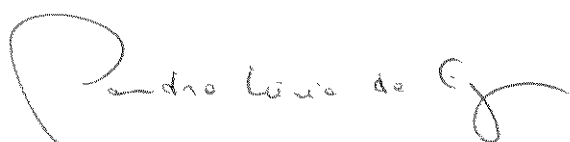


Tese defendida e aprovada, em 09 de setembro de 1993,
pela banca examinadora constituída pelos professores :



Prof.^a Dr.^a Sandra Lúcia da Cruz

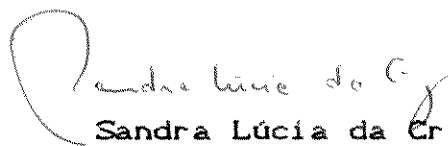


Prof.^a Dr.^a Teresa Massako Kakuta Ravagnani



Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

Esta versão corresponde a redação final da Tese de Mestrado defendida pela Eng^a Ana Bernadete Brasil, e aprovada pela Comissão Julgadora em 09/09/1993.


Sandra Lúcia da Cruz

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO : SISTEMAS DE
PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

**ANÁLISE DE PARÂMETROS OPERACIONAIS PARA O PROJETO ÓTIMO
DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE EM BATELADA**

POR : Ana Bernadete [Brasil 736

ORIENTADORA : Prof.^a Dra. Sandra Lúcia da [Cruz t

Tese submetida à Comissão de Pós-Graduação da
Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP como parte
dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de
Mestre em Engenharia Química.

Agosto/1993
Campinas - SP

UNIDADE	BC
RECEBIDA:	
	B 736a
Ex.	
	19.939
	261/93
	☒
	CR\$ 800,00
	28/10/93
Nº 010	

CM-00047577-0

FICHA CATALOGRAFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA CENTRAL - UNICAMP

Brasil, Ana Bernadete

B736a Analise de parametros operacionais para o projeto otimo de
uma coluna de destilacao multicomponente em batelada / Ana
Bernadete Brasil. -- Campinas, SP : [s.n.], 1993.

Orientador : Sandra Lucia da Cruz.

Dissertacao (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas,
Faculdade de Engenharia Quimica.

1. Destilacao em batelada. I. Cruz, Sandra Lucia da.
II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia
Quimica. III. Titulo.

20. CDD -660.284 25

Indice para Catalogo Sistemático:

1. Destilacao em batelada 660.284 25

Aos meus pais,
Luis e Zulmira,
pelo imenso apoio
que sempre me deram

AGRADECIMENTOS

A Prof.^a. Dra. Sandra Lúcia da Cruz pela orientação dada na elaboração deste trabalho e por toda atenção prestada

Ao Paulo Ludwig Strehl pela compreensão e apoio

A Lázara Lane Oliveira e José Antonio Duarte Reis pela amizade e pelo constante incentivo ao longo deste trabalho

Ao amigo Samuel Luperini pelo auxílio nas questões computacionais e pelas sugestões

A minha irmã, Lia M. Brasil, pela colaboração em todos os momentos do desenvolvimento do trabalho

Aos colegas e funcionários da FEQ (Faculdade de Engenharia Química) que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho

Ao DESQ (Departamento de Engenharia de Sistemas Químicos) pelo apoio material e por todos recursos que permitiram a elaboração deste trabalho

A CAPES pela concessão de bolsa de estudos que permitiu a concretização deste trabalho.

ABSTRACT

Batch distillation is a method commonly used in the separation and purification of small-volume, high-value chemical specialties. The outstanding advantage of the batch process is that a single column may separate an N -component mixture into its pure components as the continuous process would require $N-1$ columns to carry out the same separation.

The batch process is characterized by the unsteady state conditions. The compositions and flowrates in the column change as the distillation proceeds. Therefore, a detailed analysis of parameters as number of trays, size and composition of initial charge to the reboiler and reflux ratio becomes necessary for the design and operation of batch columns.

In this thesis a theoretical study of the effects of operational parameters on the performance of a batch distillation column separating a multicomponent mixture has been reported. It was concluded that an optimum reflux ratio must be found for a given combination of number of trays and size of initial charge. The column capacity increased as the composition of the initial charge and the number of trays increased.

RESUMO

Destilação em batelada é uma técnica comumente utilizada na separação e purificação de pequenos volumes de produtos químicos, de alto valor unitário. Como grande vantagem destaca-se o fato de que uma única coluna em batelada pode separar uma mistura de N componentes em seus componentes puros, enquanto que um sistema de destilação contínuo iria requerer $N-1$ colunas para realizar a mesma separação. O processo em batelada caracteriza-se pelas condições em estado não estacionário. Isto significa que as composições e vazões na coluna são funções do tempo de destilação. Deste modo, uma análise detalhada de parâmetros como número de pratos, quantidade e composição da carga inicial de líquido, razão de refluxo, torna-se necessária para o projeto e operação de colunas em batelada.

