

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO  
ESCOLA DE QUÍMICA

**Grupo 10**

**Felipe Videira Pinho - DRE: 119.161.539**

**Eduarda da Silva Feijole - DRE: 118.043.788**

**Raphael Vieira Michaeli Pereira - DRE: 117.247.965**



RELATÓRIO DE OP II: COLUNA DE DESTILAÇÃO

RIO DE JANEIRO

2024

## 1. Introdução

A destilação é uma operação unitária que separa misturas de duas ou mais substâncias em fases líquida e vapor de composições distintas, utilizando o equilíbrio líquido-vapor. A diferença de volatilidades entre os componentes permite que, ao fornecer calor, substâncias com menores temperaturas de ebulição se vaporizem e sejam separadas antes daquelas com temperaturas mais altas. Colunas de destilação facilitam a troca de massa e calor entre as fases ao longo de seus pratos, com o refeedor na base promovendo a ebulição e o condensador no topo resfriando o produto.

Nesse contexto, em um projeto de coluna de destilação, é essencial definir se o condensador utilizado será do tipo parcial ou total. A preferência recai sobre o condensador total, uma vez que este permite a obtenção de um produto completamente líquido, o que facilita aspectos logísticos, como o transporte. Somente em situações nas quais o consumo energético necessário para a condensação completa da corrente seja excessivo, considera-se o uso de um condensador parcial.

Além disso, a escolha de um condensador total justifica-se pelo fato de que uma fração de benzeno na forma vaporizada implicaria em maiores custos de manuseio e utilização, em comparação com o benzeno líquido. Visto que o benzeno é amplamente utilizado como reagente na indústria química para a síntese de outras substâncias, considera-se mais adequado empregá-lo como líquido saturado.

Dessa forma, o projeto inicial será desenvolvido com base na utilização de um condensador total. Assim, conclui-se que  $x_D = x_0 = y_1$ .

## 2. Objetivo

O presente projeto tem como objetivo projetar partir da solução analítica uma coluna de destilação, que operará em condições atmosféricas, para uma indústria química que deseja produzir n-heptano 95% a partir de uma corrente líquida saturada equimolar de n-heptano e etilbenzeno de com vazão de 1000 kmol/h.

## 3. Cálculos

Com o objetivo de especificar a coluna que deve ser projetada para que o resíduo desta separação contenha no máximo 5% de n-heptano, foram utilizadas os seguintes dados:

- Corrente de n-heptano e etilbenzeno: o componente mais volátil é o n-heptano (PE = 96,4 °C) visto que seu ponto de ebulição é menor que o do etilbenzeno (PE = 136 °C)
- $X_D = 0,95$
- $X_{B, MAX} = 0,05$
- $Z_F = 0,5$
- $F = 1000 \text{ kmol/h}$
- A vazão da carga (F) é líquido saturado ( $\beta_F = 0$ )
- $P = 1 \text{ atm}$

### 3.1. Balanço de massa

Para encontrarmos as duas variáveis não mencionadas no enunciado, vazão de topo (D) e vazão de fundo (B), deve-se definir um sistema com duas equações. Portanto, tanto a equação do balanço de massa global quanto a equação de massa por componente devem ser utilizadas.

- Balanço de massa global:  $F = B + D$
- Balanço de massa por componente:  $F * Z_F = B * X_B + D * X_D$

Ao resolver as equações definidas anteriormente pode-se encontrar que as vazões de topo e de fundo são iguais a 500 kmol/h ( $D = 500 \text{ kmol/h}$ ,  $B = 500 \text{ kmol/h}$ ).

### 3.2. Razão de refluxo

Para calcular a razão de refluxo operacional deve-se primeiramente definir a razão de refluxo mínima, que é definida pela equação:

$$R_{R, MIN} = \frac{X_D - Y_F}{Y_F - X_F}$$

Como a carga é um líquido saturado, tem-se que  $Z_F = X_F$ . Para calcular o valor de  $Y_F$  valores experimentais foram extraídos do gráfico de equilíbrio fornecido e então os dados

foram interpolados para encontrar a equação de equilíbrio. A partir da equação de equilíbrio o valor de  $Y_F$  pode ser encontrada ( $Y_F = 0.73$ ). A partir desse valor a razão mínima de refluxo é calculada (aproximadamente  $R_{R, MIN} = 0,957$ ).

