

Armando Zanone

**AUTOMATIZAÇÃO DO MÉTODO MCCABE THIELE UTILIZANDO
PLANILHA ELETRÔNICA**

São Caetano do Sul

2015

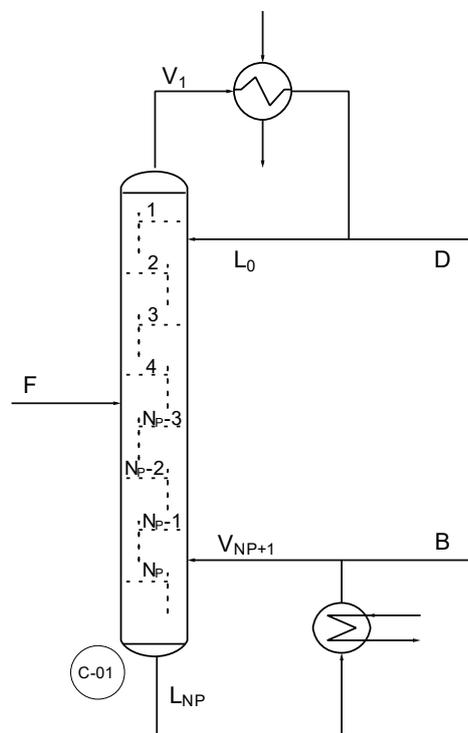
SUMÁRIO

1.	PLANILHA ELETRÔNICA	3
1.1.	PROCEDIMENTO E FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	3
1.1.1.	GRAUS DE LIBERDADE DA COLUNA DE DESTILAÇÃO	3
1.1.2.	EQUILÍBRIO DE FASES.....	7
1.1.2.1.	GRAUS DE LIBERDADE DO EQUILÍBRIO DE FASES	7
1.1.2.2.	CONSTRUÇÃO DA TABELA	8
1.1.3.	MÉTODO DE MCCABE THIELE.....	11
1.1.4.	BALANÇO DE MASSAS	12
1.1.5.	RESULTADOS GRÁFICOS	13
1.1.6.	PLANILHAS OCULTAS.....	14
1.1.6.1.	RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA	14
1.1.6.2.	NÚMERO DE ESTÁGIOS MINIMO	15
1.1.6.3.	NÚMERO DE ESTÁGIOS REAIS.....	17
1.1.6.4.	ALIMENTAÇÃO ÓTIMA	20
1.1.6.5.	PERFIL DE TEMPERATURA	21
2.	PRÓXIMOS PASSOS	22
	REFERÊNCIAS.....	23
	ANEXO	24

especificações deve ser fornecido, logo é necessário conhecer o conceito de graus de liberdade para que a coluna seja completamente especificada e apenas uma única solução seja possível (BAGAJEWICZ, 2007).

Considere a coluna da Figura 2 com N_P pratos e 2 componentes, condensador e refeedor totais. Serão admitidos como hipóteses as mesmas utilizadas no cálculo da planilha desenvolvida: todas as pressões são conhecidas (perfil de pressão constante e igual a P_T), bem como a vazão (F), composição² e temperatura³ da corrente de alimentação.

Figura 2 – Coluna com alimentação única, condensador e refeedor.



Para cada prato existem cinco variáveis (sendo j um prato e i um componente): temperatura (T_j), vazão de líquido (L_j), vazão de vapor (V_j), composição da fase líquida ($x_{j,i}$), composição da fase vapor ($y_{j,i}$). Assim, cada prato terá uma T_j , L_j e V_j totalizando $3 \cdot N_P$ variáveis. E haverá um $x_{j,i}$ e $y_{j,i}$ de cada substância em cada prato, totalizando $4 \cdot N_P$ variáveis. Logo, há um total de $7 \cdot N_P$ variáveis considerando-se apenas os pratos.

No condensador as variáveis são a temperatura (T_C), a vazão de refluxo (L_0) e de

² A composição será dada por z_A , sendo a composição do componente menos volátil dada pela relação $z_A + z_B = 1$.

³ A temperatura não será fornecida diretamente e sim indiretamente pelo fornecimento do valor "q".

destilado (D), a carga térmica (Q_C) e a fração de cada componente ($x_{C,i}$). Isso totaliza 6 variáveis.

No refeedor as variáveis também são a temperatura (T_R), a vazão de refluxo (V_{NP}) e de fundo (B), a carga térmica (Q_R) e a fração de cada componente ($y_{R,i}$). Isso totaliza 6 variáveis.

A análise das variáveis foi finalizada, então, apurando-se as equações existentes. O primeiro grupo de equações que pode ser encontrado são os balanços mássicos em cada prato da coluna para cada composto, logo encontra-se $2 \cdot N_P$ equações, como mostrado genericamente na equação (1). Sabe-se também que o somatório das frações dos componentes, tanto no líquido como no gás, é igual a um, logo conhecemos mais $2 \cdot N_P$ equações. Do balanço de massa dos pratos tem-se $4 \cdot N_P$ equações.

$$L_{j-1} \cdot x_{j-1,i} + V_{j-1} \cdot y_{j-1,i} - (L_j \cdot x_{j,i} + V_j \cdot y_{j,i}) + F_j \cdot z_{j,i} = 0 \quad (1)$$

No condensador, sabe-se que as composições que saem do primeiro prato serão as mesmas do líquido condensado, assim temos 2 relações ou equações, como mostra a equação (2). Além disso, tem-se o balanço de massa no refluxo equação (3). Sabe-se também que o somatório das frações dos componentes é um. Logo, no condensador, conhece-se 4 equações.

$$y_{1,i} = x_{C,i} \quad (2)$$

$$V_1 - (L_0 + D) = 0 \quad (3)$$

Analogamente no refeedor, sabe-se que as composições que saem do último prato serão as mesmas do vapor, assim tem-se 2 relações ou equações, como mostra a equação (4). Além disso, tem-se o balanço de massa no refluxo equação (5). Sabe-se também que o somatório das frações dos componentes é um. Logo, no refeedor, conhece-se 4 equações.

