



COMPUTATION OF RESIDUE CURVES MAPS USING A SIMPLE FINITE DIFFERENCE METHOD

CÁLCULO DE MAPAS DE CURVAS RESIDUAIS USANDO UM O MÉTODO SIMPLES DE DIFERENÇAS FINITAS

J. P. SILVA¹, M. R. V. NETO¹, G. M. ALMEIDA¹ and E. D. OLIVEIRA^{1,*}

¹ Federal University of Minas Gerais, Department of Chemical Engineering, Belo Horizonte, MG, Brazil

*Corresponding author. Federal University of Minas Gerais, Department of Chemical Engineering, Belo Horizonte, MG, Brazil, Phone: +55 31 3409.1785
e-mail address: eder@deq.ufmg.br (E. D. Oliveira).

ARTICLE INFO

Article history:
Received 2020-12-01
Accepted 2020-12-12
Available online 2020-12-12

palavras-chave

Termodinâmica
Equilíbrio de fases
Mapas de curvas residuais
Diferenças Finitas

keywords

Thermodynamics
Phase equilibria
Residual curve maps
Finite Difference

ABSTRACT

The most common methodology for obtaining residue curve maps is through a system of differential equation, commonly solved. These maps are obtained through a system of differential equations, which is commonly solved in two steps, namely a liquid-vapor equilibrium and a system of differential equations. The goal of this work is to present a new methodology for the elaboration of residual curve maps differential equations. In this methodology, the bubble T is considered a differential equation and together with the Rayleigh equation, which is a system of differential equations that determines the residual composition of a liquid mixture to be distilled, are solved using the Finite Difference Method. For this purpose, the new methodology will be applied to the ternary systems ethyl ether / methanol / 1-butanol and ethanol / 2-methyl 2-propanol / methylcyclohexane. The fugacity coefficient of the vapor phase was calculated using the Virial equation (truncated in the second coefficient), and the activity coefficient of the liquid phase, using the NRTL, UNIQUAC and UNIFAC models. The results showed the potential of the new methodology compared to conventional approaches.

RESUMO

A metodologia mais comum de obter os mapas de curvas residuais é através de um sistema de equações diferenciais, comumente resolvido em duas etapas, a saber, um equilíbrio líquido-vapor e um sistema de equações diferenciais. O objetivo deste trabalho é apresentar uma nova metodologia de elaboração dos mapas de curvas residuais. Nesta metodologia o bolha T é considerado uma equação diferencial e juntamente com a equação de Rayleigh, que é um sistema de equações diferenciais que determina a composição residual de uma mistura líquida a ser destilada, são resolvidas através do Método das Diferenças Finitas. Para este intuito a nova metodologia será aplicada aos sistemas ternários éter etílico/metanol/1-butanol e etanol/2-metil 2-propanol/metilciclohexano. O coeficiente de fugacidade da fase de vapor foi calculado pela equação de Virial (truncada no segundo coeficiente), e o coeficiente de atividade da fase líquida, através dos modelos NRTL, UNIQUAC e UNIFAC. Os resultados mostraram o potencial da nova metodologia em comparação às abordagens convencionais.

NOMENCLATURE

A_i	Constante de Antoine do componente i
B_i	Constante de Antoine do componente i
B_{ij}	Segundo coeficiente de Virial
C_i	Constante de Antoine do componente i
D_i	Desvio em relação ao azeótropo do componente i
dV	taxa de evaporação [-]
K_i	Constante Termodinâmica do componente i
k_{ij}	Parâmetros de interação binários
NC	Número de componentes
P_i^{sat}	Pressão de saturação [mmHg]
P_c	Pressão crítica [bar]
P_R	Pressão reduzida [-]
P_{R_i}	Pressão reduzida do componente i [-]
R	Constante universal dos gases [-]
T	Temperatura [K]
T_c	Temperatura crítica [K]
T_{R_i}	Temperatura reduzida [-]
V_c	Volume crítico [cm ³ /mol]
V_i^l	Volume molar do componente i como líquido saturado [cm ³ /mol]
\hat{V}_m	Volume molar da mistura [cm ³ /mol]
x_i^o	Composição global do componente i
x_i	Composição do componente i na fase líquida
x_i^{az}	Composição azeotrópica do componente i
x_i^{az*}	Composição azeotrópica experimental do componente i
y_i	Composição do componente i na fase vapor
Z_m	Fator de compressibilidade para misturas [-]
γ_i	Coefficiente de atividade do componente i na fase líquida
Φ_i	Coefficiente global de fugacidade do componente i na fase vapor
ϕ_i^{sat}	Coefficiente de fugacidade do componente i na saturação
$\hat{\phi}_i$	Coefficiente de fugacidade do componente i na mistura vapor
ξ	Tempo adimensional