Com a razão de refluxo mínima definida deve-se determinar a razão de operação. Visto que, se a razão mínima for usada para simular o sistema teríamos infinitos estágios (sistema entraria em pinch). Para terminar a razão de refluxo de operação deve-se usar a seguinte equação:

$$R_{OP} = C * R_{R, MIN}, \text{ sendo } C > 1$$

Normalmente a constante  $C$  está entre 1,3 e 1,5. A seguir pode-se ver os gráficos gerados pelo analisador desenvolvido pela equipe.

Figura 1 - Razão de refluxo operacional de [1,5 a 1,3]

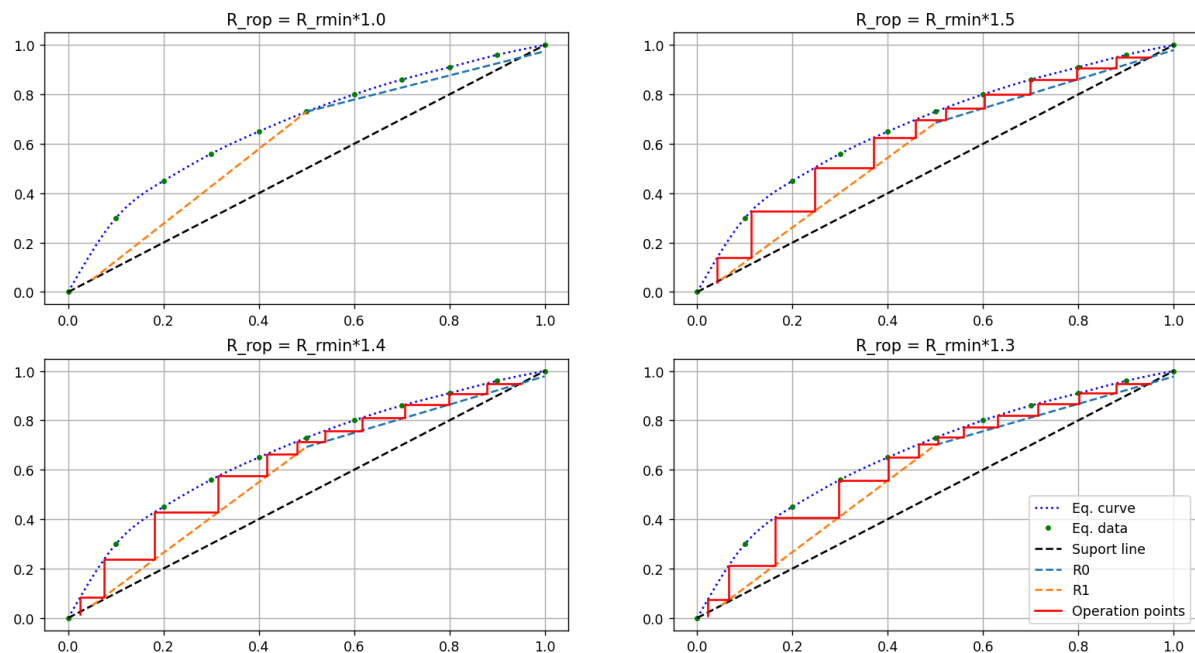
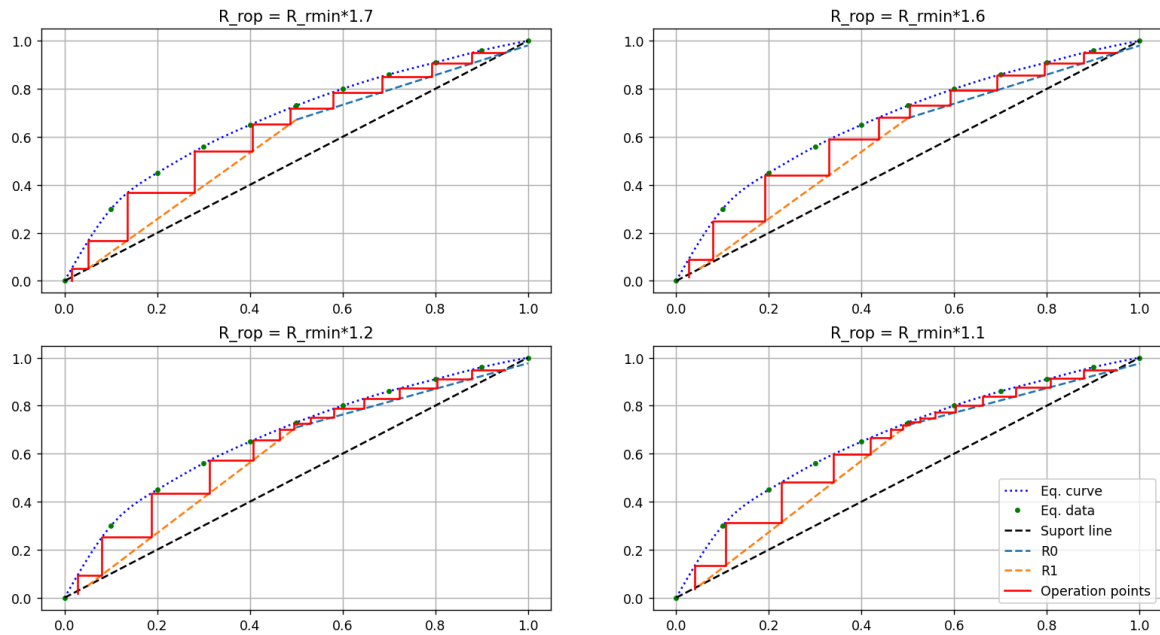