Na presente tese estudamos teoricamente, o efeito destes parâmetros operacionais sobre o desempenho de uma coluna de destilação em batelada na separação de uma mistura multicomponente. Concluimos que existe uma razão de refluxo ótima para uma dada combinação de número de pratos e carga inicial de líquido. A capacidade da coluna aumentou com o aumento da composição da carga e do número de pratos da coluna.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1	- Introdução	1
CAPÍTULO 2	- Revisão Bibliográfica	17
CAPÍTULO 3	- Modelagem e simulação de uma coluna de destilação em batelada	
3.1	- Introdução	27
3.2	- Descrição da estratégia de operação da coluna em batelada	27
3.3	- Modelo Matemático	30
3.3.1	- Balanços Materiais	32
3.3.2	- Relação de Equilíbrio de Fases	35
3.4	- Cálculo das propriedades	37
3.4.1	- Pressão de vapor	37
3.4.2	- Volatilidade relativa	42
3.5	- Conclusão	44
CAPÍTULO 4	- Resultados e análise	
4.1	- Introdução	46
4.2	- Efeito da Carga Líquida	54
4.3	- Efeito do Número de Pratos	58
4.4	- Efeito da Razão de Refluxo	61
4.5	- Efeito da Volatilidade Relativa	67
CAPÍTULO 5	- Conclusões	72
Apêndice 1.0		76
Referências Bibliográficas		96
Nomenclatura		101

Introdução

Destilação é o método mais usado na Indústria Química para a separação dos constituintes de uma mistura líquida. O método baseia-se na diferença entre as volatilidades dos componentes da mistura. A separação é realizada através da vaporização parcial da mistura e subsequente recuperação do vapor e do resíduo líquido.

A separação por destilação é realizada em equipamentos como colunas de pratos ou recheios, cujo objetivo principal é proporcionar o contato íntimo entre o líquido e o vapor de modo a permitir a transferência de massa entre as fases.

O processo de destilação pode ser realizado de forma contínua ou em batelada. No primeiro caso, a alimentação da mistura a ser separada, assim como a remoção dos produtos destilados da coluna é feita de maneira contínua. Passado o estado transiente no início da operação da coluna, tanto as vazões das correntes líquida e vapor relacionadas com o processo, assim como as composições destas correntes permanecem inalteradas com o tempo. A destilação contínua é usualmente empregada quando grandes quantidades da mistura a ser separada estão disponíveis a uma taxa e composição razoavelmente uniformes.

Na destilação em batelada uma carga líquida da mistura a ser separada é adicionada à coluna e a seguir é continuamente vaporizada. O vapor produzido é removido da coluna, condensado e armazenado em reservatórios. Ao longo da destilação a mistura líquida original vai sendo consumida e as composições ao longo da coluna vão mudando continuamente.

O processo em batelada requer consideravelmente mais

trabalho e atenção do que o processo contínuo. Em geral é necessário parar, drenar e limpar a coluna cada vez que uma nova carga deve ser destilada, o que pode resultar num aumento substancial do tempo total do processo. Deste modo a destilação em batelada é normalmente utilizada quando um produto deve ser manufaturado somente em determinados períodos e onde um número de misturas diferentes devem ser separadas em diferentes períodos pela mesma coluna.

Em muitas plantas químicas as colunas de destilação em batelada são importantes partes destes processos, realizando separações e purificações de pequenos volumes de especialidades químicas de alto valor unitário.

Como grande vantagem do processo descontínuo, destaca-se o fato de que uma única coluna em batelada pode separar uma mistura de " N " componentes em seus componentes puros, enquanto em um processo contínuo seriam necessárias " N-1 " colunas para realizar a mesma separação. Uma simples coluna pode processar uma grande faixa de composições de alimentação, um número variado de componentes e diferentes graus de dificuldade de separação.

A preferência por processos descontínuos está baseada em aspectos econômicos, uma vez que é necessário menos capital para o investimento inicial, e também na maior flexibilidade alcançada na operação deste processo. Em muitas situações onde a composição da alimentação pode mudar frequentemente ou quando diferentes quantidades da carga inicial devem ser processadas, a versatilidade de uma unidade de destilação em batelada é

excelente.

Um sistema de destilação em batelada consiste basicamente de: retervedor, coluna de retificação, condensador e de reservatórios para a coleta de destilados.

Em operação a carga líquida a ser separada é adicionada ao retervedor e fracionada sob taxa de vaporização e refluxo controlados, com várias frações de destilado sendo coletadas em diferentes reservatórios no decorrer da destilação. Desde que não exista alimentação contínua para a coluna, a quantidade e a composição da carga líquida no retervedor, assim como a composição do destilado diminuem à medida que a destilação progride.