1. INTRODUÇÃO

Em engenharia, na maioria dos casos, a modelagem matemática que representa um processo está na forma de uma equação diferencial ou um sistema de equações diferenciais. O Método das Diferenças Finitas pode ser usado para resolver equações diferenciais ordinárias ou parciais envolvendo valor de contorno ou valor inicial (Constantinides & Moustofi, 1999).

Para melhorar a precisão das soluções numéricas das equações diferenciais, foram desenvolvidos métodos numéricos formulados a partir discretizações em um dado domínio. (Bialecki, B & Fairweather, 2001). O método mais usado para aproximar uma equação diferencial de uma solução numérica é dado por diferenças finitas, devido à sua precisão, estabilidade e facilidade de implementação. A precisão dos métodos de diferença finita foi melhorado com a adoção de técnicas avançadas para diferentes tipos de abordagens (Wuang & Hutter, 2001). Uma técnica comum usada para a redução da instabilidade é adicionar termos de difusão numérica. Esta difusão deve ser tal que ela seja grande o suficiente na proximidade das descontinuidades a fim de amortecer as oscilações, porém pequena o suficiente para manter a precisão do termo de alta ordem (Alhumaizi, 2004).

Skoneczny e Cioch (2018) aplicaram a colocação ortogonal em elementos finitos para modelar matematicamente dois tipos de biorreatores contínuo de um processo biológico que ocorre em um biofilme. O processo de infiltração isotérmica de vapor químico nos compósitos C/Si foi modelado e implementado pelo método das diferenças finitas. (Wei et al, 2006). O processo hidro termoquímico de hidratação do cimento em concreto foi modelado usando uma. formulação híbrida de elementos finitos. (Freitas et al, 2015). Prabhavathi et al. (2018) estudaram as características de transferência de calor e massa do fluxo de nano fluido sobre um cone vertical. As equações diferenciais parciais foram convertidas em um sistema de equações diferenciais ordinárias sobre as quais foram aplicadas o Método das Diferenças finitas.

Lyra (1998) elabora os mapas de curvas residuais aplicando o Método das Diferenças Finitas na equação de Rayleigh e resolve o bolha T de maneira convencional, tal como o método iterativo dado por (Smith, et al., 2020).

A metodologia aqui apresentada neste trabalho, é baseada no método Lyra e no Método de Binous. A nova metodologia trabalha as equações diferenciais de Rayleigh e transforma o bolha T em uma equação diferencial, conforme (Binous, 2013). Como no Método Lyra (1998), a equação de Rayleigh será resolvida por diferenças finitas bem como a equação do bolha T.

O objetivo deste trabalho é aplicar o Método das Diferenças Finitas na elaboração de mapas de curvas residuais, a partir de uma análise termodinâmica e computacional. Utilizaram-se dois sistemas ternários azeotrópicos como estudos de caso, ambos homogêneos, a saber, acetato de etila-hexano-acetona, e propanal/1-propanol/ácido propanoico. Dentro do conhecimento dos autores, não há relatos na literatura acerca da construção de mapas de curvas residuais para este último sistema.

Empregou-se o *software* MATLAB, disponível na Escola de Engenharia da Universidade Federal de Minas Gerais, para o cálculo e análise do comportamento das misturas azeotrópicas e implementação do Método das Diferenças Finitas.

2. MAPAS DE CURVAS RESIDUAIS

A modelagem dos mapas de curvas residuais está solidificada no entendimento de um processo de destilação simples, conforme a Figura 2 (Silva et al,2020):

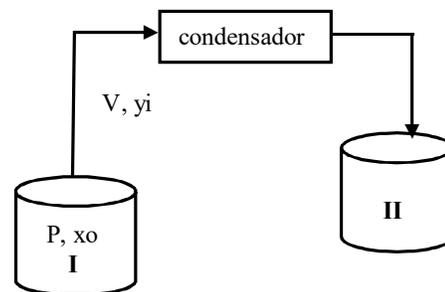


Figura 1 - Representação de um sistema de destilação simples (II: Tanque de destilado). (Silva et al, 2020)

A equação de Rayleigh, resultante das equações de balanço material, um conjunto de equações diferenciais não-lineares, que descreve a alteração da composição do líquido com o tempo (Equação 1).

$$\frac{dx_i^o}{d\xi} = (x_i^o - y_i) \quad i = 1 \dots NC \quad (1)$$

em que x_i^o é a composição global do componente i na mistura líquida, e y_i é a composição do componente i na fase vapor.

