



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

Polyana Gomes de Aguiar¹ – polyana.eq@gmail.com

Daiane Ribeiro Dias² – daianedias2301@gmail.com

¹ Instituto Federal do Norte de Minas Gerais, Campus Montes Claros – Montes Claros, MG, Brasil

² Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil

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

Palavras-chave: Destilação. Software livre. Aplicação em Engenharia Química.

1. INTRODUÇÃO

É cada vez mais comum o uso de softwares livres na Engenharia Química pois torna automática a aplicação de variados processos e de forma menos custosa. O COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) é uma coleção de componentes de software para a criação de simulações de fluxogramas da Engenharia em estado estacionário. Possui uma variedade de tipos de operações unitárias, como bombas, compressores, expansores, dispositivos de aquecimento e resfriamento, reatores, misturadores e divisores.

O simulador COCO é um software livre para, dentre outras aplicações, modelagem de colunas de destilação (Figura 1). Ele trabalha num ambiente de simulação baseado em modelos de estágios apresentando uma área de interação fácil e simples. O software é composto por uma coleção de pacotes que abrangem a interface de manipulação dos

processos tais como seus fluxogramas (*COFE*: Cape-Open Flowsheet Environment), incluem as informações de propriedades termodinâmicas de seus componentes da base de dados (*TEA*: Thermodynamics for Engineering Applications), de equipamentos para operações unitárias (*COUSCOUS*: Cape-Open Unit Operations Simple) e de propriedades para reações químicas (*CORN*: Cape-Open Reaction Numerics).

O sistema CAPE-OPEN possui banco de dados próprio com propriedades termodinâmicas necessárias para a modelagem do processo analisado e também permite a inserção de pacotes de dados externos ao software por qualquer usuário, caso este necessite. Isso torna o COCO uma ferramenta flexível e útil para diversos processos.

A modelagem ocorrida no COCO possibilita resultados de processos com diversas operações unitárias diferentes, desde sistemas simples a complexos, com mono ou multicomponentes.

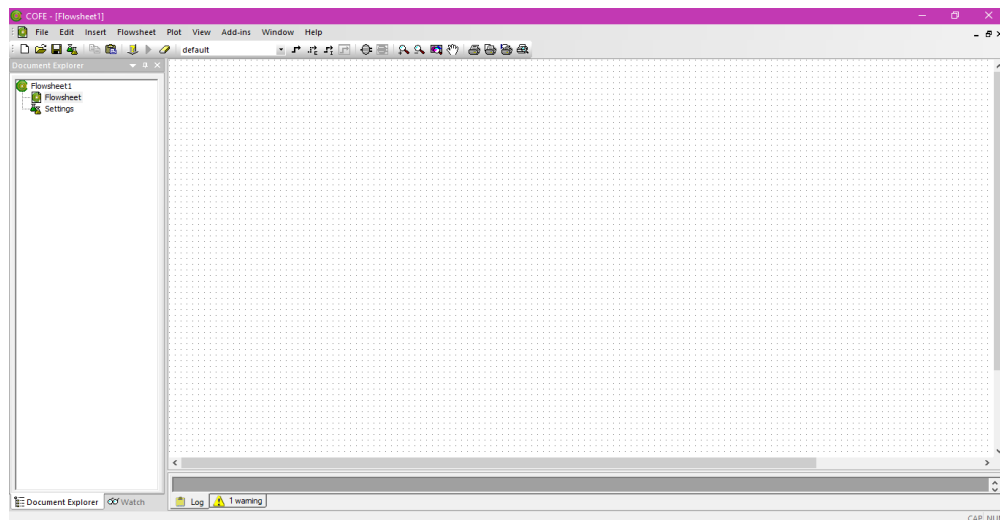


Figura 1- Interface inicial do COCO.

O objetivo deste trabalho é apresentar a importância e simplicidade do software de código aberto COCO (*CAPE-OPEN to CAPE-OPEN*) na simulação do processo PSD (destilação por oscilação de pressão) para produção de EAC (etanol anidro combustível).