Figura 2 - Razão de refluxo operacional de [1,7 a 1,1]



Com os gráficos gerados pode-se determinar o número de estágios teóricos para cada constante:

$$R_{R,MIN} * 1,1 \Rightarrow 15 \text{ estágios}$$

$$R_{R,MIN} * 1,2 \Rightarrow 13 \text{ estágios}$$

$$R_{R,MIN} * 1,3 \Rightarrow 12 \text{ estágios}$$

$$R_{R,MIN} * 1,4 \Rightarrow 11 \text{ estágios}$$

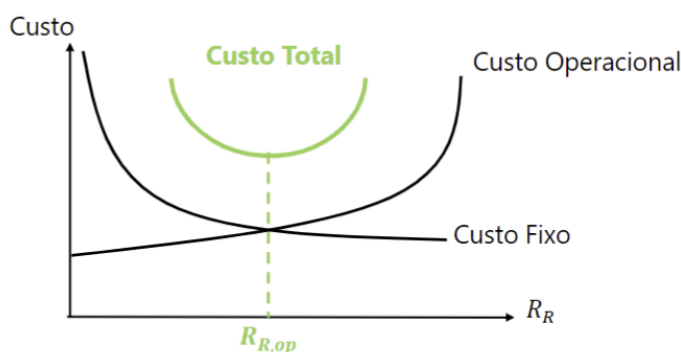
$$R_{R,MIN} * 1,5 \Rightarrow 10 \text{ estágios}$$

$$R_{R,MIN} * 1,6 \Rightarrow 10 \text{ estágios}$$

$$R_{R,MIN} * 1,7 \Rightarrow 10 \text{ estágios}$$

Dentro desse intervalo escolheu-se 1,5 (com  $R_{op} = 1,435$ ) como a constante para o cálculo da razão de refluxo operacional. Esse valor foi escolhido pois ao reduzir a constante o número de estágios teóricos aumenta e portanto o custo fixo de construção da planta também aumenta. Ao aumentar a razão de refluxo o número de estágios diminui mas o valor operacional aumenta. Deixando inviável o aumento impróprio da razão de refluxo, como mostrado abaixo:

Figura 3 - Relação entre custo operacional e fixo



### 3.3. Retas de operação

Como o projeto está sendo realizado pelo método analítico de McCabe - Thiele é importante calcular a etapa de tabelas. Porém, como o sistema não foi implementado em Excel, mas sim em python nenhuma tabela foi criada. Para tal as seguintes equações foram implementadas:

$$y_n = \frac{L_j}{V_j} x_{n-1} - \frac{1}{V_j} \sum_{k=0}^j F_k \cdot z_k$$

Vazões das correntes L e V de uma seção "j":

$$L_j = L_{j-1} + (1 - \beta_j) F_j - \frac{Q_j}{\lambda}$$

$$V_j = V_{j-1} - \beta_j F_j - \frac{Q_j}{\lambda}$$

Ponto de intercessão entre duas seções:

$$y_{j-1,j} = \frac{L_j \sum_{k=0}^{j-1} F_k \cdot z_k - L_{j-1} \sum_{k=0}^j F_k \cdot z_k}{L_{j-1} \cdot V_j - L_j \cdot V_{j-1}}$$

$$x_{j-1,j} = \frac{V_j \sum_{k=0}^{j-1} F_k \cdot z_k - V_{j-1} \sum_{k=0}^j F_k \cdot z_k}{L_{j-1} \cdot V_j - L_j \cdot V_{j-1}}$$

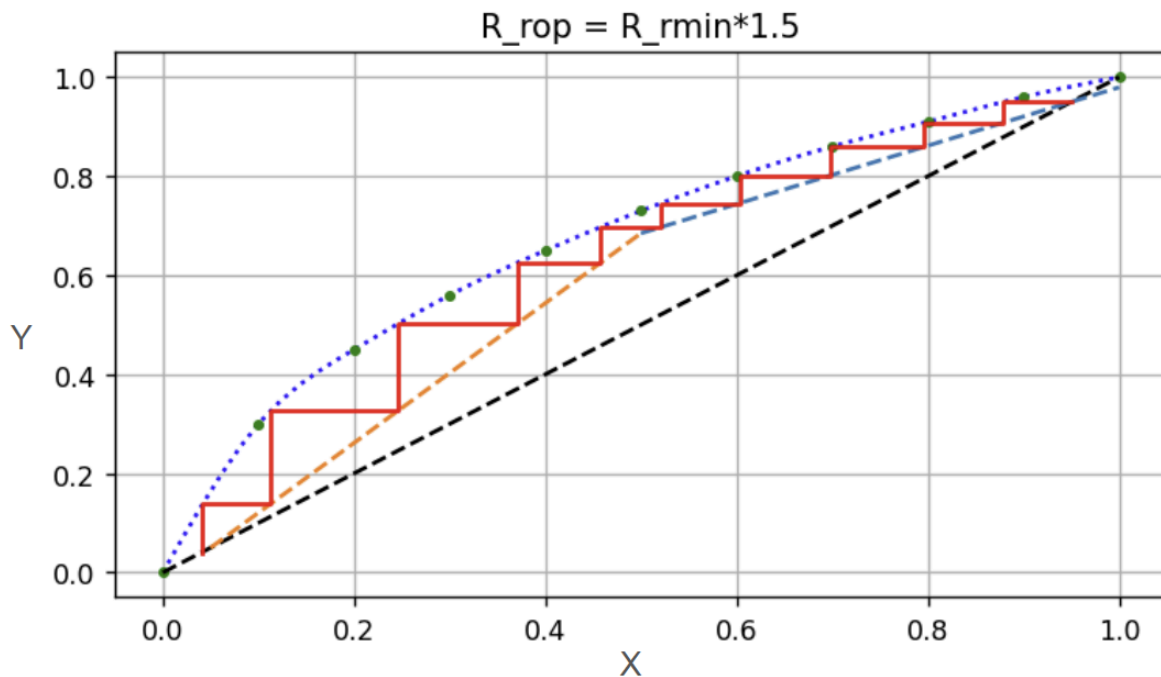
Com elas os pode-se determinar uma sequência de variáveis importantes para o problema:

Tabela 1 - Resolução da etapa de tabelas

Descrição	Valor
Coeficiente linear da ROSA	0.390
Coeficiente angular da ROSA	0.589
Coeficiente linear da ROSE	-0.021
Coeficiente angular da ROSE	1.411
Intercessão ROSA e ROSE	(X: 0.5   Y: 0.684 )

