous distillation. **Computers and Chemical Engineering**, New York, v. 21, suppl. 1, S529-S534, 1997.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**. 7<sup>th</sup> ed. New York: McGraw-Hill, 1997.

ROBINSON, C. S.; GILLILAND, E. R. **Elements of fractional distillation**. 4<sup>th</sup> ed. New York: McGraw-Hill, 1950. 492p.

RODRIGUEZ-DONIS, I.; PARDILLO-FONTDEVILA, E.; GERBAUD, V.; JOULIA, X. Synthesis, experiments and simulation of heterogeneous batch distillation processes. **Computers and Chemical Engineering**, New York, v. 25, n. 4, p. 799-806, 2001.

ROONEY, J. M. Simulating batch distillation. **Chemical Engineering**, New York, v. 91, n. 10, p. 61-64, 1984.

ROSE, L. M. **Distillation design in practice**. Amsterdam: Elsevier, 1985. 307.p.

SALVAGNINI, W. M. **Contribuição à metodologia de cálculo do coeficiente de atividade em diluição infinita a partir de dados ebuliométricos para sistemas binários de desvios positivos: proposta de novo método e sua comparação com os existentes**. 1993. 203p. Tese (Doutorado) Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1993.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J. **Separation process principles**. New York: John Wiley, 1998. 886p.

SKOGESTAD, S.; WITTEGENS, B.; LITTO, R.; SØRENSEN, E. Multivessel batch distillation. **AIChE Journal**, New York, v. 43, n. 4, p. 971-978, 1997.

SKOURAS, S.; SKOGESTAD, S.; KIVA, V. Analysis and control of heteroazeotropic batch distillation. **AIChE Journal**, New York, v. 51, n. 4, p. 1144-1157, 2005.

STICHLMAIR, J. G.; FAIR, J. R. **Distillation principles and practices**. New York: Wiley-VCH, 1998. 524p.

TREYBAL, R. E. **Mass-transfer operations**. 3.ed. New York: McGraw-Hill, 1980. 784p.

TURTON, R.; BAILIE, R. C.; WHITING, W. B.; SHAEIWITZ, J. A. **Analysis, synthesis, and design of chemical processes**. Upper Saddle River: Prentice Hall PTR, 1998. 814p.

WARTER, M.; DEMICOLI, D.; STICHLMAIR, J. Operation of a batch distillation column with a middle vessel: experimental results for the separation of zeotropic and azeotropic mixtures. **Chemical Engineering and Processing**, Lausanne, v. 43, n. 3, p. 263-272, 2004.

van WINKLE, M. **Distillation**. New York: McGraw-Hill, 1967. 684p.

YAWS, C. L. **Physical properties: a guide to the physical, thermodynamics and transport property data of industrially important chemical compounds**. New York: McGraw Hill, 1977. 239p.

ZAMPROGNA, E.; BAROLO, M.; SEBORG, D. E. Estimating product composition profiles in batch distillation via partial least squares regression. **Control Engineering Practice**, Kidlington, v. 12, n. 7, p. 917–929, 2004.

ZAVALA-LORÍA, J. C.; CÓRDOVA-QUIROZ, A. V.; ROBLES-HEREDIA, J. C.; ANGUEBES-FRANSESCHI, F; NAVÁEZ-GARCÍA, A; ELVIRA-ANTONIO, N. Efecto de la derivación del reflujo em destilación discontinua. **Revista Mexicana de Ingeniería Química**, v. 5, p. 109-113, 2006. Suplemento.