Uma interpretação para o parâmetro ξ , segundo Fidkowsk (1993), é conforme a seguir (Silva et al., 2020).

1. Comprimento adimensional de uma coluna com recheio. Nesta situação, a solução da Equação 1 representa o perfil de composições, em uma coluna com recheio, com refluxo total.
2. Tempo adimensional de um processo de destilação em um tanque aberto. Neste caso, a solução da Equação 1 representa a curva de destilação simples.

Neste trabalho, o foco é a representação de um processo de destilação, portanto, ξ é entendido como um tempo adimensional.

O cálculo do equilíbrio de fases, no caso do bolha T, é realizado por meio da configuração γ - Φ , conforme as Equações 2 e 3 (Smith et al., 2020).

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i(T, x_i) P_i^{sat}(T)}{P \Phi_i(T, P, y_i)} \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} y_i = 1 \quad (3)$$

2.1 O Método das Diferenças Finitas Aplicadas aos Mapas de Curvas residuais

O comportamento dinâmico de sistemas físicos ou químicos que possuem uma variável independente pode ser representado através de uma equação diferencial ordinária, enquanto os sistemas que possuem duas ou mais variáveis independentes são representadas por equações diferenciais parciais.

Algumas equações diferenciais parciais e várias equações diferenciais ordinárias apresentam soluções analíticas. A metodologia de resolver essas equações via solução analítica foram desenvolvidas através do cálculo diferencial. Entretanto, a maioria das equações diferenciais possuem características não lineares e envolve um grande número de variáveis o que torna a solução analítica inviável. (Constantinides & Moustofi, 1999).

Diante destas dificuldades faz-se necessário encontrar soluções para a equações diferenciais., ou seja, determinar uma função aproximada que satisfaça às condições das equações diferenciais, como uma condição de contorno, por exemplo. Um método de aproximação por diferença finita pode substituir as equações diferenciais. Isto fornecerá um sistema algébrico com várias variáveis, porém finito, a ser resolvido, mas esta dificuldade pode ser contornado por um computador. (LeVeque, 2007).

A (Figura 1) representa um sistema de destilação simples. A quantidade de matéria total vaporizada é dada por

dn^L . A quantidade de matéria de um componente i que sai do tanque I que forma a corrente de vapor é, $dn_i = y_i dn^L$. O componente i residual no tanque I é dado por, $dn_i = d(x_i n^L) = n^L dx_i + x_i dn^L$. Igualando as duas equações dn_i e dividindo por n^L , tem-se que: (Lyra, Elliot, 1998):

$$(y_i - x_i) \left(\frac{dn^L}{n^L} \right) = dx_i \quad (4)$$

O fator dn^L/n^L é denominado de taxa de evaporação (dV). Analisando a Equação 4, pode-se aplicar um método de diferença finita como o Método de Euler, de tal modo que a Equação 4, é:

$$x_{i+1} = x_i + (y_i - x_i) dV \quad (5)$$

Portanto a Equação 1, a equação de Rayleigh, é agora uma equação algébrica.

A transformação realizada na Equação 1 pode ser feita na Equação 2, conforme (Binous, 2013):

$$\frac{dT}{dV} = \sum_{i=1}^{NC} \frac{x_i^o \gamma_i P_i^{sat}}{\Phi_i} - P \quad (6)$$

Aplicando o Método de Euler sobre a Equação 6, tem-se:

$$T_{i+1} = T_i + \left(\sum_{i=1}^{NC} \frac{x_i^o \gamma_i P_i^{sat}}{\Phi_i} - P \right) dV \quad (7)$$

Conforme mostra a Equação (5) e a Equação (7) tem-se agora duas equações algébricas.

Os mapas de curvas residuais são caracterizados como problemas “*stiff*” (rígidos). As declarações abaixo indicam se um dado problema é caracterizado como “*stiff*”. (Lambert, 1977):

1. A rigidez ocorre quando os requisitos de estabilidade, e não os de precisão, restringem o comprimento da etapa.
2. A rigidez ocorre quando alguns componentes da do sistema decaem muito mais rapidamente que outros.

