

Study of an industrial distillation plant using the free software ChemSep

Estudo de uma planta de destilação industrial utilizando o *software* livre ChemSep

Article Info:

Article history: Received 2022-03-02 / Accepted 2022-04-20 / Available online 2022-05-25

doi: 10.18540/jcecv18iss3pp14209-01e

Marcos Duran Pereira

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-8109-5053>

Universidade Federal do Paraná, Brazil

E-mail: marcos.duran@ufpr.br

Iury Sousa e Silva

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9458-7978>

Universidade Mauricio de Nassau, Brazil

E-mail: iury.sousa@mauriciodenassau.edu.br

Antônio Marcos de Oliveira Siqueira

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7088-3211>

Federal University of Viçosa, Brazil

E-mail: antonio.siqueira@ufv.br

Resumo

A destilação é um método utilizado para separar componente de uma mistura homogênea. Para se reduzir custos com experimentação e buscar resultados mais precisos em diversos cenários, a simulação computacional tem contribuído consideravelmente para o segmento. Este trabalho teve o objetivo de simular um processo de destilação etanol-água utilizando dados reais de um artigo científico. Através de uma pesquisa bibliográfica exploratória e utilizando o *software* ChemSep, obteve-se resultados tabelados de temperaturas, entalpias, entropias, líquido saturado, frações molares e vazões mássicas, além de demonstração gráfica e se estimulou o aprofundamento em pesquisa, especialmente em simulação computacional voltado para a Engenharia Química.

Palavras-chave: ChemSep. Destilação. Simulação Computacional.

Abstract

Distillation is a method used to separate components of a homogeneous mixture. In order to reduce experimentation costs and seek more accurate results in different scenarios, computer simulation has contributed considerably to the segment. This work aimed to simulate an ethanol-water distillation process using real data from a scientific article. Through an exploratory bibliographic research and using the software ChemSep, tabulated results of temperatures, enthalpies, entropies, saturated liquid, molar fractions and mass flows were obtained, in addition to a graphic demonstration and stimulated further research, especially in computational simulation focused on for Chemical Engineering.

Keywords: ChemSep. Distillation. Computational Simulation.

1. Introdução

Conforme Andrade e Silva (2018) e Mota (2008), a destilação é um significativo método utilizado para separar misturas e possui várias aplicações na indústria e também na vida acadêmica.

Esta importante operação unitária faz parte de um conjunto das operações que se baseiam na transferência de massa e o mecanismo de separação subtendido é o do equilíbrio líquido / vapor, em que obtemos duas fases, uma líquida e outra de vapor, que têm composições diferentes, ou seja, se baseia na diferença de volatilidade dos componentes da mistura (SARTORI *et al.*, 2008; SILVA *et al.*, 2019; SILVA *et al.*, 2020).

De acordo com Gani e Bek-Pedersen (2000) e Mayer (2010), o processo de destilação demanda uma grande quantidade de energia, em vista disso, faz-se necessário determinar algumas variáveis no processo a fim de minimizar os custos de operação.

A simulação computacional na destilação é uma relevante ferramenta que busca resultados mais assertivos e gastos menores com experimentação, tendo em vista que há a possibilidade de se avaliar diversos cenários, sendo considerada uma tendência em vários meios industriais (CUNHA JUNIOR, 2021; PITOMBEIRA; MONTEIRO FILHO, 2016; SIMONELLI *et al.*, 2017).

Este respectivo trabalho, baseado em um projeto de iniciação científica, tem o objetivo de empregar o *software* ChemSep para simular processos de uma planta industrial de um artigo já publicado, comparando e buscando validar os reais dados obtidos na saída do simulador, como temperaturas de alimentação, do topo e da base e entropias e vazões molares e mássicas da água e do etanol. Além disso, tem-se o objetivo de utilizar as ferramentas gráficas do programa, como o método McCabe-Thiele.