Portanto, agora basta marcar as relações de equilíbrio (retas horizontais) e as relações de operação (retas verticais). Sabe-se que esse sistema se inicia no ponto  $Y_i = X_i = X_D = 0.95$  (na reta auxiliar de 45°) e segue-se marcando equilíbrio, operação, equilíbrio, operação... e assim por diante até que  $X_i$  seja menor que  $X_B = 0,05$ . Assim como demonstrado na imagem abaixo:

Figura 4 - Gráfico de composição de n-heptano no líquido (X) VS no vapor (Y)



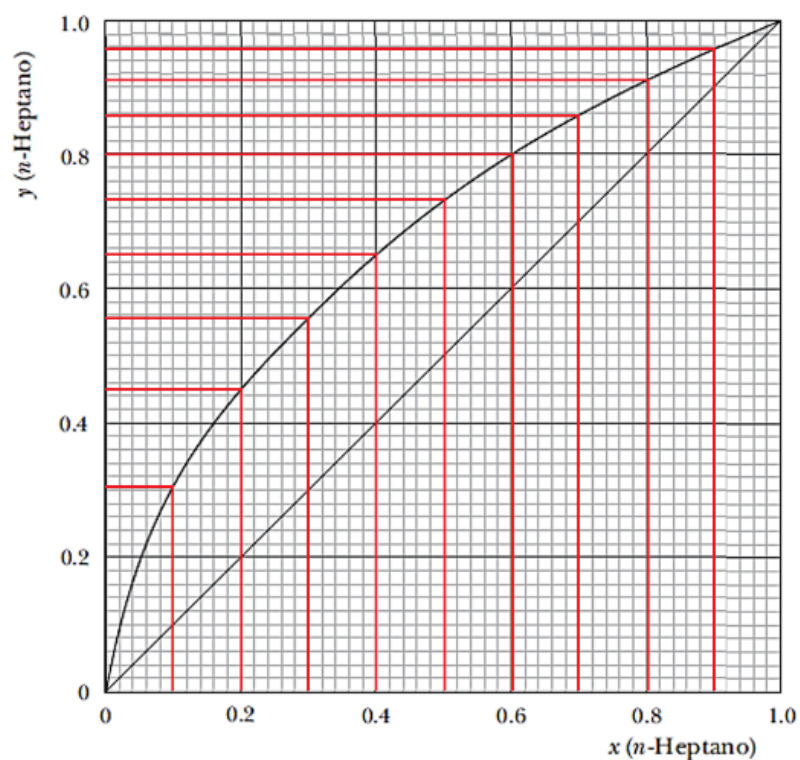
Para o sistema definido tem-se 10 estágios (9 pratos + condensador) com  $X_{i,final} = 0,042$ .

### 3.4. Cálculo da eficiência e do número de estágios reais

Para o projeto da coluna, considerou-se a volatilidade relativa do sistema n-heptano-etilbenzeno como constante. O valor foi obtido utilizando os dados de equilíbrio da Tabela, calculando as constantes de equilíbrio e as volatilidades relativas ponto a ponto e, por fim, calculando a volatilidade relativa média.

Figura 3 - Dados de Equilíbrio do Sistema n-heptano-etilbenzeno a 1 atm (% molar)

Figura 5 - Gráfico de equilíbrio binário do dos componentes



As constantes de equilíbrio e volatilidades relativas do sistema n-heptano etilbenzeno, calculados ponto a ponto para diferentes composições molares encontram-se na imagem abaixo. Calculando a média das volatilidades relativas obteve-se  $\alpha = 2,96$ .