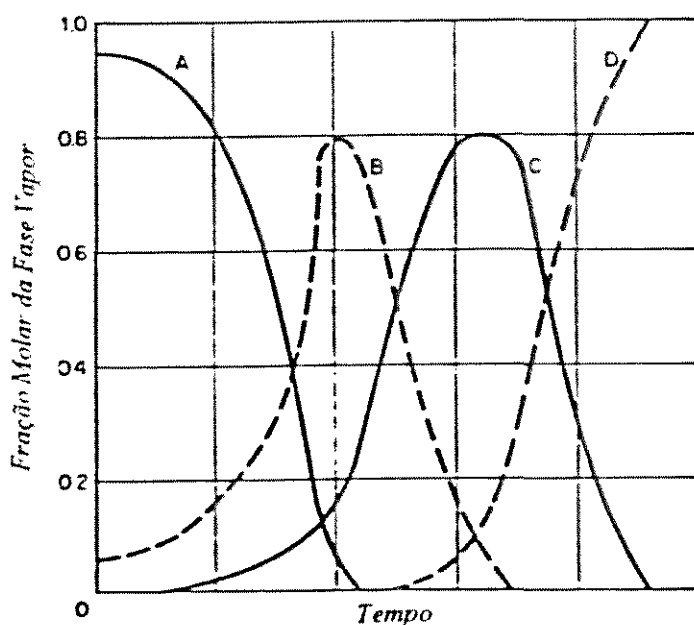


Figura 1.1 - Composição do destilado na destilação em batelada de um sistema quartenário

A Figura 1.1 mostra a variação da composição do produto destilado durante a destilação, sob refluxo constante, de uma mistura com quatro componentes. A forma das curvas na Figura 1.1 depende da volatilidade dos componentes, da razão de refluxo e do número de estágios na coluna.

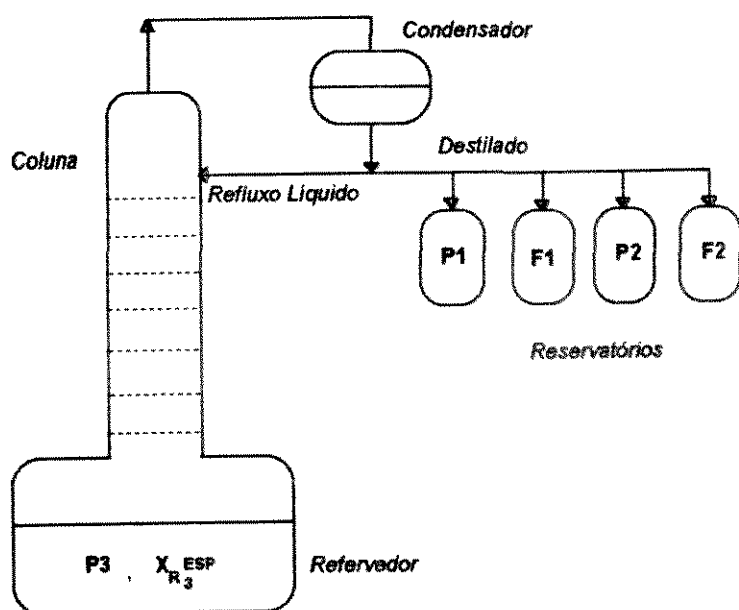


Figura 1.2 - Esquema de uma coluna de destilação em batelada para um sistema ternário

A Figura 1.2 mostra o esquema de uma coluna de destilação em batelada para o caso da separação de um sistema ternário, obtendo-se três produtos P_1 , P_2 e P_3 com composições especificadas $X_{D_1}^{ESP}$, $X_{D_2}^{ESP}$ e $X_{R_3}^{ESP}$, respectivamente.

No início da destilação a corrente do destilado é composta basicamente do produto mais volátil P_1 , coletado em um

reservatório de produto até que a composição média do componente no tanque atinja o nível de pureza especificado $X_{D_1}^{ESP}$. Neste instante a corrente de destilado é desviada para um segundo tanque, iniciando-se a coleta da primeira fração intermediária, F_1 . A fração intermediária F_1 constituirá de um material cuja composição não satisfaz nem a composição desejada para o primeiro produto, P_1 , nem aquela especificada para o segundo produto mais volátil P_2 . Quando a concentração do segundo componente mais volátil no destilado atingir o valor especificado $X_{D_2}^{ESP}$, o destilado é desviado para um terceiro tanque no qual o produto P_2 passa a ser coletado. Após a retirada do produto P_2 uma segunda fração intermediária pode ser coletada até que o líquido restante no refeedor atinja a especificação desejada para o produto P_3 .

Na destilação de sistemas binários, em geral, se obtém dois produtos e uma fração intermediária, enquanto na destilação de um sistema ternário pode-se obter uma ou duas frações intermediárias e três produtos. Em geral, para sistemas com " N " componentes pode-se obter " N " produtos e " N - 1 " frações intermediárias.