$$x_{NP,i} = y_{R,i} \quad (4)$$

$$L_{NP} - (V_{NP+1} + B) = 0 \quad (5)$$

O balanço global de massas ($F = D + B$) não entra na contagem, pois é obtido a partir da soma dos balanços dos pratos, condensador e refeedor, não sendo uma equação independente. Das relações de equilíbrio, equações (6) e (7), é possível encontrar as composições de vapor em cada prato em função da composição do líquido, encontra-se então

mais $2 \cdot N_p$ equações.

$$y_{j,i} = K_{j,i} \cdot x_{j,i} \quad (6)$$

$$K_{j,i} = f(x_{j,i}, T_j, P_j) \quad (7)$$

Por fim, pode-se realizar o balanço de energia em cada prato, conforme genericamente mostrado na equação (8), assim como no condensador e refeedor, conforme equações (9) e (10), totalizando $N_p + 2$ equações. De maneira análoga ao balanço de massas global, o balanço de energia global da coluna é obtido pela soma das $N_p + 2$ equações, não sendo independente para ser considerada mais uma equação.

$$L_{j-1} \cdot h_{j-1} + V_{j-1} \cdot h_{j-1} - (L_j \cdot h_j + V_j \cdot h_j) + F_j \cdot h_F = 0 \quad (8)$$

$$V_1 \cdot h_1 - (L_0 + D) \cdot h_0 = Q_C \quad (9)$$

$$L_{N_p} \cdot h_{N_p} - (V_{N_p+1} + B) \cdot h_{N_p+1} = Q_R \quad (10)$$

Os graus de liberdade podem então ser calculados como mostrado na Tabela 1.

Tabela 1 – Graus de liberdade da coluna de destilação

Variáveis	
Coluna	$7 \cdot N_p$
Condensador	6
Refeedor	6
Total	$7 \cdot N_p + 12$
Equações	
Balanço de massa na coluna	$4 \cdot N_p$
Balanço de massa no condensador	4
Balanço de massa no refeedor	4
Relações de equilíbrio	$2 \cdot N_p$
Balanço de energia na coluna	N_p
Balanço de energia no condensador	1
Balanço de energia no refeedor	1
Total	$7 \cdot N_p + 10$
Graus de Liberdade	
	+ [$7 \cdot N_p + 12$]
	- [$7 \cdot N_p + 10$]
Total	2

Como pôde ser visto na Tabela 1, os graus de liberdade da coluna a ser simulada na planilha é 2. Desta maneira, apenas duas informações podem ser especificadas. Uma delas é a razão de refluxo, sendo obrigatoriamente necessário para o cálculo da planilha desenvolvida.

Dessa maneira apenas 1 grau de liberdade resta.

O último grau de liberdade é resolvido pela especificação da fração do componente mais volátil no topo ou fundo. Perceba que ambas as frações podem ser especificadas, mas apenas uma delas será respeitada, como será visto na secção 1.1.3, duas respostas existirão.

1.1.2. EQUILÍBRIO DE FASES

Os dados do equilíbrio de fases é mostrado na Figura 3. A tabela é constituída de 13 colunas visíveis e sua construção será explicada na secção 1.1.2.2, mas primeiramente será desenvolvido uma análise dos graus de liberdade para justificativa do método escolhido.

Figura 3 – Tabela do equilíbrio líquido-vapor

T (°C)	X _A	X _B	P _A ^v (mmHg)	P _B ^v (mmHg)	Y _A	Y _B	K _A	K _B	α _{AB}	Y _A	Y _B	Σy _i
113,7	0,000	1,000	1272,1	760,0	1,000	1,000	1,674	1,000	1,674	0,000	1,000	1,000
113,5	0,010	0,990	1265,3	754,8	1,000	1,000	1,665	0,993	1,676	0,017	0,983	1,000
113,3	0,020	0,980	1259,2	750,1	1,000	1,000	1,657	0,987	1,679	0,033	0,967	1,000
113,1	0,030	0,970	1252,6	745,1	1,000	1,000	1,648	0,980	1,681	0,049	0,951	1,000
112,9	0,040	0,960	1245,7	739,8	1,000	1,000	1,639	0,973	1,684	0,066	0,934	1,000

1.1.2.1. GRAUS DE LIBERDADE DO EQUILÍBRIO DE FASES

Primeiramente será avaliado o número de variáveis desconhecidas do equilíbrio de fases. São variáveis as composições dos dois componentes no líquido, as composições dos dois componentes no vapor, a pressão e temperatura. Isto totaliza 6 variáveis.

Como equações, conhece-se as relações de equilíbrio de cada composto, como mostra as equações (11) e (12). Além disso, sabe-se que o somatório das frações nos compostos é um, tanto no vapor como no líquido. Assim, soma-se 4 equações no total. Perceba que a equação (12) é dependente e que a equação (11) é contada duas vezes (para A e B).

$$Y_{A \text{ ou } B} = K_{A \text{ ou } B} X_{A \text{ ou } B} \quad (11)$$

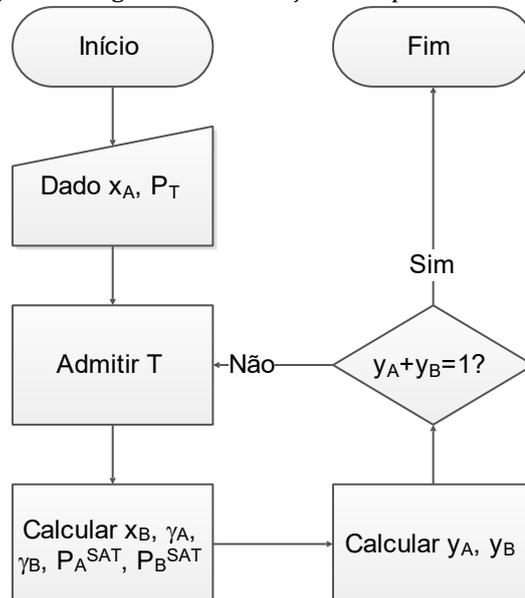
$$K_{A \text{ ou } B} = f(X_{A \text{ ou } B}, T, P_T) \quad (12)$$

Com 6 variáveis e 4 equações, os graus de liberdade do problema de fases é 2. Destes dois graus, um deles está especificado, a pressão do sistema de equilíbrio é igual a pressão da coluna (que foi admitida constante em todos os estágios de equilíbrio). Então, foi escolhido

especificar a composição do componente mais volátil no líquido, assim o problema está definido e apenas uma única solução é possível.