Figura 4 - Constantes de equilíbrio e volatilidades relativas do sistema n-heptano etilbenzeno

X C7H16	Y C7H16	K1	X C8H10	Y C8H10	K2	$\alpha$
0,00	0,000		1,00	1,00	1,00	
0,10	0,313	3,13	0,90	0,69	0,76	4,10
0,20	0,450	2,25	0,80	0,55	0,69	3,27
0,30	0,579	1,93	0,70	0,42	0,60	3,21
0,40	0,657	1,64	0,60	0,34	0,57	2,87
0,50	0,730	1,46	0,50	0,27	0,54	2,70
0,60	0,800	1,33	0,40	0,20	0,50	2,67
0,70	0,860	1,23	0,30	0,14	0,47	2,63
0,80	0,910	1,14	0,20	0,09	0,45	2,53
0,90	0,960	1,07	0,10	0,04	0,40	2,67
1,00	1,000	1,00	0,00	0,00		

Para o cálculo do número de estágios reais, utilizou-se o modelo de eficiência de O'Connell. O valor da volatilidade relativa foi obtido previamente. O valor da viscosidade da



alimentação foi obtido considerando-se regra de mistura, ponderando os valores dos componentes individuais pelas suas frações molares. Os valores das viscosidades de n-heptano e etilbenzeno foram consultados por meio da plataforma do NIST para a viscosidade dinâmica do n-heptano a plataforma Engineering ToolBox - Resources, Tools and Basic Information for Engineering and Design of Technical Applications . Obtivemos os dados:

Figura 3 - Viscosidade dos componentes da carga a 20°C (Modelo de Eficiência O'Connel)

$\mu_{C7H16}$ (cP)	0,007
$\mu_{C8H10}$ (cP)	0,652
$\mu_{mix}$ (cP)	0,394

$$\eta_G(\%) = 49,2(\alpha\mu_F)^{-0,245}$$

$\eta_G(\%)$  47

A eficiência aumenta à medida que a viscosidade do líquido e a volatilidade relativa diminuem. Isso ocorre porque viscosidades mais baixas resultam em maiores difusividades do líquido e melhores coeficientes de transferência de massa. Por outro lado, um aumento na pressão dentro da coluna eleva a temperatura de ebulição, reduzindo a viscosidade e, consequentemente, aumentando a eficiência da coluna.

Portanto, a baixa eficiência observada no sistema pode ser explicada pelos altos valores de volatilidade relativa e viscosidade do líquido, que resultam em menor difusividade e transferência de massa. Além disso, o método de O'Connell não leva em consideração as características específicas do prato e da coluna, considerando apenas duas propriedades físicas (viscosidade e volatilidade relativa), o que compromete sua precisão.

Sendo a eficiência dada por:  $\eta_G = \frac{N_{Teórico}}{N_{Real}}$

Com estes dados, utilizando-se o valor da eficiência, obtendo-se aproximadamente 47% e, com o valor da eficiência, calculou-se o número de estágios reais, obtendo-se um total de 21 estágios.