2. REFERENCIAL TEÓRICO

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

Um azeótropo, independente de apresentar ponto de mínimo ou de máximo, pode se classificar em homogêneo (se houver uma fase líquida em equilíbrio com a fase vapor e em

mesma composição) ou heterogêneo (se houver mais de uma fase líquida em equilíbrio e mesma composição de vapor). Para azeotrópicos heterogêneos, a composição da fase de vapor é igual à composição geral das duas (ou mais) fases líquidas (PERRY, 2008)

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

Segundo a ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) (2011), o EAC deve apresentar, no mínimo, 99,3% em mol para ser legalmente comercializado. Essa fração é superior ao 89% em fração molar que se pode produzir em uma torre comum de destilação. Há diversos processos de separação para se ter essa alta pureza do etanol e, dentre eles, a destilação por oscilação de pressão, em inglês Pressure Swing Distillation (PSD), pode ser bastante estudada, pois a composição desse azeótropo varia com a pressão do sistema, desaparecendo a condição de azeotropia em pressões abaixo de 11,5 atm (PERRY, 2008).

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

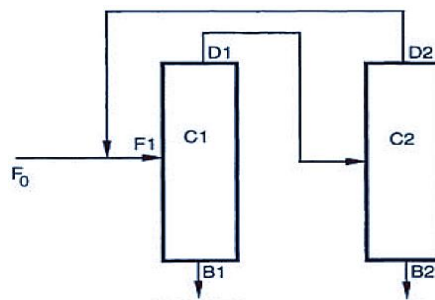


Figura 2- Fluxograma de processo PSD para azeótropo binário homogêneo

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

3. MATERIAL E MÉTODOS

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

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

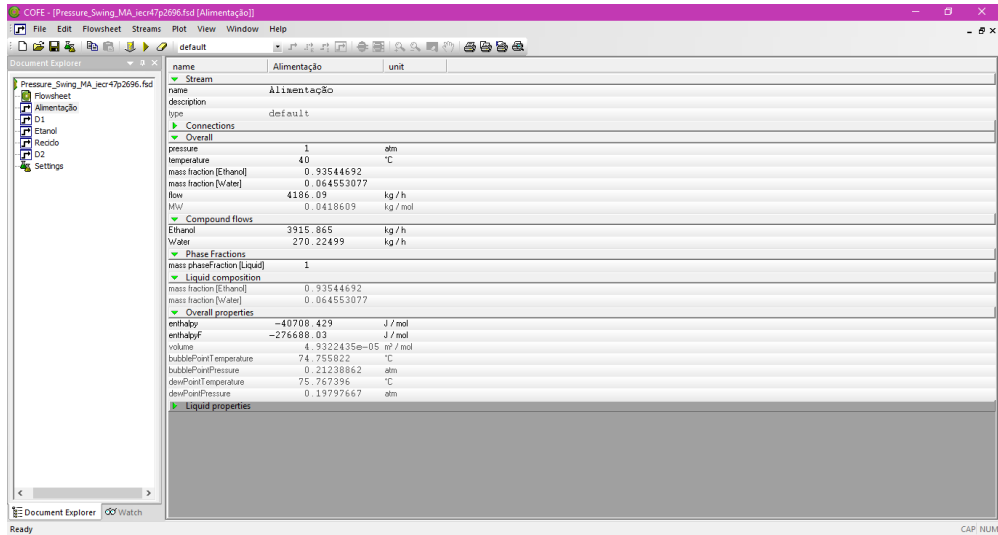


Figura 3- Dados de alimentação no processo.

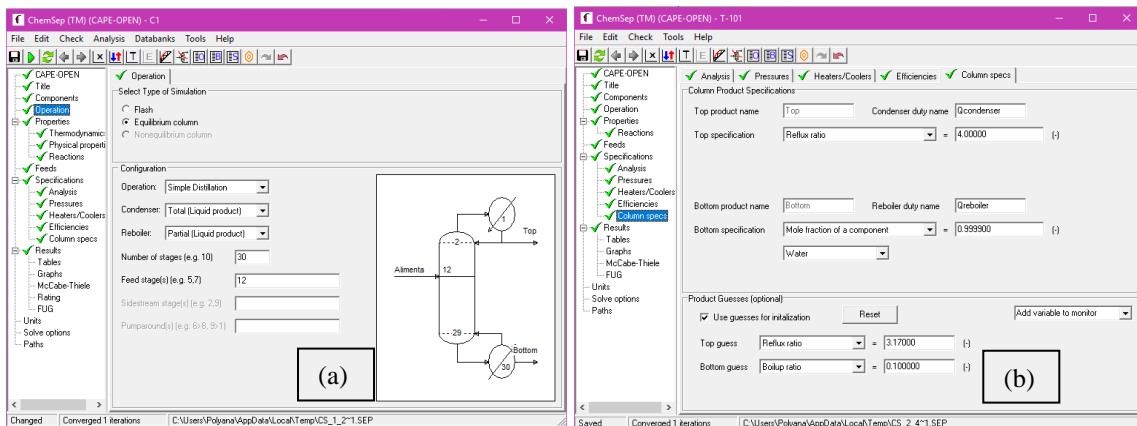


Figura 4- Configuração de estágios (a) e de especificações (b) da coluna C1.