O algoritmo a ser utilizado para solução do equilíbrio de fases é mostrado na Figura 4, o passo-a-passo desta algoritmo montado na planilha será mostrado na secção 1.1.2.2. Foi admitido como hipótese de que o vapor é composto de uma mistura ideal e o líquido de uma mistura não ideal. A hipótese de vapor ideal é bem representável para baixas pressões, na uma molécula no estado gasoso estará longe das demais, deste modo a interação entre elas será desprezível, assim como o volume de cada molécula não será representativo (KORETSKY, 2007).

Figura 4 – Algoritmo de solução do equilíbrio de fases



1.1.2.2. CONSTRUÇÃO DA TABELA

A construção da tabela da Figura 3 seguiu o procedimento mostrado na Figura 4. A primeira coluna mostra a temperatura, como mostrado no algoritmo, o valor de temperatura será estimado de modo que o somatório das frações dos composto no vapor seja 1. Para isso, utilizou-se o recurso “*Atingir Meta*” presente no software Excel, que realiza este procedimento iterativo de tentativa e erro. Como deseja-se construir a curva de equilíbrio, mais de um valor de x_A será especificado, por isso, utilizou-se o recurso *Visual Basic for Applications* (VBA) também incorporado no software, para que o recurso “*Atingir Meta*” fosse utilizado em cada linha da tabela e automatizando todo o processo.

Nas duas próximas colunas são as frações dos dois componentes (A e B) na fase líquida. O valor de x_A foi especificado, variando de 0 a 1 de 0,01 em 0,01. O valor de x_B é calculado pelo complemento, já que o somatório das frações é um.

A seguir, calcula-se as pressões de vapor de cada composto, foi utilizada a equação de Antoine como mostra a equação (13), isto define as constantes inseridas na tabela da Figura 1, pois a pressão de saturação sairá em mmHg e a temperatura entrará em °C na equação (FELDER e ROUSSEAU, 2005).

$$P_A^{\text{SAT}} = 10^{\left(A - \frac{B}{T+C}\right)} \quad (13)$$

As duas próximas colunas são os coeficientes de atividade de cada composto no líquido. Elas são calculadas pela equação de van Laar, a qual possui duas constantes A e B, mostradas na equação (14) para o composto A apenas (KORETSKY, 2007).

$$RT \ln(\gamma_A) = A \left(\frac{Bx_b}{Ax_A + Bx_B} \right)^2 \quad (14)$$

Admitindo que as constantes A e B são constante com a temperatura, pode-se transformar as variáveis como mostram as equações (15) e (16).

$$A_{12} = \frac{A}{RT} \quad (15)$$

$$A_{21} = \frac{B}{RT} \quad (16)$$

Isolando-se o coeficiente de atividade da equação (14) e substituindo-se as equações (15) e (16) novamente na equação (14) as equações utilizadas na planilha podem ser vistas nas equações (17) e (18) para os componentes A e B respectivamente.

$$\gamma_A = \text{EXP} \left(\frac{A_{12}}{\left(1 + \frac{A_{12}x_A}{A_{21}x_B}\right)^2} \right) \quad (17)$$

$$V_A = \text{EXP} \left(\frac{A_{21}}{\left(1 + \frac{A_{21}X_B}{A_{12}X_A}\right)^2} \right) \quad (18)$$

Para o caso em que as moléculas do líquido apresentem tamanho, forma e peso molecular semelhantes de modo que a interação entre cada molécula (A-B = A-A = B-B) do líquido sejam iguais, o modelo de mistura ideal para o líquido pode ser aplicado (KORETSKY, 2007). Para realizar isto na planilha basta especificar A_{12} e A_{21} como sendo ambos iguais a zero.

Os coeficientes de atividade então são utilizados nas equações (19) e (20) para cálculo das constantes de equilíbrio, as quais serão utilizadas a seguir.

$$K_A = \frac{V_A P_A^{\text{SAT}}}{P_T} \quad (19)$$

$$K_B = \frac{V_B P_B^{\text{SAT}}}{P_T} \quad (20)$$

A próxima coluna calcula a volatilidade relativa da mistura binária, ela é calculada pela divisão entre as constantes de equilíbrio, como mostra a (21).

$$\alpha_{AB} = \frac{K_A}{K_B} \quad (21)$$

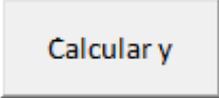
Por fim, as últimas duas colunas calculam as frações dos componentes no vapor utilizando as relações termodinâmicas de equilíbrio, como mostram as equações (22) e (23). Um cuidado a ser tomado é não utilizar a equação do somatório das frações para calcular y_B a partir do y_A , ou vice-versa. Pois esta equação já será utilizada na validação do modelo.

$$y_{A \text{ ou } B} = K_{A \text{ ou } B} x_{A \text{ ou } B} \quad (22)$$

$$K_{A \text{ ou } B} = f(x_{A \text{ ou } B}, T, P_T) \quad (23)$$

Como o processo de resolução é iterativo, adicionou-se um botão, deste modo, todas as configurações podem ser feitas normalmente e por fim, ao clicar no botão “Calcular y”, a sub-rotina coloca no Anexo é acionada.