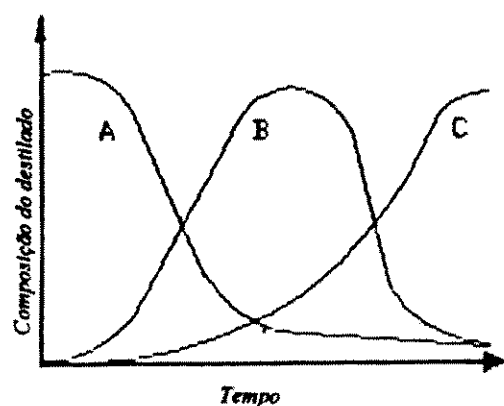
Uma coluna de destilação em batelada pode ser operada por diferentes maneiras :

(a) REFLUXO CONSTANTE : Neste caso a razão de refluxo é mantida constante durante a destilação. Uma vez que a composição do refeedor se modifica com o tempo, a composição do destilado também varia ao longo da destilação, sendo mais rica no componente mais volátil no início do que no final da coleta de

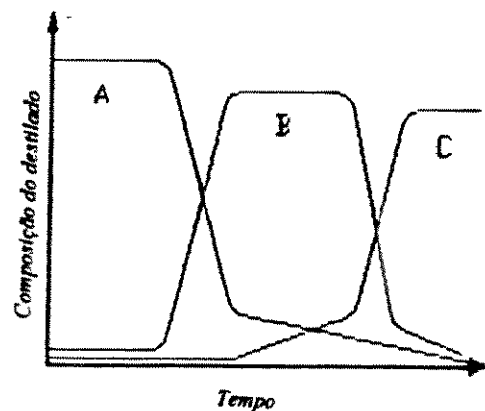
uma dada fração. (Fig. 1.3a)

(b) COMPOSIÇÃO DO DESTILADO CONSTANTE : Este modo de operação requer um aumento contínuo da razão de refluxo durante a destilação para manter a qualidade do produto (Fig. 1.3b). Quando a razão de refluxo torna-se muito alta (praticamente refluxo total) a coleta da fração é interrompida, e o refluxo é reduzido para a coleta da próxima fração. Este modo de operação requer ajuste automático do refluxo, de uma maneira pré-determinada e pré-programada.

(c) OUTROS MODOS DE OPERAÇÃO : Um procedimento cíclico pode ser usado para estabelecer a operação da coluna. A unidade opera a refluxo constante até chegar ao equilíbrio. O destilado é então retirado como a totalidade da corrente de topo, durante um curto período de tempo. Após este período a coluna é novamente operada a refluxo total. O ciclo é repetido ao longo da destilação. Outra possibilidade é de otimizar a taxa de refluxo para alcançar a separação desejada num tempo mínimo.



(a) Refluxo constante



(b) Refluxo Variável

Figura 1.3 - Modos de operação de uma coluna de destilação em batelada

As frações intermediárias recolhidas ao longo da destilação em batelada podem retornar ao processo de diferentes maneiras. Verifica-se então, a necessidade de escolha de uma estratégia de operação a fim de alcançar uma melhor separação.

Entre as estratégias de operação conhecidas, a mais utilizada é o reciclo total das frações intermediárias. Nesta estratégia, todas as frações intermediárias armazenadas das bateladas anteriores são adicionadas à nova carga a ser destilada. A Figura 1.4 mostra um esquema desta estratégia, para o caso de um sistema ternário.