Uma breve observação no mapa de curva residual do sistema n-pentano/n-hexano/n-heptano temos as duas declarações de Lambert obedecidas:

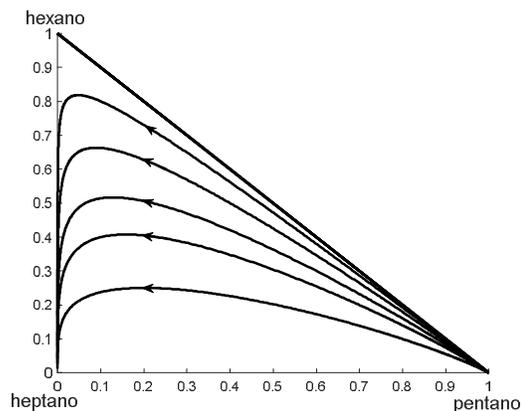


Figura 2 – Mapas de curvas residuais do sistema n-pentano/n-hexano/n-heptano (Perry e Green, 2007)

Como mostra a Figura 2, as curvas indicam a estabilidade das curvas e também mostra o decaimento rápido da composição em quantidade em dos componentes.

Uma outra observação importante com relação ao Método de Euler. O problema dos mapas de curvas residuais são resolvidos considerando a variável ζ como um tempo adimensional e para variação temporal das variáveis, o Método de Euler é indicado para estes casos. Portanto tem-se os

Nas Equações 7 o P_i^{sat} é dado conforme a Equação 8 (Yaws, 2015).

$$\log(P_{i(mmHg)}) = A_i - \frac{B_i}{T(^{\circ}C) + C_i} \quad (8)$$

O coeficiente global de fugacidade do componente i (Φ_i) na fase vapor, nas Equação 7, é calculado segundo a Equação 9 (Smith et al., 2020).

$$\Phi_i = \left(\frac{\hat{\phi}_i}{\phi_i^{sat}} \right) \exp \left[\frac{-V_i^l(P - P_i^{sat})}{RT} \right] \quad (9)$$

em que ϕ_i^{sat} é o coeficiente de fugacidade para o componente i puro, como vapor saturado (Equação 10), e V_i^l é o volume molar do componente i na condição de líquido saturado conforme a equação de Rackett (Poiling et al., 2001).

$$\phi_i^{sat} = \exp \left(\frac{B_{ii} P_i^{sat}}{RT} \right) \quad (10)$$

O parâmetro $\hat{\phi}_i$, coeficiente de fugacidade do componente i para a fase vapor, é dada pela Equação 11 (Silva, 2002), a equação de Virial, que tem a vantagem de aplicação em misturas.

$$\ln(\hat{\phi}_i) = \left(\frac{2}{\hat{V}_m} \right) \sum_{j=1}^{NC} y_j B_{ij} - \ln(Z_m) \quad (11)$$

Em que \hat{V}_m representa o volume molar, y_j , a composição da fase vapor do componente j , B_{ij} , o segundo coeficiente de Virial, e Z_m , o fator de compressibilidade de misturas.

Neste trabalho, resolveu-se as equações algébricas 5 e 7 com o *software* MATLAB, implementado no computador LENOVO Intel® Core™ i7-7500 CPU.

requisitos para resolver os mapas de curvas residuais pelo

1. Definir a pressão (P), a composição global (x^o) do sistema, as constantes de Antoine, e os parâmetros dos modelos de coeficiente de atividade para a fase líquida e de fugacidade para a fase vapor.
2. Analisar se o sistema é ideal ou não.
 - 2.1 Sim: $\gamma_i = \Phi_i = 1$.
 - 2.2 Não: Escolher o modelo de coeficiente de atividade para a fase líquida.
3. Resolver as equações 5 e 7.

O pseudocódigo para resolver as Equações 5 e 7, pelo Método Euler é conforme a seguir.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para resolver obter os mapas de curvas residuais através do Método de Euler, utilizaram-se os sistemas ternários a seguir: éter etílico(1)/metanol(2)/1-butanol(3) e etanol(1)/2-metil 2-propanol (2)/metil ciclohexano(3).