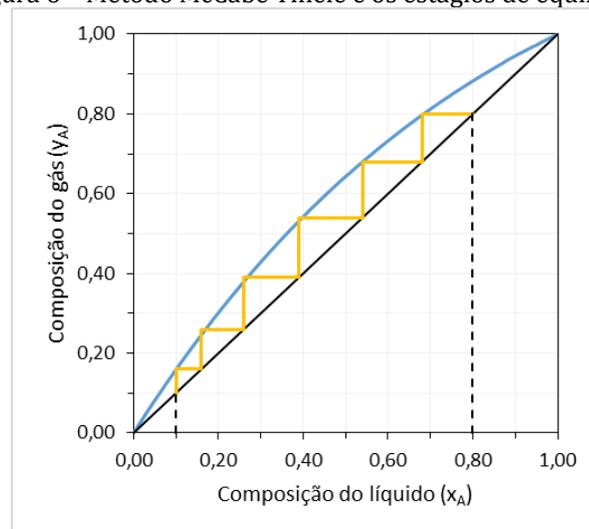
Figura 5 – Botão de ativação da sub-rotina de cálculo



1.1.3. MÉTODO DE MCCABE THIELE

O método de McCabe Thiele é um rápido e preciso método gráfico para calcular o número de pratos teóricos requeridos por uma coluna para efetuar a separação de uma mistura binária. Ele consiste essencialmente em desenhar, em um mesmo gráfico, a curva de equilíbrio para as composições de vapor e líquido e linhas retas que representam as equações de enriquecimento da mistura prato-a-prato, passando de um estágio para outro na forma de degraus, como exemplifica a Figura 6 (MCCABE e THIELE, 1925).

Figura 6 – Método McCabe Thiele e os estágios de equilíbrio



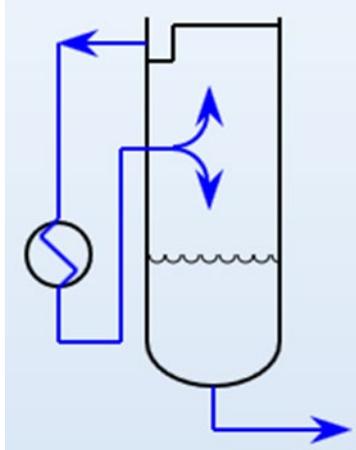
A partir do número de estágios teóricos, o número de pratos reais poderiam ser encontrados pela divisão da eficiência dos pratos, se a coluna for de pratos, ou então multiplicar pela altura equivalente de um prato teórico (HETP), se a coluna for de recheio e sua altura é desejada.

As hipóteses adotadas no método são:

1. O número de mols de vapor que ascende pela coluna, exceto na mudança no prato de alimentação, é constante prato-a-prato;
2. A alimentação entra na coluna com temperatura igual a temperatura de bolha do

- líquido no prato de alimentação;
3. O condensador é total, de modo que a composição do produto que deixa o primeiro prato é igual ao produto de refluxo, mas nenhum calor sensível é removido do líquido;
 4. O calor é fornecido na base da coluna em um sistema fechado, de modo que o condensado do vapor não dilua o líquido do último prato.

Figura 7 – Refervedor da coluna de destilação



1.1.4. BALANÇO DE MASSAS

As vazões (apresentadas na Figura 1) foram calculadas a partir do balanço de massas global e do balanço do componente mais volátil. Desta maneira, as vazões de topo (D) e fundo (B) podem ser calculadas pelas equações (24) e (25), respectivamente.

$$D = F \frac{(z_A - x_B)}{(x_D - x_B)} \quad (24)$$

$$B = F \frac{(x_D - z_A)}{(x_D - x_B)} \quad (25)$$

A vazão de refluxo (L_0 ou L) é encontrada a partir da razão de refluxo (L/D) especificada. A vazão de vapor que sai do primeiro prato (V_1 ou V) é dada pela equação (3). A corrente de líquido que sai do último prato (L_{NP} ou L') é calculada pela equação (21), enquanto a vazão de vapor de refluxo (V_{NP+1} ou V') é calculada pela equação (5).

$$L' = L + qF \quad (26)$$

1.1.5. RESULTADOS GRÁFICOS

A partir dos dados fornecidos, gráficos como mostrado na Figura 8 são produzidos. São no total 10 gráficos, sendo divididos em três grupos:

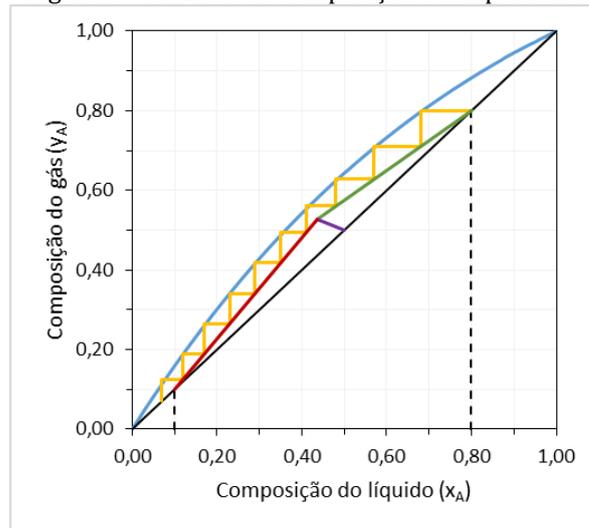
1. Gráficos com numeração de estágios de cima para baixo: assim como fora explicado, eles utilizam como especificação de projeto a composição do componente mais volátil no fundo da coluna (x_B), logo não necessariamente a composição no topo (x_D) será atendida. São quatro gráficos: (a) Composição do elemento mais volátil no líquido versus no vapor para determinação no número de estágios mínimo; (b) Composição do elemento mais volátil no líquido versus no vapor para determinação no número de estágios a partir da ROR⁴, ROA⁵ e ROE⁶; (c) Temperatura em cada estágio de equilíbrio; (d) Composição do líquido e vapor em cada estágio de equilíbrio.
2. Gráficos com numeração de estágios de baixo para cima: utilizam como especificação de projeto a composição do componente mais volátil no topo da coluna (x_D), logo não necessariamente a composição no fundo (x_B) será atendida. São quatro gráficos: (a) Composição do elemento mais volátil no líquido versus no vapor para determinação no número de estágios mínimo; (b) Composição do elemento mais volátil no líquido versus no vapor para determinação no número de estágios a partir da ROR, ROA e ROE; (c) Temperatura em cada estágio de equilíbrio; (d) Composição do líquido e vapor em cada estágio de equilíbrio.
3. São dois gráficos: (a) Composição do elemento mais volátil no líquido versus no vapor para determinação da razão de refluxo mínima; (b) Temperatura versus a composição do componente mais volátil no líquido e vapor.