### 3.5. Especificações para o projeto de trocadores de calor

Figura 6 - Gráfico de entalpia dos componentes

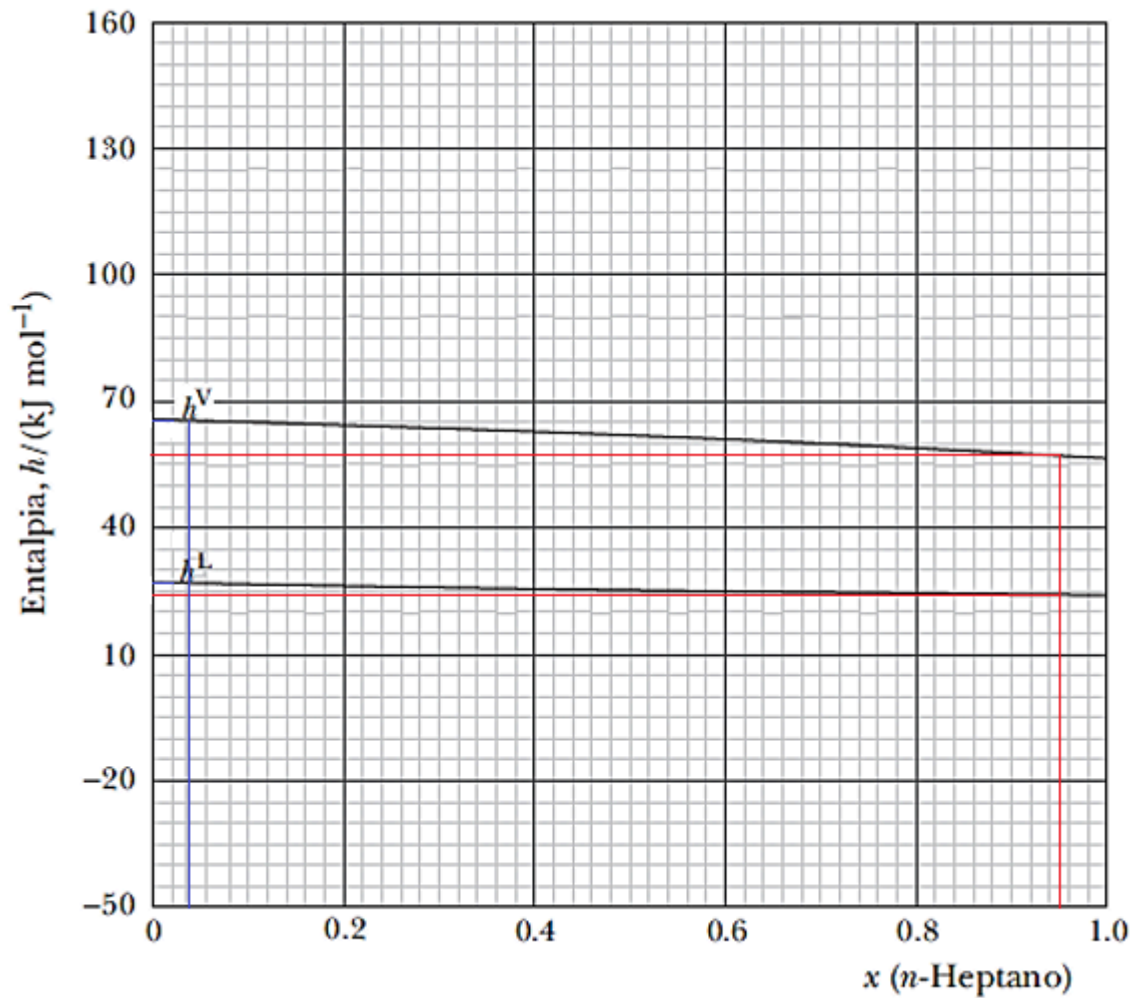


Figura 4: Diagrama de entalpia do sistema n-heptano-etilbenzeno (para pressão atmosférica).

De acordo com as marcações feitas nos gráficos, os seguintes valores foram encontrados:

Para  $x_B = 0,042$ ,  $h^L = 27 \text{ kJ/mol}$ ,  $h^V = 65 \text{ kJ/mol}$

Para  $x_D = 0,95$ ,  $h^L = 24 \text{ kJ/mol}$ ,  $h^V = 58 \text{ kJ/mol}$

Considerando os valores de entalpia descritos acima, foram calculados os custos energéticos dos trocadores de calor, sendo este a diferença entre as entalpias:

- Custo energético (Condensador) =  $(24-58) \text{ kJ/mol} = -34 \text{ kJ/mol}$
- Custo energético (Refrervedor) =  $(65-27) \text{ kJ/mol} = 38 \text{ kJ/mol}$

#### **4. Material complementar**

Para esse projeto foi desenvolvido um “analisador” para uma coluna de destilação binária na linguagem de programação Python. Tal programa foi usado para os cálculos de balanço de massa, razão de refluxo e retas de operação. Já para os tópicos de eficiência, número de estágios reais e o projeto do trocador de calor foi desenvolvido usando uma tabela em excel. Ambos estão disponíveis no seguinte [link](#). O arquivo excel está na raiz do repositório, seu nome é “G2\_Grupo10\_Coluna\_Trocadores.xlsx”. Já o arquivo python utilizado está localizado em “src\\back-end\\binary\_distillation\\SolucaoG10.py” (a função primária do código desenvolvido será demonstrada na apresentação do projeto).

- Link repositório: <https://github.com/Still-Here-0/Industrial-equipments-analysis>

#### **5. Referências bibliográficas**

- YOUNG, I. A. O. Notas de aula “EQE-482 - Operações Unitárias II”, 2024.
- AZEVEDO, E.; ALVES, A. Engenharia de Processos de Separação. IST press. 4 ed. 2021.