Adotou-se os modelos de coeficiente de atividade para a fase líquida NRTL, UNIQUAC e UNIFAC, para o modelo de coeficiente de fugacidade para a fase vapor, a equação de Virial. As propriedades críticas foram obtidas a partir de Yaws (2008), e as constantes de Antoine também de Yaws (2015).

Os parâmetros de contribuição de grupos do modelo UNIFAC foram obtidos de Hansen et al. (1991). Para o primeiro sistema, os parâmetros dos modelos de coeficiente de atividade para a fase líquida foram obtidos de Gao et al. (2019), e para o segundo sistema, Sánchez-Russinyol, et al. (2010).

Os desvios da composição dos azeótropos, caso houver, em relação aos obtidos experimentalmente são dados pela Equação 12.

$$D_i = \frac{|x_i^{az} - x_i^{az*}|}{x_i^{az*}} \quad (12)$$

em que x_i^{az} é a composição azeotrópica do componente i , segundo o mapa de curvas residuais, e x_i^{az*} é a composição de azeótropo do componente i , determinado experimentalmente. A seguir, estão os mapas de curvas residuais obtidos pelo Método de Euler

4.1 Sistema éter etílico-metanol-1-butanol: P = 101,3 kPa

A Figura 3 apresenta os mapas de curvas residuais para o sistema éter etílico-metanol-1-butanol, obtidos a partir do Método de Euler. Os mapas de curvas residuais não apresentam regiões distintas de destilação e também indica a ausência de pontos de azeótropos.

Os mapas indicam também que para qualquer composição de alimentação, a destilação caminha para o 1-butanol, isto é, após o processo de destilação será obtido o 1-butanol puro. Estes fatos refletem os resultados experimentais de (Gao et al, 2019).

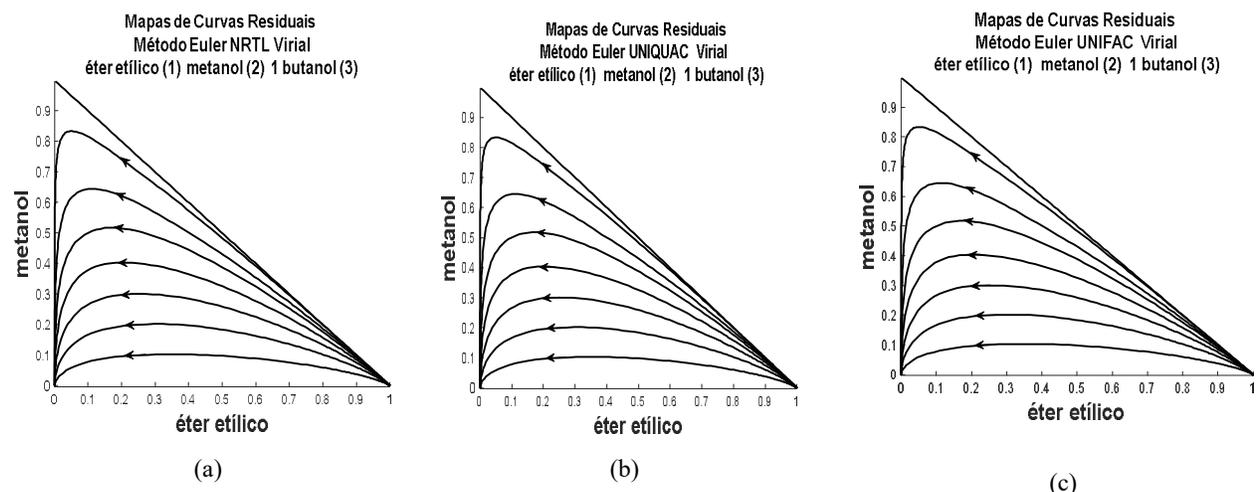


Figura 3 - Mapas de curvas residuais para o Método de Euler. (b) NRTL, (c) UNIQUAC e (d) UNIFAC.

4.2 Sistema etanol-2-metil-2-propanol-metilciclohexano: P = 101,3 kPa.

A Figura 4 apresenta os mapas de curvas residuais para o sistema etanol-2 metil 2 propanol-metilciclohexano. De acordo com a Figura 5 verifica-se a presença de duas regiões de destilações, I e II e a fronteira de destilação. Para estes mapas, se uma composição de alimentação estiver na região I, o produto final puro será o 2 metil 2 propanol e caso estiver na região II o produto puro será o metilciclohexano.