⁴ Reta de operação da retificação – dada pela equação (28).

⁵ Reta de operação da alimentação – dada pela equação (29).

⁶ Reta de operação do esgotamento – dada pela equação (31).

Figura 8 – Gráficos de composição e temperatura



1.1.6. PLANILHAS OCULTAS

Todo o cálculo realizado para a construção dos gráficos citados na secção 1.1.5 foram feitos em células ocultas. Na realidade, as células com cálculos tiveram sua largura de coluna modificadas para um único pixel, pois se estas fossem ocultadas os valores não apareceriam nos gráficos.

1.1.6.1. RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMA

Para a determinação da razão de refluxo mínima utilizou-se o seguinte procedimento. Sabe-se que a razão de refluxo pode ser calculada pela relação da equação (27).

$$L/D = \frac{L/V}{1 - L/V} \quad (27)$$

Sabe-se também que a relação L/V se encontra na reta de operação da retificação (ROR), como mostra a equação (28).

$$y_{(N+1)} = \frac{L}{V} x_N + \frac{D}{V} x_D \quad (28)$$

Deste modo, a razão de refluxo mínima será dada pela mínima inclinação da ROR, ou

seja, quando a ROR interceptar a reta de operação da alimentação (ROA) exatamente sobre a curva de equilíbrio líquido vapor. Então, primeiramente deve ser descoberto em qual ponto a ROA (dada pela equação (29)) encontra com a curva de equilíbrio. Sabe-se que este ponto tem as coordenadas $\{x_N; y_{(n+1)}\}$. Caso q seja 1, sabe-se que o ponto de intersecção com a curva de equilíbrio terá a abscissa z_F .

$$y_{(N+1)} = \frac{q}{(q-1)} x_N - \frac{1}{(q-1)} z_A \quad (29)$$

Logo, construiu-se a Tabela 2, variando-se o valor de x de 0 a 1. Desta maneira, quando a ROA atingisse a curva de equilíbrio a coluna “Flag” deixaria de ser zero e se tornaria 1. Utilizando o recurso *PROCV* do Excel, encontraria-se o primeiro valor 1, e obteria-se o valor de x e y no qual a ROA e a curva de equilíbrio se encontram, ou seja, o par $\{x_{\min}; y_{\min}\}$.

Tabela 2 – Construção da ROA

Flag	x	y
Se ROA atingiu a curva de equilíbrio: Flag = 1 Se ROA não atingiu a curva: Flag = 0	Se $q = 1$: $x = z_F$ Se $q \neq 1$: x	Calculado pela equação (29)

O mesmo par $\{x_{\min}; y_{\min}\}$ é o ponto o qual se encontram a ROR e a reta de operação da retificação (ROE). Assim, a ROA parte do ponto $\{x_D; x_D\}$ e a ROE (dada pela equação (31)) do ponto $\{x_B; x_B\}$, e com dois pontos é possível construir uma equação de reta. O coeficiente angular da reta (L/V) será dado pela equação (30), e a razão de refluxo mínima pela equação (27).

$$L/V = \frac{x_D - y_{\min}}{x_D - x_{\min}} \quad (30)$$

$$y_{(N+1)} = \frac{L}{V'} x_N - \frac{B}{V'} x_B \quad (31)$$

1.1.6.2. NÚMERO DE ESTÁGIOS MÍNIMO

O número de estágios de equilíbrio mínimo foram encontrados seguindo os procedimentos mostrados nas Tabela 3 e Tabela 4, pelos métodos de estágios de baixo para cima e de cima para baixo respectivamente. Sabe-se que a curva dos estágios de equilíbrio são

degraus que partem da reta auxiliar até a curva de equilíbrio e vice-versa.

Apesar de serem bem semelhantes, as duas resoluções serão explicadas separadamente.

Tabela 3 – Construção dos estágios mínimo de equilíbrio líquido vapor de baixo para cima

Linha	Abscissa	Ordenada	Flag
i	Ordenada[i - 1]	y[Abscissa(i - 1)]	Ordenada[i] - Ordenada[i - 1]

Tabela 4 – Construção dos estágios mínimo de equilíbrio líquido vapor de cima para baixo

Linha	Abscissa	Ordenada	Flag
i	x[Ordenada(i - 1)]	Abscissa[i - 1]	Ordenada[i] - Ordenada[i - 1]

Primeiramente será explicado o método de obtenção dos estágios de baixo para cima. O ponto inicial da tabela é a coordenada $\{x_B; x_B\}$. O segundo ponto irá partir deste par inicial e subirá até atingir a curva de equilíbrio, ou seja, a abscissa continuará a ter o mesmo valor (x_B), enquanto a ordenada terá o valor de y do equilíbrio para um $x = x_B$, ou seja, $y[x_B]$. O terceiro ponto partirá da curva de equilíbrio e seguirá horizontalmente até atingir novamente a reta auxiliar, agora ambos (abscissa e ordenada) terão o mesmo valor $y[x_B]$.

Como foi descrito no parágrafo anterior, este padrão se repete, ou seja, a cada linha a nova abscissa será igual a ordenada anterior. Enquanto a nova ordenada é o valor de y do equilíbrio para o x igual a abscissa anterior. Com estas informações é possível plotar todos os degraus de equilíbrio, porém, quando o valor da abscissa é superior a x_D , o processo pára.

Então entra em ação a última coluna, o “Flag”, que consiste do valor da ordenada atual subtraído da ordenada anterior. Quando o *Flag* é diferente de zero, significa que a ordenada está mudando, ou seja, ainda há a necessidade de criar mais um degrau para a separação prosseguir, indicando a necessidade de mais um estágio de equilíbrio. Quando o *Flag* é zero, nada está ocorrendo. Para encontrar o número de estágios mínimo, usa-se a função *CONT.SE* do Excel, que conta todos os valores maiores que zero.