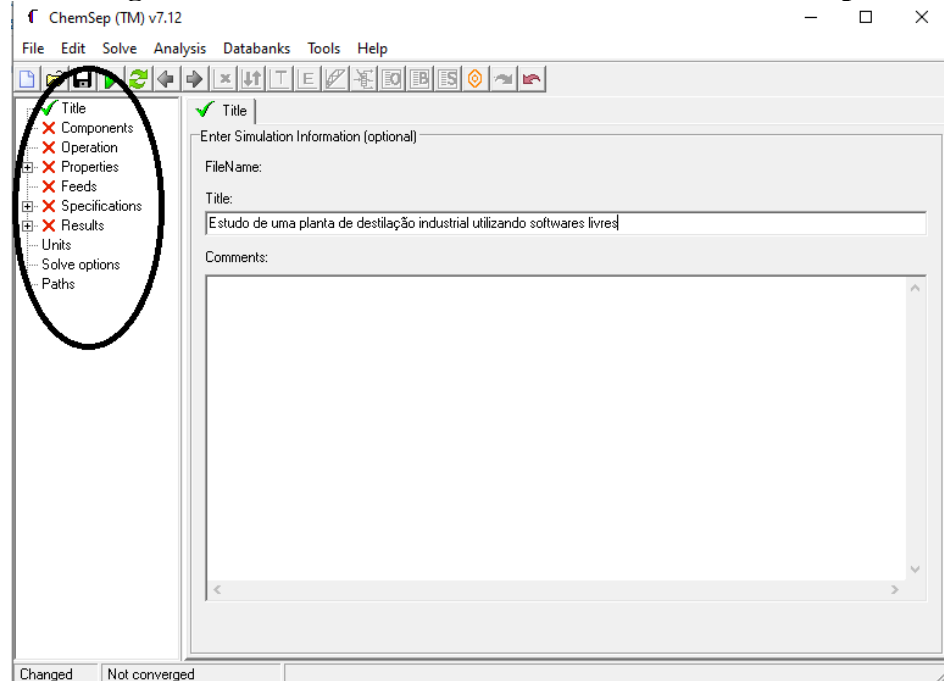
2. Materiais e Métodos

A metodologia aplicada no presente trabalho se baseia em uma pesquisa bibliográfica exploratória e também de modelagem e simulação no *software* ChemSep. Este programa é um simulador de coluna para destilação, absorção e processos de extração. Combina o modelo clássico de coluna de estágio de equilíbrio com um modelo de coluna sem equilíbrio (baseado em taxa), em uma interface fácil e intuitiva (CHEMSEP, 2022; MARQUES; SANTÓRIO, 2019).

Adicionalmente, será comparada a simulação com os dados reais obtidos em alguns trabalhos científicos pesquisados na internet, especialmente do artigo de Luna *et al.* (2018), tendo-se, assim, uma validação do que foi realizado.

3. Resultados e Discussão

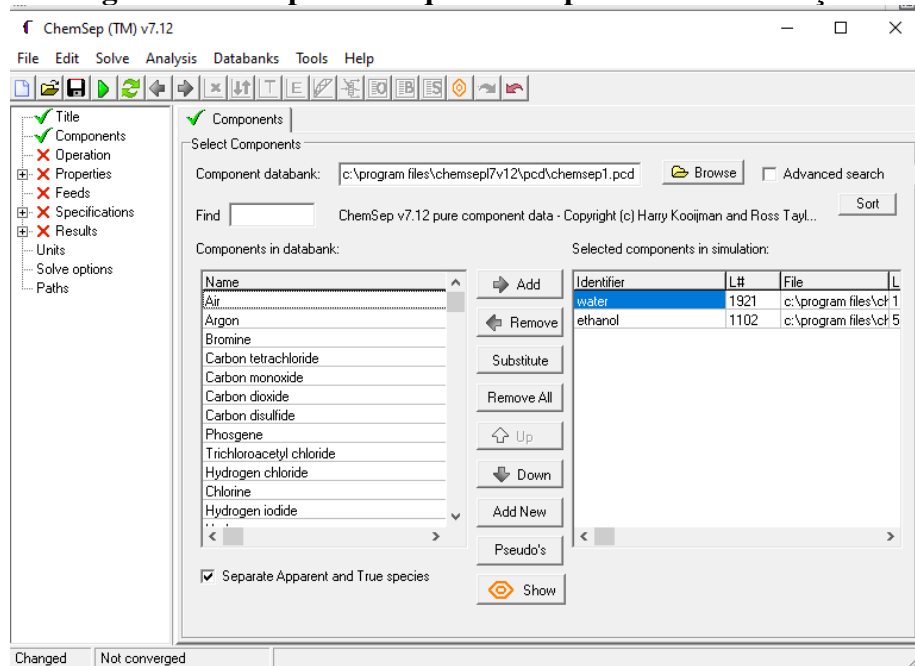
Conforme a Figura 1, o ChemSep apresenta algo como um *check-list* para preencher os dados de entrada no programa e é bastante intuitivo, em que se preenche o título do projeto, os componentes, a operação, as propriedades, a alimentação, as especificações e os resultados são apresentados.