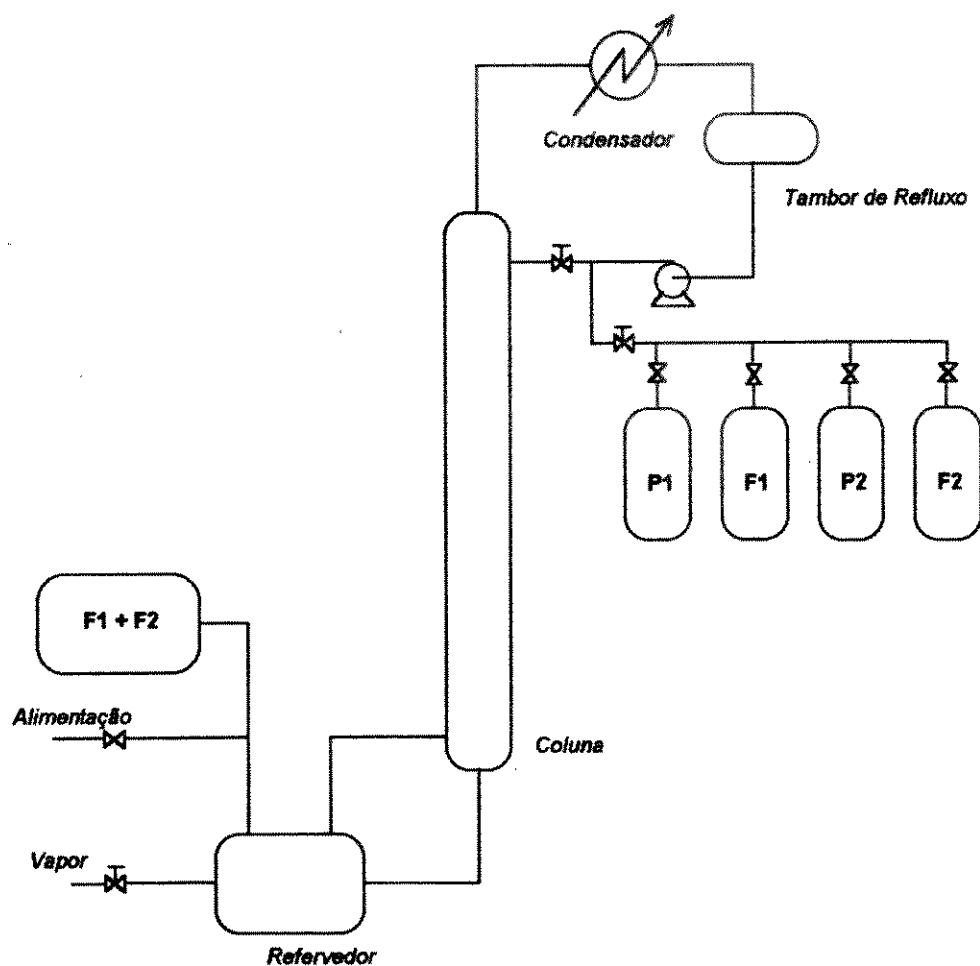


Figura 1.4 - Esquema do reciclo total das frações intermediárias

Uma segunda estratégia utilizada é a destilação multicomponente - binária. Neste caso, um número de frações intermediárias, obtidas na destilação de uma carga original, são estocadas em tanques separados até que a quantidade de material acumulado seja suficiente para destilar em separado as frações estocadas (destilação binária).

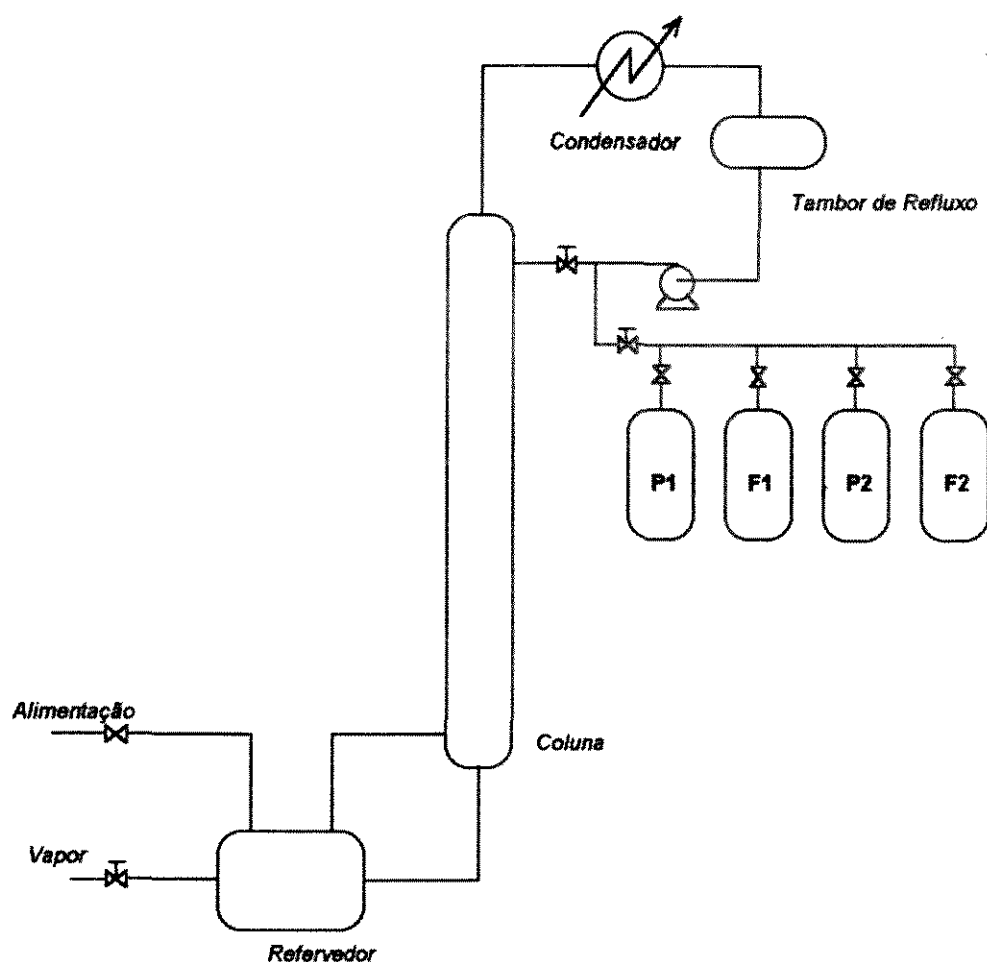


Figura 1.5 - Destilação em batelada multicomponente - binária

As Figuras 1.5, 1.6 e 1.7 mostram um exemplo do uso

desta estratégia, onde as frações intermediárias (F_1 e F_2) obtidas na destilação da carga original (Fig. 1.5) são destilados separadamente sendo que as frações intermediárias obtidas nestas destilações binárias são recicladas para a próxima batelada de fração acumulada (Figura 1.6 e 1.7).