Os pontos de azeótropos foram determinados pelos mapas de curvas residuais, conforme indicam os dados experimentais de (Sánchez-Russinyol, 2007). Para este sistema o modelo de coeficiente de atividade que forneceu os melhores resultados foi o NRTL.

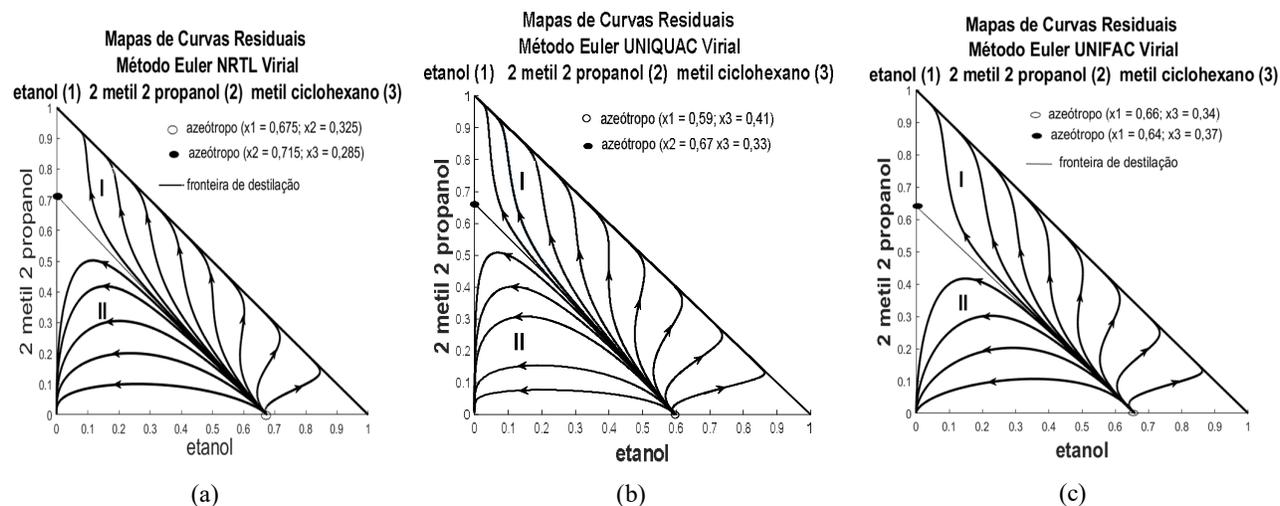


Figura 4 - Mapas de curvas residuais para o Método Euler. (a) NRTL, (b) UNIQUAC e (c) UNIFAC.

A Tabela 3 apresenta as composições do azeótropo formado pelo binário etanol/metilciclohexano. De acordo com os dados apresentados a construção dos mapas residuais pelo Método de Euler utilizando o modelo NRTL de coeficiente de atividade apresentou o menor desvio relativo em relação aos modelos de coeficiente de atividade UNIQUAC e UNIFAC. Estes resultados podem ser um indício de que a elaboração dos mapas de curvas residuais pelo Método de Euler funciona muito bem para o modelo de coeficiente de atividade NRT.

Os resultados da Tabela 4, estão apresentados os resultados da composição do azeótropo formado pelo binário 2-metil 2- propanol /metilciclohexano. Como no binário etanol/metilciclohexano os menores desvios relativos foram para o modelo de coeficiente de atividade NRTL. Portanto o modelo NRTL, ao que tudo indica, é o mais adequado para utilizar o Método de Euler na elaboração dos mapas de curvas residuais.

No trabalho de (Silva et al., 2020) os autores aplicaram o Método de Binous para elaboração dos mapas de curvas residuais. Uma das observações daquele trabalho foi que o Método de Binous seria capaz para encontrar a fronteira de destilação. Neste trabalho a fronteira de destilação da Figura 4 não foi obtida diretamente pelo Método de Euler. Esta fronteira foi obtida através do ponto de azeótropo do sistema 2-metil 2-propanol/metilciclohexano. A sistemática de construção da fronteira de destilação foi tomar a composição do 2-metil2-propanol do binário 2-metil2-propanol que é de 0,7, aproximar a composição do etanol em 10^{-6} e por um balanço molar obtém-se a composição do etanol. Como a fronteira de destilação é também uma curva residual, a partir da composição anterior aplica-se o Método de Euler na elaboração da fronteira de destilação.