Figura 1 – Check-list dos dados de entrada do ChemSep.

Estes dados de entrada mencionados foram retirados do artigo de Luna *et al.* (2018). Somado a este artigo, utilizou o tutorial da ferramenta ChemSep disponível no material de Kooijman (2013).

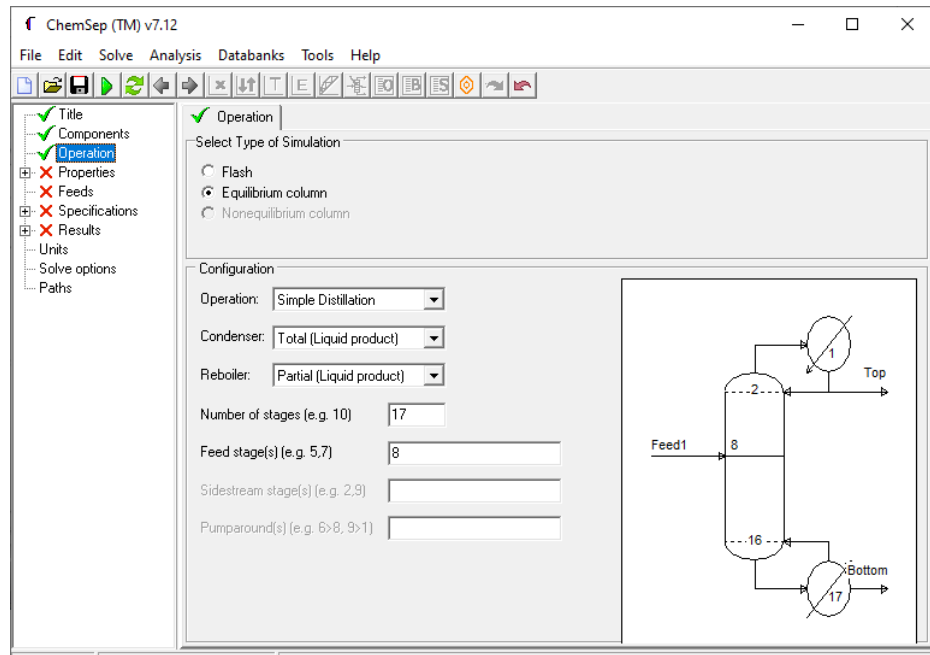
Inicialmente se colocou o título na opção “Title” com o respectivo nome: “Estudo de uma planta de destilação industrial utilizando *softwares* livres”.

A etapa seguinte foi a de colocar os componentes da destilação no item “Components”, neste caso específico, da separação da água e do etanol, conforme apresentado na Figura 2.

Figura 2 – Componentes que fazem parte desta destilação.

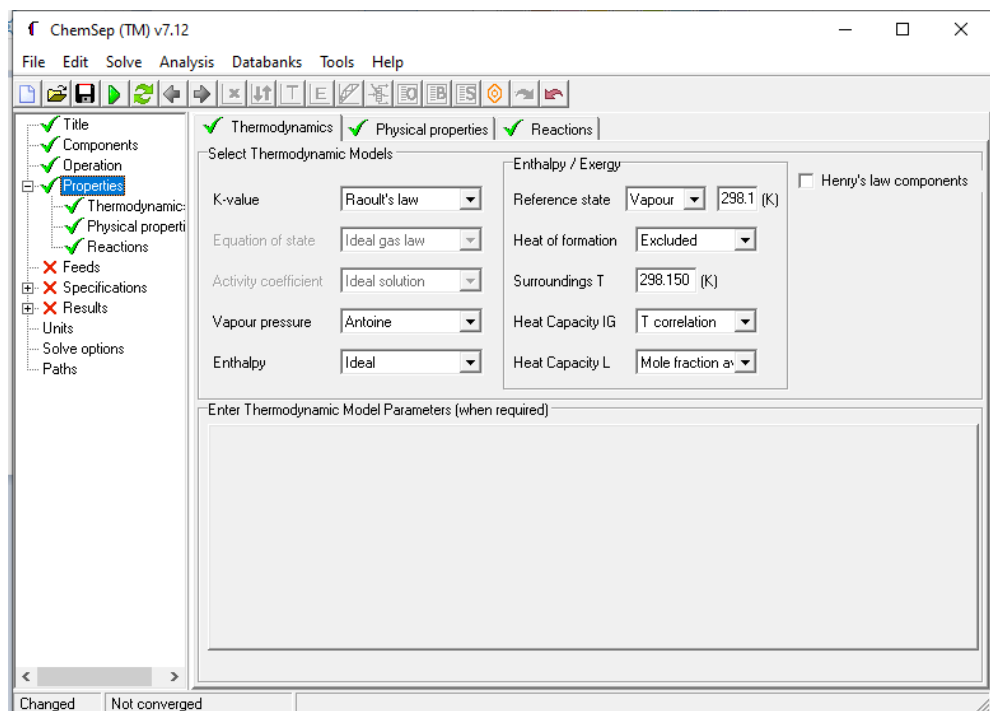
Na sequência, em “Operation”, coloca-se coluna de equilíbrio, destilação simples, o número de estágios (pratos) de 17 e alimentação no prato número 8, como segue apresentado na Figura 3.