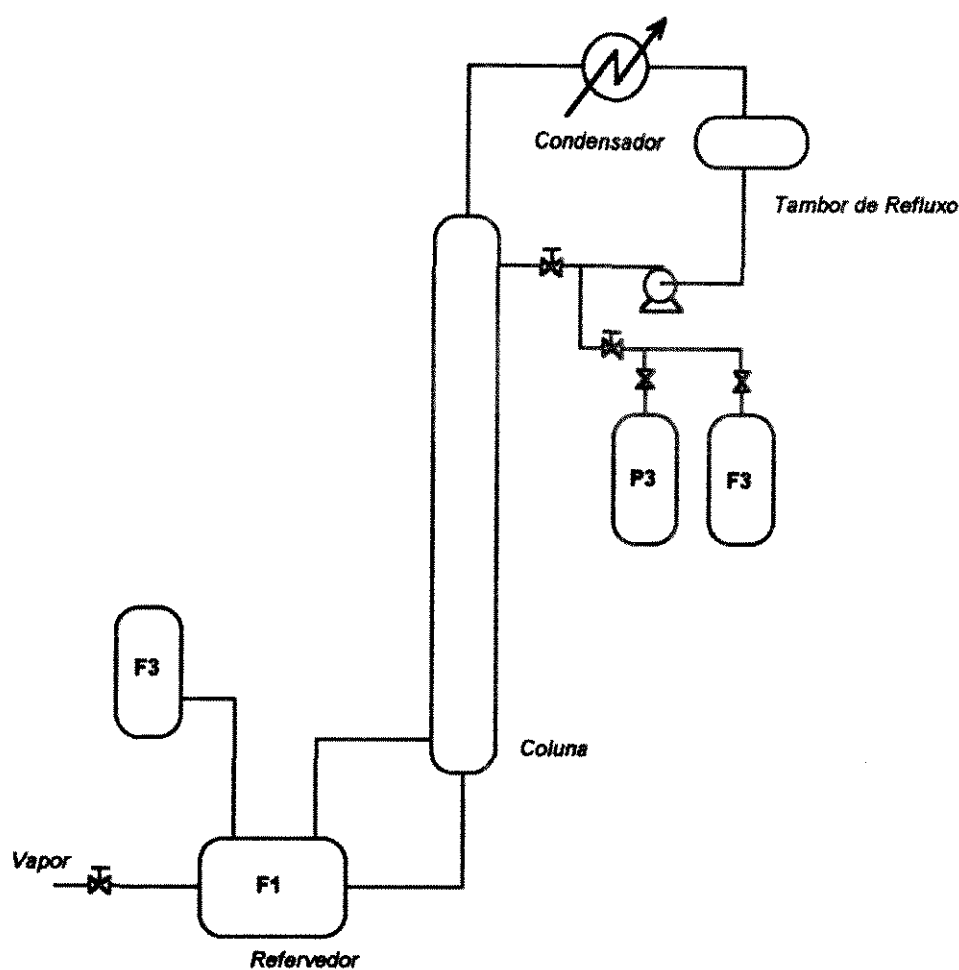


Figura 1.6 - Destilação da 1ª fração Intermediária

Pode-se optar por uma terceira estratégia: Destilação em batelada com alimentação (Fig. 1.8). O reservador é

carregado com a alimentação inicial, sendo as frações intermediárias introduzidas na coluna em um tempo apropriado durante a próxima batelada. O objetivo desta estratégia é introduzir as frações em pontos onde as composições são semelhantes. Desta forma, evita-se misturar materiais de composições muito diferentes. Para um melhor rendimento do processo torna-se necessário otimizar algumas variáveis, como o prato de alimentação e o tempo para começar tal alimentação.