Mas, no ponto inicial a ordenada anterior não existe e é assumida como zero, então, ao usar a ferramenta *CONT.SE*, encontra-se um estágio a mais, logo o número de estágios mínimo é dado pela equação (32).

$$N_{\text{mín}} = [\text{Número de Flags} > 0] - 1 \quad (32)$$

De maneira bastante semelhante, o método dos estágios de cima para baixo, o ponto

inicial da tabela é a coordenada $\{x_D; x_D\}$. O segundo ponto irá partir deste par inicial e andar horizontalmente na direção negativa das abscissas até atingir a curva de equilíbrio, ou seja, a ordenada continuará a ter o mesmo valor (x_D), enquanto a abscissa terá o valor de x do equilíbrio para um $y = x_D$, ou seja, $x[y = x_D]$. O terceiro ponto partirá da curva de equilíbrio e descenderá até atingir novamente a reta auxiliar, agora ambos (abscissa e ordenada) terão o mesmo valor $x[y = x_D]$.

Como foi descrito no parágrafo anterior, este padrão se repete, ou seja, a cada linha a nova abscissa será igual ao valor de x do equilíbrio para y igual a ordenada anterior. Enquanto a nova ordenada é igual ao valor da abscissa anterior. Com estas informações é possível plotar todos os degraus de equilíbrio, porém, quando o valor da abscissa é inferior a x_B , o processo pára.

Então entra em ação a última coluna, o “*Flag*”, que consiste do valor da ordenada atual subtraído da ordenada anterior. Quando o *Flag* é diferente de negativo, significa que a ordenada está mudando, ou seja, ainda há a necessidade de criar mais um degrau para a separação prosseguir, indicando a necessidade de mais um estágio de equilíbrio. Quando o *Flag* é zero, nada está ocorrendo. Para encontrar o número de estágios mínimo, usa-se a função *CONT.SE* do Excel, que conta todos os valores menores que zero.

Do mesmo modo que no método de baixo para cima, no ponto inicial a ordenada anterior não existe e é assumida como zero, porém nesse caso o *Flag* será positivo e ao somar os *Flags* menores que zero teremos o número de estágios mínimo diretamente, sem a necessidade de subtrair 1, como mostra a equação (33).

$$N_{\text{mín}} = [\text{Número de Flags} < 0] \quad (33)$$

1.1.6.3. NÚMERO DE ESTÁGIOS REAIS

O número de estágios de equilíbrio reais foram encontrados seguindo os procedimentos mostrados nas Tabela 5 e Tabela 6, pelos métodos de estágios de baixo para cima e de cima para baixo respectivamente. Eles são praticamente iguais ao procedimento utilizado para o número de estágios mínimo, com apenas uma única diferença, pois a reta auxiliar será trocada pelas retas de operação.

Tabela 5 – Construção dos estágios de equilíbrio líquido vapor de baixo para cima

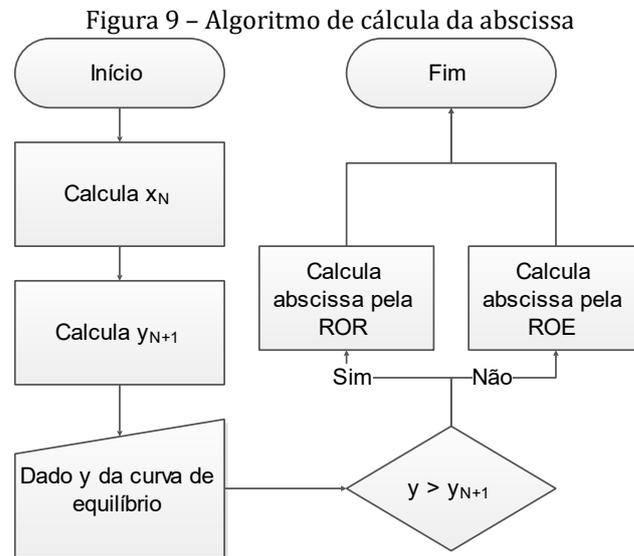
Linha	Abscissa	Ordenada	Flag
i	Reta[Ordenada(i – 1)]	y[Abscissa(i – 1)]	Ordenada[i] – Ordenada[i – 1]

Tabela 6 – Construção dos estágios de equilíbrio líquido vapor de cima para baixo

Linha	Abscissa	Ordenada	Flag
i	x[Ordenada(i – 1)]	Reta[Abscissa(i – 1)]	Ordenada[i] – Ordenada[i – 1]

Começando pelo método de baixo para cima, novamente o ponto inicial da tabela é a coordenada $\{x_B; x_B\}$. O segundo ponto irá partir deste par inicial e subirá até atingir a curva de equilíbrio, ou seja, a abscissa continuará a ter o mesmo valor (x_B), enquanto a ordenada terá o valor de y do equilíbrio para um $x = x_B$, ou seja, $y[x_B]$. O terceiro ponto partirá da curva de equilíbrio e seguirá horizontalmente até atingir a reta de operação. Neste caso, muito provavelmente a reta de operação será a de esgotamento.

Deste modo, a abscissa segue o seguinte algoritmo mostrado na Figura 9. Sabe-se que a ROA se encontra com a ROE e a ROR, do mesmo modo que a ROE e a ROR se encontram. A partir desta informação, igualando-se a ROR (equação (28)) com ROA (equação (29)), tem-se a equação (34). Enquanto ao se igualar a ROE (equação (31)) com a ROR (equação (28)), obtém-se a equação (35).