Figura 3 – Dados de entrada da destilação em operação.



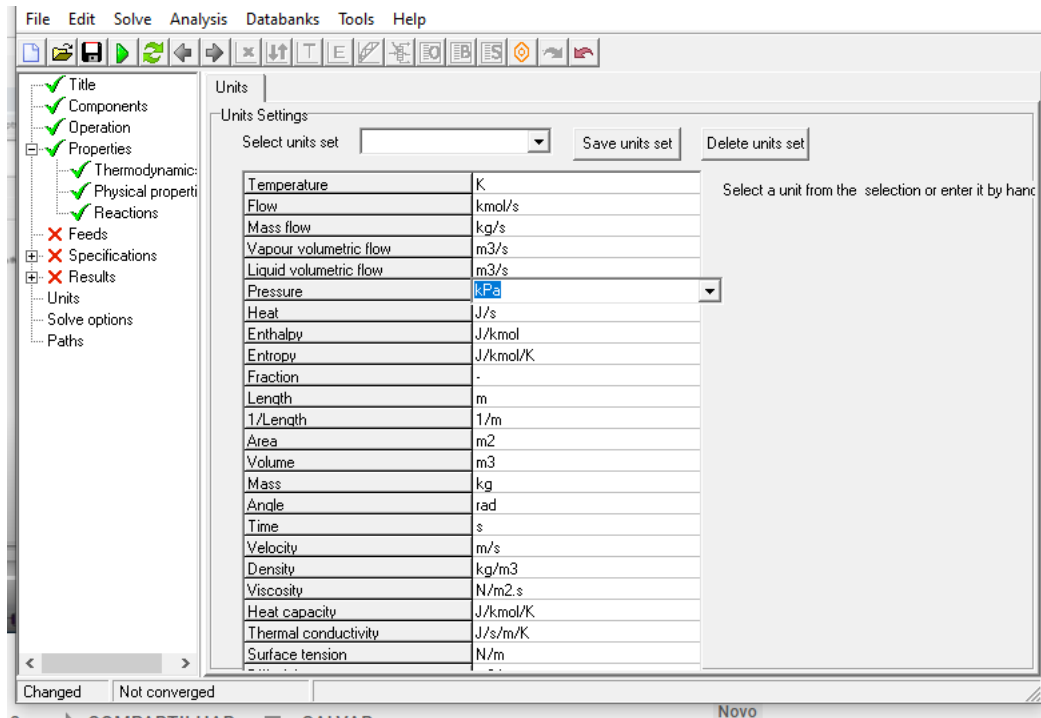
Em seguida, em “*Properties*”, coloca-se Lei de Raoult, pressão do vapor Antoine e entalpia ideal, conforme Figura 4 (ABREU *et al.*, 2019).

Figura 4 – Propriedades do processo.