Tabela 3 - Comparação dos pontos de azeótropo entre as curvas residuais e os dados experimentais.

Modelo de Coeficiente de atividade	Etanol	Metil ciclohexano	Etanol*	Metil ciclohexano*	Desvio Relativo Etanol	Desvio Relativo Metil-ciclohexano
NRTL	0,675	0,285	0,6700	0,3300	0,007	0,015
UNIQUAC	0,590	0,410	0,6700	0,3300	0,120	0,195
UNIFAC	0,660	0,340	0,6700	0,3300	0,015	0,030

(*) Valores experimentais.

Tabela 4 - Comparação dos pontos de azeótropo entre as curvas residuais e os dados experimentais.

Modelo de Coeficiente de atividade	2-metil 2-propanol	Metil-ciclohexano	2-metil 2-propanol *	Metil-ciclohexano*	Desvio Relativo Etanol	Desvio Relativo 2-metil 2-propanol
NRTL	0,715	0,285	0,700	0,300	0,021	0,050
UNIQUAC	0,670	0,330	0,700	0,300	0,040	0,100
UNIFAC	0,663	0,337	0,700	0,300	0,050	0,123

(*) Valores experimentais.

O Método de Euler está apresentado em (Lyra e Elliot, 1998). Nesta obra os autores resolveram os mapas de curva residuais aplicando o Método de Euler somente para a Equação 1 tomando uma taxa de evaporação (dV), o qual representa o tamanho do passo no domínio discretizado de 0,15. Para este valor de passo os mapas residuais das Figuras 3 e 4 não construíram as curvas por inteiro. As curvas mostraram uma indicação do caminho da destilação. Para resolver este problema foi escolhido um passo menor, porém não tão pequeno, pois um passo muito pequeno torna o Método de Euler moroso. O passo de integração para o Método de Euler foi tomado de 0,01 conforme (Doherty e Malone, 2001).

6 e também foi aplicado o Método de Euler. Com esta metodologia a Equação 1 foi transformada em uma equação algébrica, Equação 5, assim a elaboração dos mapas de curvas residuais foram resolvidas por equações algébricas. Esta metodologia foi aplicada para os modelos de coeficiente de atividade NRTL, UNIQUAC e UNIFAC. Neste estudo, a obtenção de mapas de curvas residuais utilizando o modelo NRTL foi o que forneceu os menores desvios relativos na composição do azeótropo formado pelos binários etanol/metilciclohexano e o binário 2-metil-2propanol/metilciclohexano. Estes resultados indicam que para o Método de Euler o modelo de coeficiente de atividade NRTL é o mais indicado.

Concluindo, o Método das Diferenças Finitas, através do Método de Euler, mostrou-se um potencial método para a obtenção de mapas de curvas residuais. Os mapas de curvas residuais pelo Método de Euler é mais indicado para o modelo de coeficiente de atividade NRTL. Para uma conclusão mais geral, é necessário avaliar outros sistemas. Um outro ponto de

5. CONCLUSÕES

Neste trabalho estudou-se a aplicação do Método de Euler na Equação 1. Tomou-se a equação do bolha T, a Equação

estudo diz respeito à avaliação de *entrainers* adequados para a quebra dos azeótropos em ambos os sistemas estudados.