$$x_N = \frac{D/V x_D + 1 / (q-1)^{z_A}}{q / (q-1)^{-L/V}} \quad (34)$$

$$x_N = \frac{D/V x_D + B/V' x_B}{L'/V' - L/V} \quad (35)$$

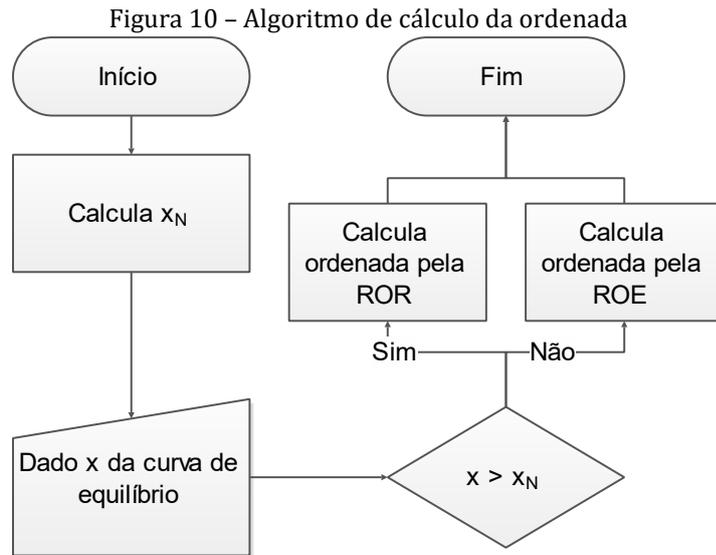
Este valor de x_N é a coordenada abscissa do ponto de intersecção das retas de operação. Deste modo, substituindo x_N na ROR, ROE ou ROA, o valor de y_{N+1} será encontrado. Caso o valor de y (ordenada) da curva de equilíbrio for menor que este valor, o estágio de equilíbrio se encontra no esgotamento da coluna, caso seja superior, o estágio se encontra na retificação da coluna, como foi exposto na Figura 9.

Assim, o valor da abscissa, que antes era igual ao valor de y do equilíbrio, já que a reta auxiliar era a equação $y = x$. Nos estágios reais, primeiro determina-se se o ponto pertence a ROE ou a ROR e utilizando a equação (31) ou (28), respectivamente, encontra-se o valor da abscissa a partir do valor da ordenada (y de equilíbrio).

A partir do cálculo da abscissa seguinte o algoritmo explicado anterior, todo o restante permanece igual ao cálculo de estágios mínimo. Da mesma maneira que o número de estágios mínimo, o número de estágios reais é dado pela equação (32), no qual o *Flag* é calculado exatamente da mesma forma.

Para o método de cima para baixo, o mesmo raciocínio foi utilizado. O ponto inicial da tabela é a coordenada $\{x_D; x_D\}$. O segundo ponto irá partir deste par inicial e andar horizontalmente na direção negativa das abscissas até atingir a curva de equilíbrio, ou seja, a ordenada continuará a ter o mesmo valor (x_D), enquanto a abscissa terá o valor de x do equilíbrio para um $y = x_D$, ou seja, $x[y = x_D]$. O terceiro ponto partirá da curva de equilíbrio e descenderá até atingir a reta de operação.

Então, será necessário encontrar qual a reta de operação o estágio pertence. Calcula-se o valor de x_N pela equação (34) ou (35), mais simplificada não será necessário calcular o valor de y_{N+1} , caso o x de equilíbrio seja maior que o valor de x_N , a o estágio de equilíbrio pertence a ROR, caso contrário pertence a ROE. Assim, é possível encontrar o valor da ordenada y a partir da abscissa x . O algoritmo é exemplificado na Figura 10.



O algoritmo pára quando o valor de x é superior a x_D , no caso de baixo para cima, ou inferior a x_B , quando de cima para baixo.

1.1.6.4. ALIMENTAÇÃO ÓTIMA

O algoritmo para determinação do estágio de alimentação ótima segue o princípio de que a composição da alimentação deve ter a mesma composição do estágio de equilíbrio. A tabela construída foram semelhantes as Tabela 5 e Tabela 6 para os diferentes métodos, possuindo apenas uma coluna a mais e as demais sendo iguais.

A coluna adicionada a mais representa o estágio ideal de alimentação. No caso do método de baixo para cima, a composição do líquido aumenta com o número de estágios, assim, quando o valor da abscissa for inferior a x_N (calculada pelas quações (34) ou (35)), atribui-se a essa coluna o valor 9999 (“infinito”). Quando o valor da abscissa for superior ou igual a x_N , significa que houve a transição da ROE para a ROR, então é atribuída a coluna o número do estágio atual. Assim, o estágio de alimentação é dado pelo menor valor dessa coluna, ou seja, o primeiro estágio em que a abscissa é superior a x_N . Porém, como a abscissa pode ser maior que x_N , então o estágio ideal também poderia ser o anterior, por isso os dois valores mostrados.

Mesmo no método de baixo para cima, também é mostrado o estágio ideal de alimentação de cima para baixo, dado pelo número de estágios total menos o estágio ideal de baixo para cima.

Analogamente o mesmo é feito para os estágios de cima para baixo. Porém, desta vez,

a medida que avança-se nos estágios, o valor da abscissa diminui. Então, quando o valor da abscissa for superior a x_N , atribui-se a essa coluna o valor 9999 (“infinito”). Quando o valor da abscissa for inferior ou igual a x_N , significa que houve a transição da ROR para a ROE, então é atribuída a coluna o número do estágio atual. Assim, o estágio de alimentação é dado pelo menor valor dessa coluna, ou seja, o primeiro estágio em que a abscissa é superior a x_N . Porém, como a abscissa pode ser menor que x_N , então o estágio ideal também poderia ser o anterior, por isso os dois valores mostrados.

1.1.6.5. PERFIL DE TEMPERATURA

Assim como foi explicado na seção 1.1.6.2, um estágio de equilíbrio era definido para um *Flag* positivo ou negativo, dependendo do método aplicado. Assim, quando o *Flag* indicava a existência do equilíbrio, utilizou-se a função PROCV do Excel e encontrou-se a temperatura na qual coexistiam os valores de x e y da Tabela 3 ou Tabela 4, conforme o método. Com isso, obteve-se os valores de temperatura em cada prato e os utilizou para plotar o gráfico de temperatura versus estágio de equilíbrio.

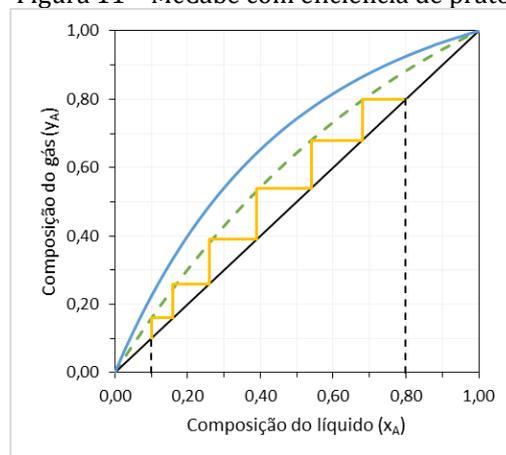
O gráfico temperatura-composição era possível plotar apenas com a tabela da Figura 3.