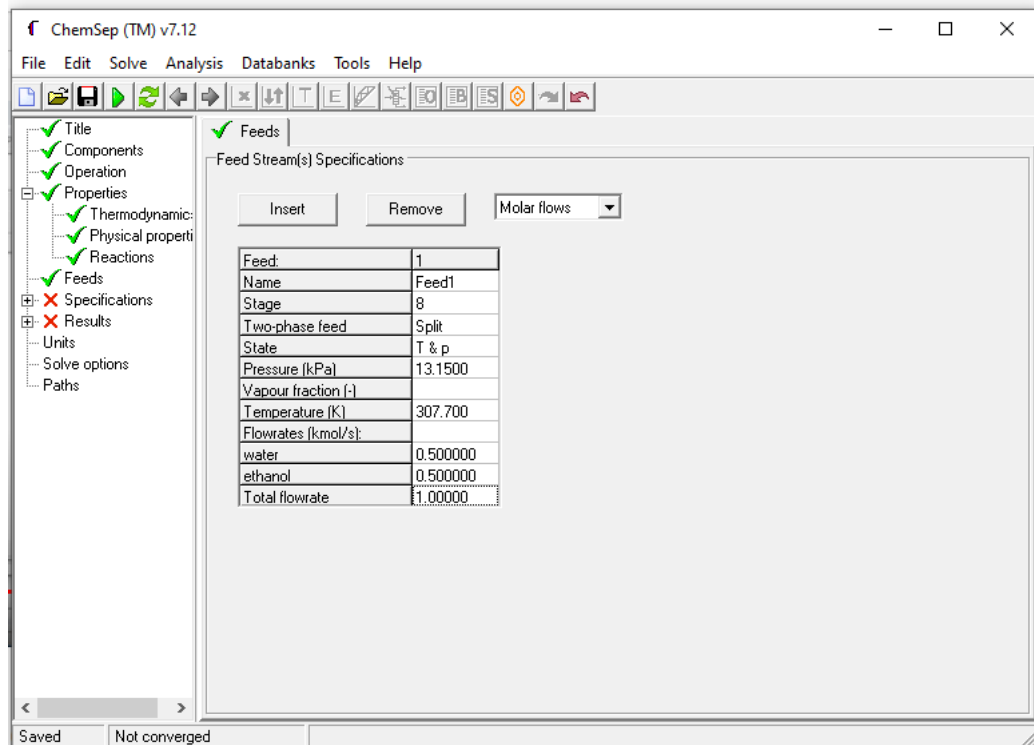
É necessário colocar em “*Feeds*” os dados de alimentação, mas antes é preciso alterar a unidade da pressão padrão do programa que está em N/m^2 para kPa no item “*Units*”, conforme apresentado na Figura 5.

Figura 5 – Alteração da unidade de pressão.



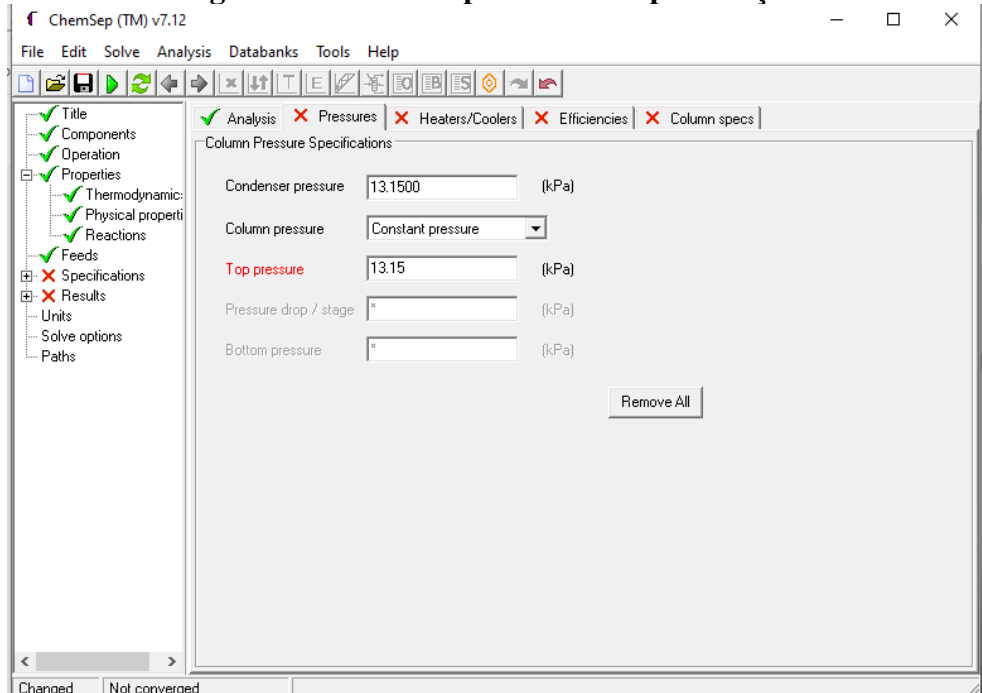
Voltando para os dados de alimentação, coloca-se a alimentação Split, pressão que é mencionada no artigo de 13,15 kPa, temperatura de 307,7 K, 0,5 para a água e 0,5 para o etanol, em que se apresenta na Figura 6.