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

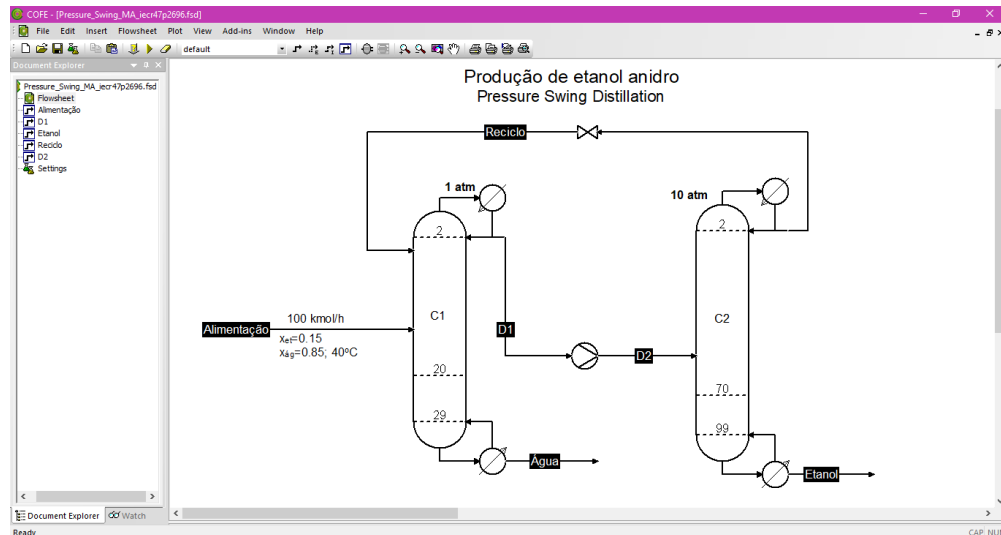


Figura 5- Fluxograma de trabalho no software.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

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

Tabela 1- Resultados do processo após simulação no software.

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

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

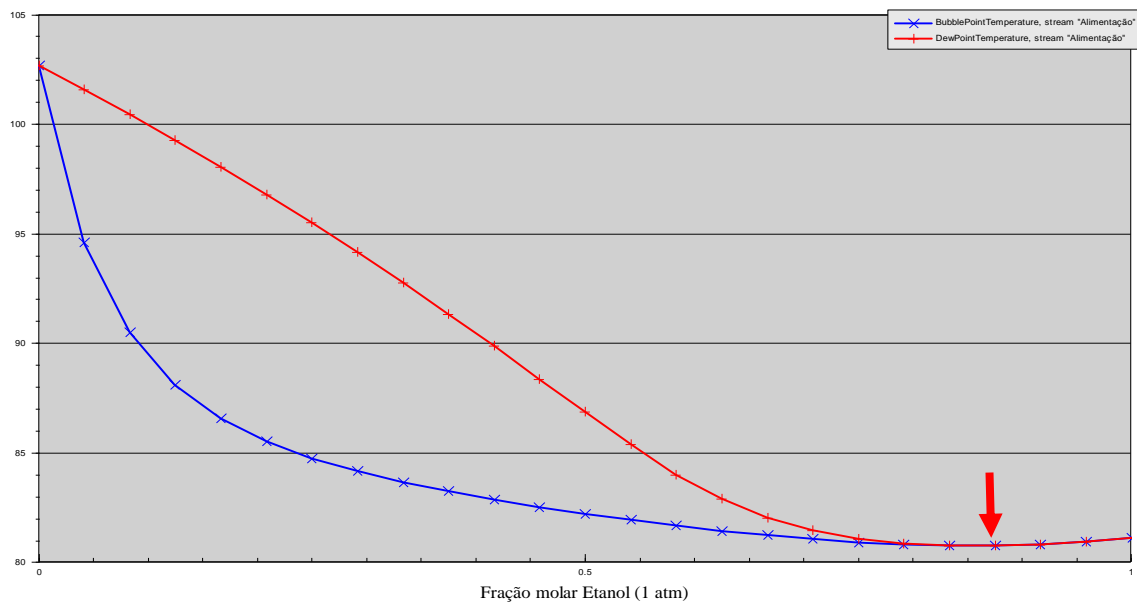


Figura 6- Curva Temperatura *versus* fração molar de etanol em C1.