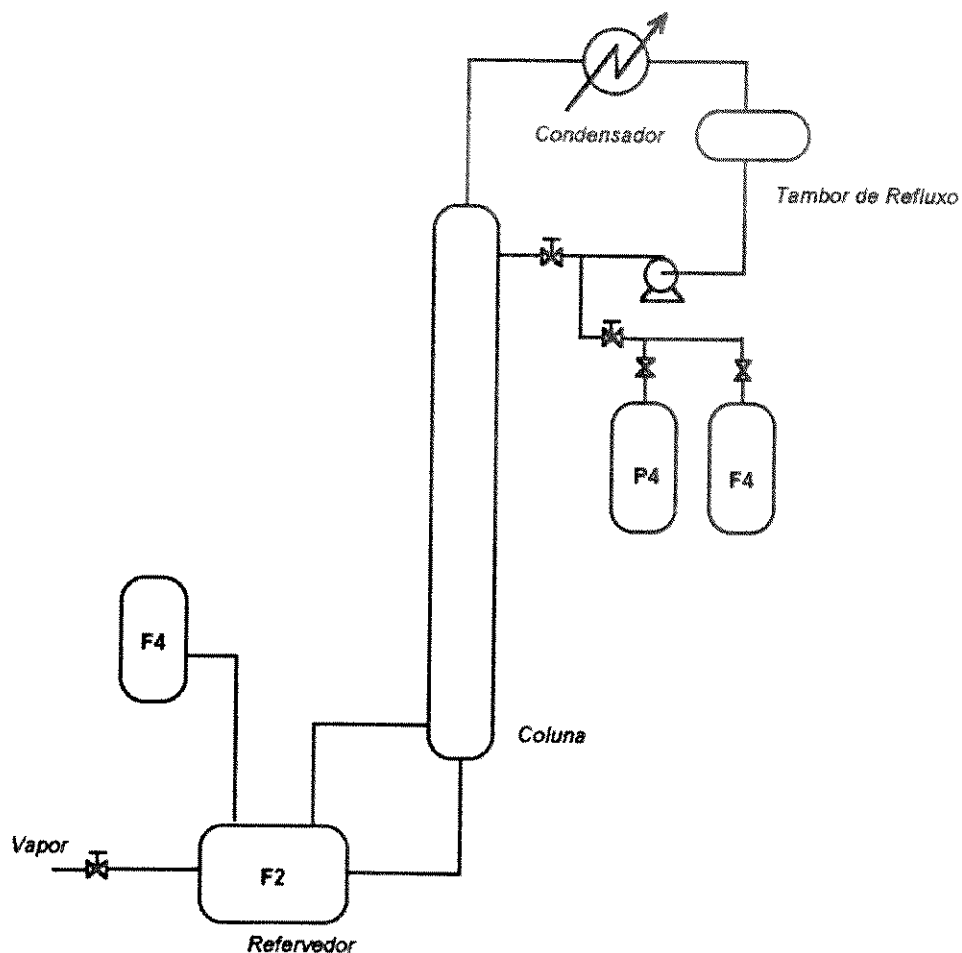


Figura 1.7 - Destilação da 2ª Fração Intermediária

Outra opção é a estratégia da carga inicial segregada (Fig. 1.8). No caso de se trabalhar com um sistema ternário, a segunda fração intermediária é introduzida na coluna, enquanto a primeira fração é usada para preencher o condensador. O objetivo deste esquema é ter no condensador e na coluna o componente mais volátil.

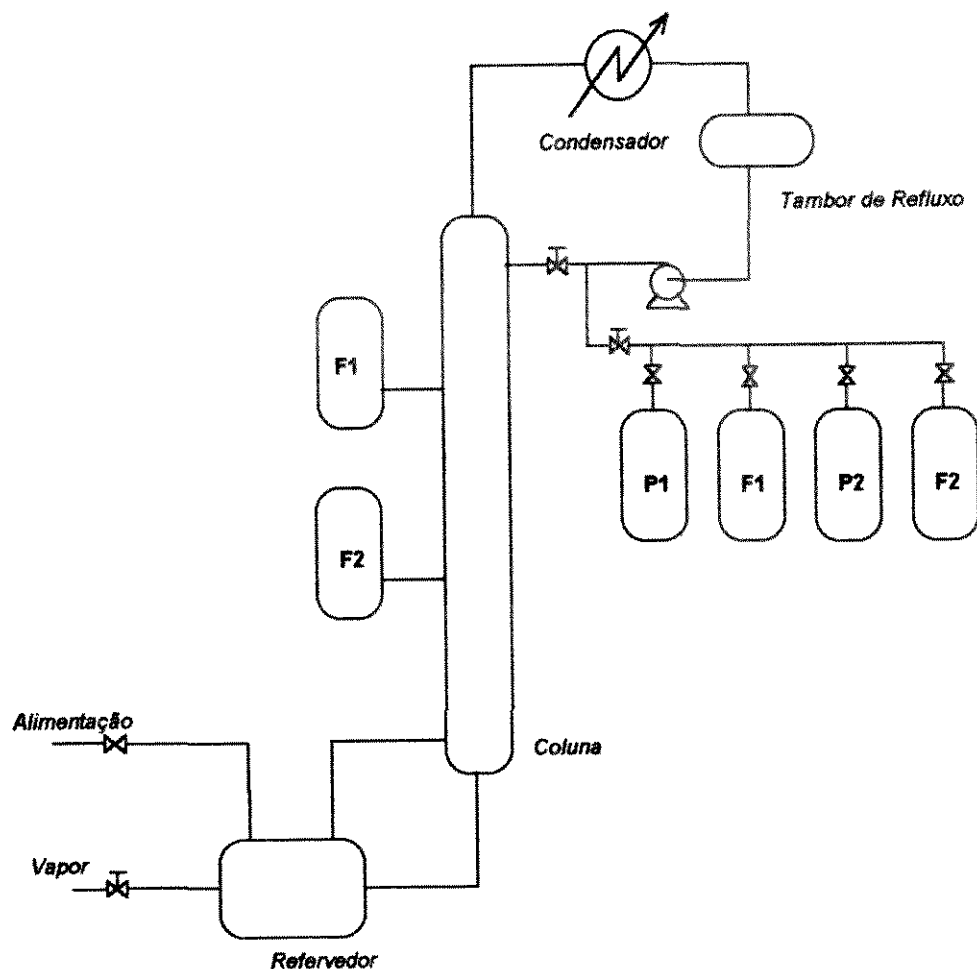


Figura 1.8 - Destilação em batelada com alimentação

De todas as estratégias mencionadas anteriormente, aquela que utiliza o reciclo de todas frações intermediárias,

embora não seja a mais eficiente, é a mais simples e a mais utilizada na prática.