Figura 6 – Dados de alimentação.



No tópico posterior de “Specifications”, mantém-se sem alteração o item “Analysis”, em “Pressures” acrescenta-se 13.15 kPa, a coluna de pressão constante, no que é demonstrado na Figura 7.

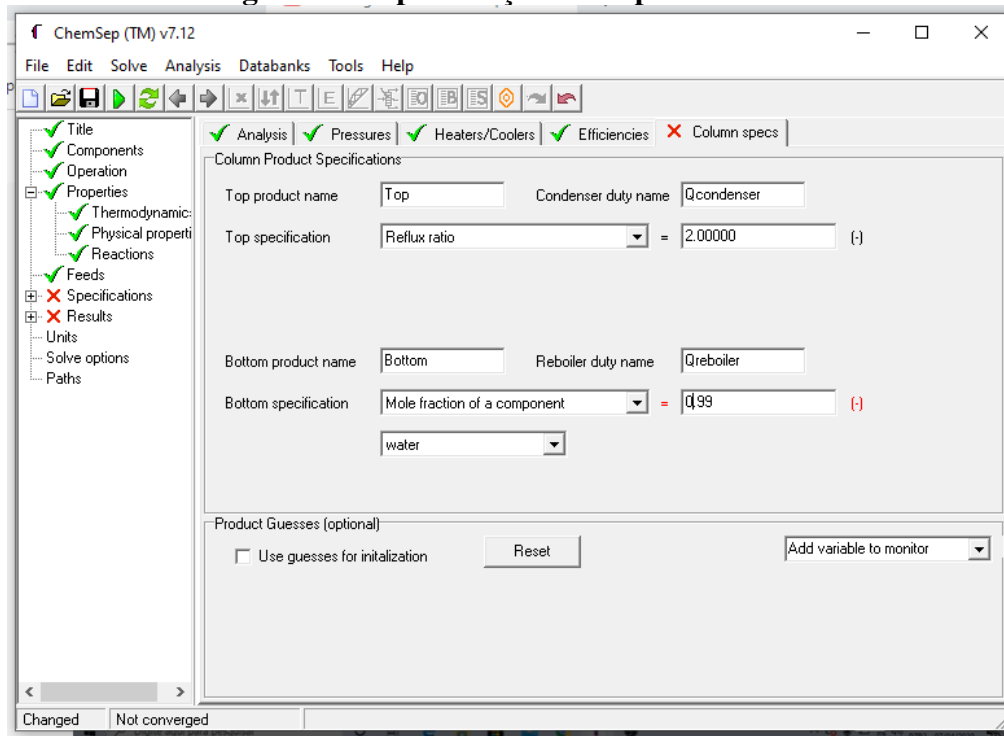
Figura 7 – Dados de pressão em especificações.



Não se alterando nada em “*Heaters/Coolers*” e “*Efficiencias*”, ou seja, sem perdas e com uma hipotética eficiência de 100%.