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

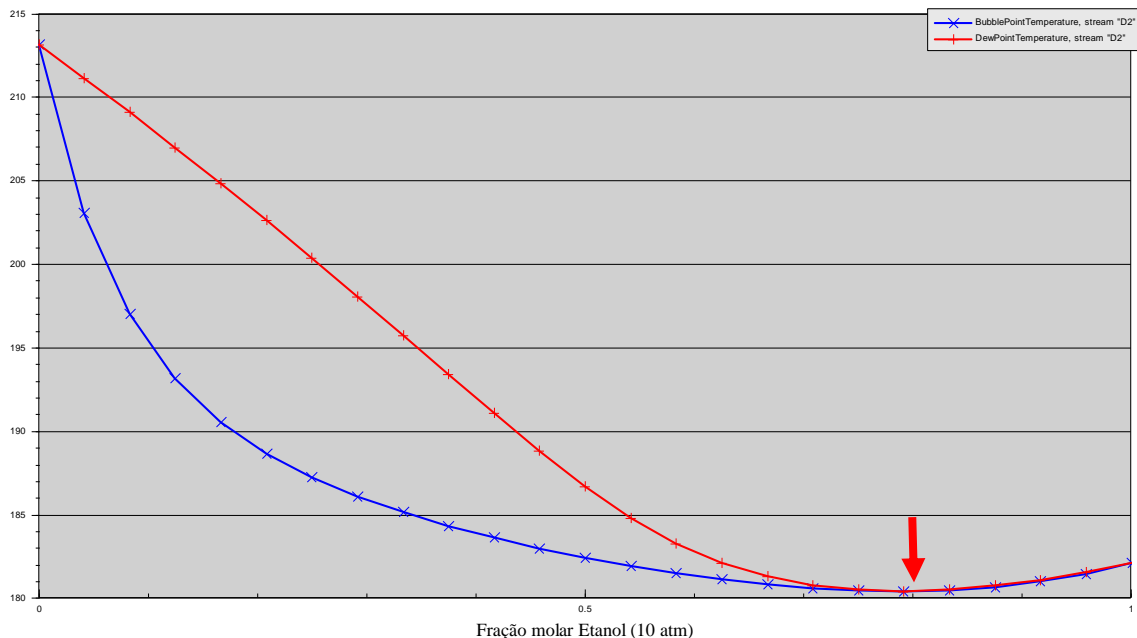


Figura 7- Curva Temperatura *versus* fração molar de etanol em C2.

5. CONCLUSÃO

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

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

REFERÊNCIAS

- Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (2011), *Resolução ANP nº 7, de 9.2.2011 – DOU 10.2.2011 – retificada DOU 14.4.2011*. Disponível em: <http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-anp/resol-anp/2011/fevereiro&item=ramp-7--2011> acesso em 03 de maio de 2018
- Figueirêdo, M. F. (2009), *Obtenção de etanol anidro via destilação extrativa: simulação e otimização*. Dissertação de mestrado. UFCG. Campina Grande – Paraíba.
- Francisquetti, M. C. C. (2014), *Modelagem, simulação e otimização de processos usando o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization)*. Monografia – Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia. Uberlândia.
- Perry, J.; Perry, R.; Green, D. (2008), *Perrys Chemical Engineers Handbook*. 8 ed. New York: McGraw-Hill.
- Smith, J. M.; Van Ness, H. C.; Abbott, M. M. (2011), *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*. 7 ed. Rio de Janeiro: LTC.

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

Abstract: *The use of software in Chemical Engineering has become important in the development of processes, since the study of these does not require that they are in large scale. Pressure oscillation distillation can be used to separate azeotropic mixtures which have a minimum point in relation to the operating temperature, but are difficult to address because of their complexity. In order to contribute to a better understanding of the pressure oscillation distillation processes, this work applies a practical example using the COCO software (Cape-Open to Cape-Open). The results were as expected and subject to discussion. It was possible to conclude the ease of use of the software, as well as its applicability even with complex processes.*

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