REFERÊNCIAS

- Alhumaizi, K. Comparison of Finite Difference Methods for The Numerical Simulation Of Reacting Flow. **Computers and Chemical Engineering**, 28, 1759–1769. 2004.
- BIALECKI, B., FAIRWEATHER, G. (2001). Orthogonal Collocation Methods for Partial Differential Equations. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, 128, 55–82. 2001
- BINOUS, H. Computation of Residue Curves Using MATHEMATICA and MATLAB. **Computer Simulations. Chapter 6**. New Science Publishers, Inc, 2013
- CASTILLO, F. J. L.; TOWLER, G. P. Influence of multicomponent mass transfer on homogeneous azeotropic distillation. **Chemical Engineering Science**, v. 53, n. 5, p. 963-976, 1998.
- CHAPRA, S.C. Applied Numerical Methods with MATLAB For Engineers and Scientists. 3th ed. McGraw-Hiill, 2013
- DOHERTY, M. F.; CALDAROLA, G. A., Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillation. 3 – The Sequence of Columns for Azeotropic and Extractive Distillations. **Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals**, v. 24, n. 4, p. 474-485, 1985.
- DOHERTY, M. F.; PERKINS, J. D. On the Dynamics of Distillation Process ii: the simple distillation of model solutions. **Chemical Engineering Science**, v. 33, p. 569-578, 1977.
- FIDKOWSKI, Z. T.; DOHERTY, M. F.; MALONE, M. F. Feasibility of Separations for Distillation on nonideal Ternary Mixtures. **AIChE Journal**, v. 39, n.8, p. 1303-13221, 1993.
- FREITAS, J. A., CUONG, P.T., Faria, R. Modeling of Cement Hydration in High Performance Concrete Structures with Hybrid Finite Elements. **Int. J. Numer. Meth. Engng** 103:364–390. 2015.
- HANSEN, H. K.; RASMUSSEN, P.; FREDENSLUND, A.; SCHILLERCHILLER, M.; GMEHLING, J. Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. 5. Revision and Extension. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 30, n 10, p. 2352-2355, 1991.
- LAMBERT, J. D., D. JACOBS. The Initial Value Problem for Ordinary Differential Equations. The State of The Art in Numerical Analysis, New York: **Academic Press**: 451–501. 1977.
- LEVEQUE, R. J., Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems, Philadelphia, SIAM, 2007
- PHAM, H. N.; DOHERTY.; M. F. Design and Synthesis of Heterogeneous Azeotropic Distillations - I. Heterogeneous phase diagrams. **Chemical Engineering Science**, v. 45, n. 7, p. 1823-1836, 1990.
- POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. The properties of gases and liquids. 5th ed., New York: McGraw Hill, 2001.
- REIS, M. H. M. Desenvolvimento de um programa para geração de mapas de curvas residuais e aplicação a processos de destilação azeotrópica e extrativa. 2002. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Estadual de Campinas.
- REIS, M. H. M.; SILVA, J. M. F.; WOLF-MACIEL, M. R. Irreversible model for representing the dynamic behavior of simple distillation process. In: **EUROPEAN SYMPOSIUM ON COMPUTER AIDED PROCESS ENGINEERING**, 2004, Lisboa. Proc. ESCAPE-14. 2004. v. 18, p. 745-750.
- ROSSI, A. S. Cálculo de curvas residuais aplicando modelos de equilíbrio e correção por eficiência. 2013. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Uberlândia.
- SÁNCHEZ-RUSSINYOL, M. C. Isobaric vapor-liquid equilibrium for ternary mixtures of ethanol and methylcyclohexane with 3-methylpentane and tert-butyl alcohol at 101.3 kPa. **Fluid Phase Equilibria**, v. 261, n. 1-2, p. 104-110. 2007.
- SEADER, J. D.; HENLEY, E. J. Separation Process Principles. New York: John Wiley & Sons, 1998.
- SILVA, et, al. Obtaining Residual Curves Maps for Homogeneous Azeotropic Ternary Systems: A Comparative Study. **The Journal of Engineering and Exact Sciences**.v.6, n.5. 2020.
- SILVA, J. P. Avaliação de métodos para o cálculo do equilíbrio químico envolvendo sistemas em fase gasosa multirreacionais. 2002. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Uberlândia.
- SKONECZNYA, S., MONIKA, C. Modeling of Continuous-Flow Bioreactors with A Biofilm with The Use of Orthogonal Collocation on Finite Elements. **Chemical Engineering Communications** 205, 7, 929–946. 2018.
- SMITH, et, al. Introdução à termodinâmica da engenharia química. 8^a ed., Rio de Janeiro: LTC, 2020.
- WANG, Y., & HUTTER, K. (2001). Comparison of Numerical Methods with Respect to Convectively Dominated Problems. **International Journal of Numerical Methods Fluids**, 37, 721–745. 2001
- WEI, et al. Numerical Simulation of Effect of Methyltrichlorosilane Flux on Isothermal Chemical Vapor Infiltration Process of C/SiC Composites. **J. Am. Ceram. Soc.**, 9. 2762–2768.2006.
- WIDAGDO, S.; SEIDER, W. D. Azeotropic Distillation. **AIChE Journal**, v. 42, n. 1, p. 93-130, 1996.
- YAWS, C. L. The Yaws Handbook of Vapor Pressure: Antoine coefficients. 2nd ed., Oxford: Gulf Professional Publishing, 2015.
- YAWS, C. L. Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons. New York: William Andrew Inc., 2009.