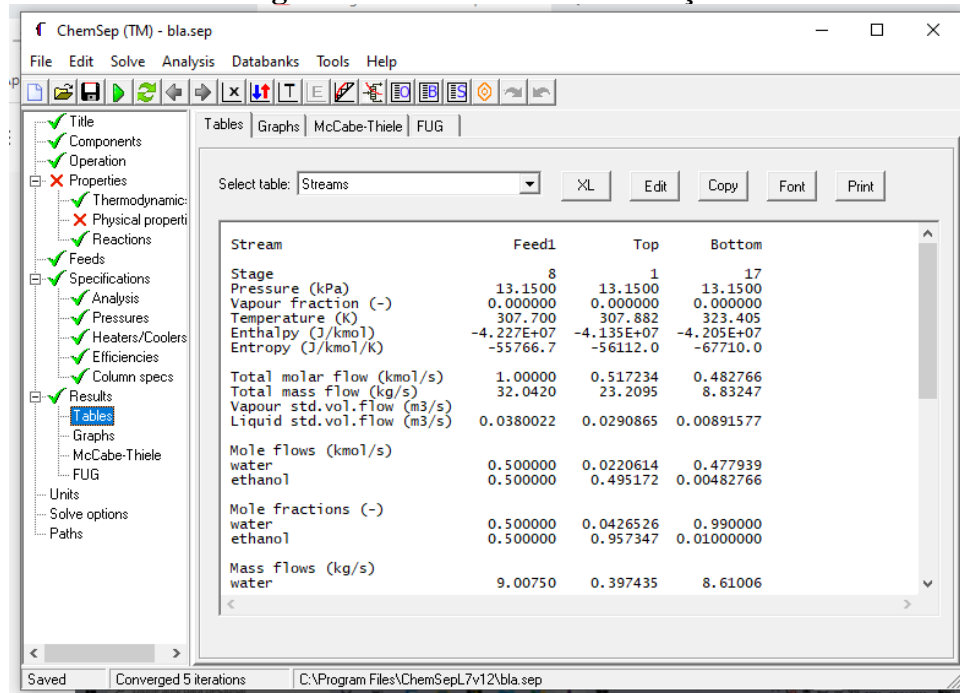
No último item de especificações, coloca-se a especificação de topo de “*Reflux ratio*” e a especificação da base de “*Mole fraction of a component*”, conforme é apresentado na Figura 8.

Figura 8 – Especificações do topo e da base.



Na etapa seguinte, coloca-se para “rodar” na seta verde localizada na parte superior com os dados de entrada fornecidos pelo artigo científico de referência e salva-se o que foi realizado. Automaticamente surgirão os resultados de tabelas conforme Figura 9.

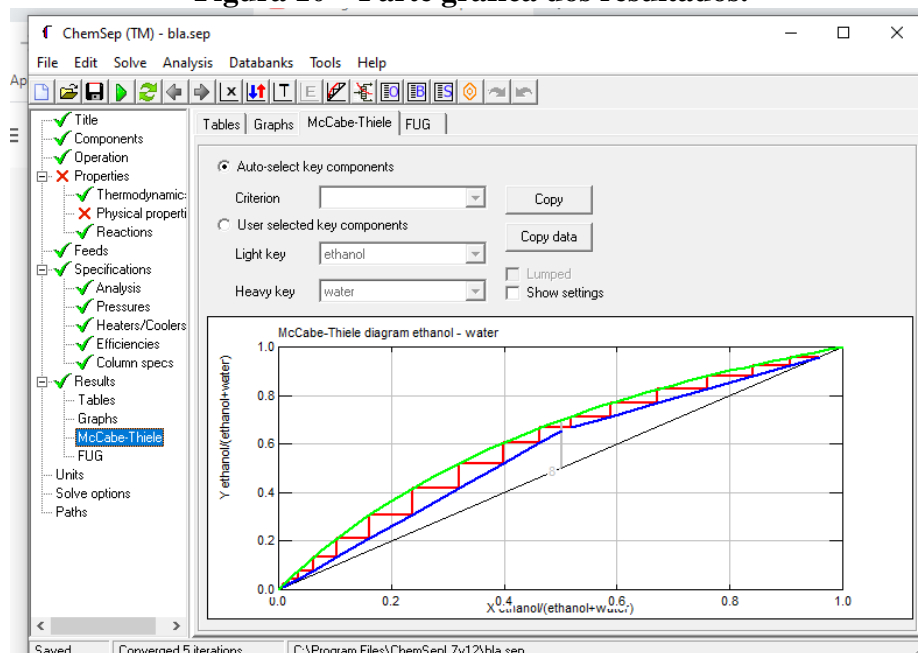
Figura 9 – Resultados da simulação.



Nesta Figura 9, visualiza-se, por exemplo, as temperaturas na alimentação de 307,700 K, no topo de 307,882 K e na base de 323,405 K. Além disso, são apresentadas as entropias na alimentação de -55766,7 J/kmol/K, no topo de -56112 J/kmol/K e na base de -67710 J/kmol/K. Adicionalmente, pode-se observar as vazões molares e mássicas da água e do etanol.

O programa permite ainda visualizar a parte gráfica, como o McCabe-Thiele, em que é demonstrada a linha de equilíbrio, a linha “Q” de alimentação, a linha em $x = y$, ou seja, a fração de vapor que é igual a fração de líquido (OLIVEIRA, 2011). Estas considerações são apresentadas na Figura 10.