2. PRÓXIMOS PASSOS

Como melhoria e continuação deste trabalho, algumas propostas são feitas:

- Utilizar eficiência de prato (Murphree) – exemplo na Figura 9;
- Correção dos parâmetros de van Laar pela temperatura;
- Possibilidade de múltiplas alimentações na coluna;
- Biblioteca de substâncias;
- Aplicação do método rigoroso de resolução (Método Sorel).

Figura 11 – McCabe com eficiência de prato



REFERÊNCIAS

BAGAJEWICZ, M. J. **Degrees of Freedom in Distillation**. The University of Oklahoma. [S.l.]. 2007. (Lecture Notes).

FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. **Elementary Principles of Chemical Processes**. 3. ed. Massachusetts: John Wiley & Sons, Inc., 2005.

KORETSKY, M. D. **Termodinâmica para Engenharia Química**. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

MCCABE, W. L.; THIELE, E. W. Graphical design of fractionating columns. **Industrial Engineering Chemistry**, v. 17, n. 6, p. 605-611, 1925.

RIBEIRO, L. G. **Operações Unitárias da Indústria Química II: Processos de separação de misturas Equilíbrio Líquido-Vapor: Destilação**. Escola de Engenharia Mauá. São Caetano do Sul. 2014.

ANEXO

Abaixo segue o código VBA utilizado na planilha eletrônica, em verde estão escritos os comentários explicativos do algoritmo (iniciados pela aspa simples). O único código presente é ativado quando o botão “Calcular y” (Name: Button 1⁷) é pressionado (Type: Release⁸).

‘A sub-rotina é iniciada com o clique sobre o Button 1 (Calcular y da planilha)

Private Sub CommandButton1_Click()

‘Criando e alocando espaço na memória para a variável “i” e especificando-a como do tipo Long⁹

Dim i As Long

For i = 10 To 110

‘Utilizando a função Atingir Meta (GoalSeek)

With Worksheets("McCabe")

.Range("O" & i).GoalSeek _ ‘Definindo a célula “O i” (somatório de y)

Goal:=1, _ ‘Para o valor 1 (100 %)

ChangingCell:=.Range("B" & i) ‘Alterando a célula “B i” (Temperatura)

End With

‘Em outras palavras, usa-se a ferramenta atingir meta para se variar a temperatura até que o somatório de y (fração dos componentes na fase gasosa) seja 1 ou 100 %.

Next ‘Próximo i

‘Atualizando os valores dos eixos dos gráficos de temperatura (obs.: não é preciso mudar os eixos dos gráficos que apresentam as frações do componente mais volátil, já que sempre variam de 0 a 1).

With ActiveSheet.ChartObjects("Gráfico 7").Chart

‘O maior valor de temperatura sempre irá ser a primeira célula (B10), pois nela a fração do componente mais volátil é zero.

.Axes(xlValue).MaximumScale = ActiveSheet.Range("B10").Value

⁷ Nome interno do botão.

⁸ O código só será executado quando o botão esquerdo do mouse pressionado sobre o botão for solto ainda sobre o botão.

⁹ Long é o formato dado para vetores.

‘O menor valor de temperatura sempre irá ser a última célula (B110), pois nela a fração do componente mais volátil é 1.

```
.Axes(xlValue).MinimumScale = ActiveSheet.Range("B110").Value
```

‘O valor da escala principal será um quinto da diferença entre a temperatura máxima e mínima, deste modo a escala terá 6 valores de temperatura em todas as situações.

```
.Axes(xlValue).MajorUnit = (ActiveSheet.Range("B10").Value - ActiveSheet.Range("B110").Value) / 5
```

‘O valor da escala secundária será metade da escala primária.

```
.Axes(xlValue).MinorUnit = .Axes(xlValue).MajorUnit / 2
```

End With

‘Atualizando os valores dos eixos dos gráficos de temperatura

```
With ActiveSheet.ChartObjects("Gráfico 8").Chart
```

‘O maior valor de temperatura sempre irá ser a primeira célula (B10), pois nela a fração do componente mais volátil é zero.

```
.Axes(xlValue).MaximumScale = ActiveSheet.Range("B10").Value
```

‘O menor valor de temperatura sempre irá ser a última célula (B110), pois nela a fração do componente mais volátil é 1.

```
.Axes(xlValue).MinimumScale = ActiveSheet.Range("B110").Value
```

‘O valor da escala principal será um quinto da diferença entre a temperatura máxima e mínima, deste modo a escala terá 6 valores de temperatura em todas as situações.

```
.Axes(xlValue).MajorUnit = (ActiveSheet.Range("B10").Value - ActiveSheet.Range("B110").Value) / 5
```

‘O valor da escala secundária será metade da escala primária.

```
.Axes(xlValue).MinorUnit = .Axes(xlValue).MajorUnit / 2
```

End With

‘Atualizando os valores dos eixos dos gráficos de temperatura

```
With ActiveSheet.ChartObjects("Gráfico 9").Chart
```

‘O maior valor de temperatura sempre irá ser a primeira célula (B10), pois nela a fração do componente mais volátil é zero.

```
.Axes(xlValue).MaximumScale = ActiveSheet.Range("B10").Value
```

‘O menor valor de temperatura sempre irá ser a última célula (B110), pois nela a fração do componente mais volátil é 1.

```
.Axes(xlValue).MinimumScale = ActiveSheet.Range("B110").Value
```

‘O valor da escala principal será um quinto da diferença entre a temperatura máxima e mínima, deste modo a escala terá 6 valores de temperatura em todas as situações.

```
.Axes(xlValue).MajorUnit = (ActiveSheet.Range("B10").Value -  
ActiveSheet.Range("B110").Value) / 5
```

‘O valor da escala secundária será metade da escala primária.

```
.Axes(xlValue).MinorUnit = .Axes(xlValue).MajorUnit / 2
```

```
End With
```

```
End Sub
```

‘Sub-rotina finalizada