Figura 10 – Parte gráfica dos resultados.



4. Conclusão

Foi utilizado satisfatoriamente o *software* ChemSep para simular uma destilação etanol-água de dados reais baseados em um artigo científico. A simulação apresentou resultados tabelados de temperaturas, entalpias, entropias, líquido saturado, frações molares e vazões mássicas, além de demonstração gráfica. Foram observadas temperaturas na alimentação de 307,700 K, no topo de 307,882 K e na base de 323,405 K. Além disso, foram apresentadas as entropias na alimentação de -55766,7 J/kmol/K, no topo de -56112 J/kmol/K e na base de -67710 J/kmol/K. Este trabalho foi baseado em uma iniciação científica e estimulou o aprofundamento em pesquisa, especialmente em simulação computacional voltado para a Engenharia Química.

Referências

- ABREU, V. A. *et al.* (2019). *Avaliação do equilíbrio líquido vapor de uma mistura de etanol + tolueno à temperatura constante utilizando simulação numérica em Matlab para modelos de composições locais*. Congresso de Engenharia Química em Iniciação Científica, Uberlândia, MG, Brasil.
- ANDRADE, M. F. D.; SILVA, F. (2018). Destilação: uma sequência didática baseada na História da Ciência. *Revista Química Nova*, São Paulo, SP, Brasil.
- CHEMSEP. (2022). *Modeling Separation Processes Tutorial*. Disponível em: <<http://www.chemsep.org/book/index.html>> Acesso em: 27 Abr. 2022.
- CUNHA JUNIOR, W. (2021). *Estudo do processo de destilação da mistura BTEX via simulação computacional*. Monografia (Graduação em Engenharia Química), Instituto de Ciências Ambientais, Universidade Federal de São Paulo, Campus Diadema.
- GANI, R.; BEK-PEDERSEN, E. (2000). *Simple new algorithm for distillation column design*. *AIChE Journal*, v. 46, n. 6, p. 1271–1274.
- KOOIJMAN, H. A. (2013). *ChemSep Help*. Clarkson University, New York.
- LUNA, G. *et al.* (2018). Experimental Data and New Binary Interaction Parameters for Ethanol/Water VLE at Low Pressures Using NRTL and UNIQUAC. *Revista Tecciencia*, Bogotá/Colômbia.
- MARQUES, W. P.; SANTÓRIO, R. (2019). Desenvolvimento de ferramenta didática para simulação de coluna de destilação por meio do método de McCabe-Thiele. *Revista IFES Ciência*, v. 5, n. 1, p. 01-10.
- MAYER, F. D. (2010). *Desenvolvimento da tecnologia de destilação apropriada à produção de álcool combustível em pequena escala*. Dissertação de Mestrado em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, RS, Brasil.
- MOTA, M. F. B. (2008). *Implantação de um sistema de destilação atmosférica de petróleo no labpetro-ufes e estudos quimiométricos de frações*. Dissertação de Mestrado em Química, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, Brasil.
- OLIVEIRA, L. F. (2011). *Desenvolvimento de curvas operacionais para uma coluna despentanizadora*. Monografia (Graduação em Engenharia Química), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.
- PITOMBEIRA, G. M. K.; MONTEIRO FILHO, E. S. (2016). *Simulação computacional de processo alternativo para refino de etanol*. Congresso de inovação, Ciência e Tecnologia do IFSP, São Paulo, SP, Brasil.
- SARTORI, E. R. *et al.* (2008). Construção e aplicação de um destilador como alternativa simples e criativa para a compreensão dos fenômenos ocorridos no processo de destilação. *Revista Química Nova na Escola*, V. 31, n. 1.
- SILVA, A. P. *et al.* (2020). Composição química de aguardente de cana obtida por diferentes métodos de destilação. *Revista Brazilian Journal of Food Technology*, v. 23, 32018308, Campinas, SP, Brasil.

- SILVA, L. R. C. *et al.* (2019). Destilação solar do solvente etanol proveniente do extrato de óleo de coco. *Revista Brazilian Journal of Development*, Curitiba, PR, Brasil.
- SIMONELLI, G. *et al.* (2017). Simulação do controle de uma coluna de destilação descontínua utilizando o Scilab. *Revista Engevista*, v. 19, n. 2, p. 498-519.