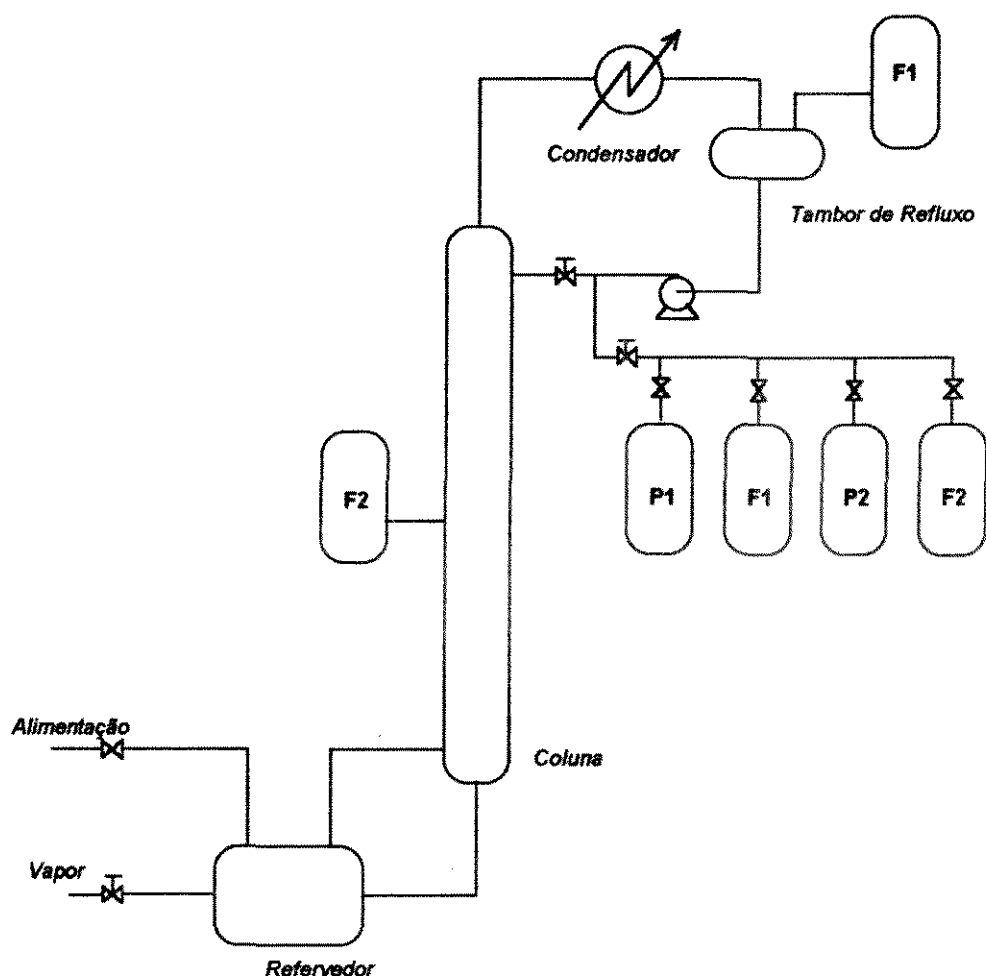


Figura 1.9 - Carga inicial Segregada

Durante a destilação em batelada uma certa porção da carga líquida permanece acumulada na unidade, na forma de refluxo, vapor ascendente, líquido nos pratos ou recheio, no condensador e nas tubulações. Na destilação contínua, este acúmulo se faz sentir somente na partida e na parada da coluna ou em caso de grande mudanças nas condições operacionais. Na

destilação em batelada, no entanto, pode influenciar apreciavelmente no grau de separação e este efeito pode ser prejudicial ou benéfico, dependendo do acúmulo e das condições de operação.

Quando a quantidade de material acumulado dentro da coluna não é desprezável comparada com a carga líquida no retervedor, a composição do destilado, sob refluxo constante, varia com o tempo de maneira diferente daquela quando o acúmulo não é grande. Isto ocorre por causa de dois efeitos opostos:

1 - O primeiro efeito é causado pela concentração do componente mais volátil nas partes superiores da coluna devido ao acúmulo de material, reduzindo a percentagem de componente mais volátil no retervedor e no vapor saindo do retervedor. Este efeito ocorre particularmente a altas razões de refluxo, quando a concentração do componente mais volátil no retervedor é baixa, em comparação com aquela no material acumulado. O resultado é a redução na concentração do componente leve no produto destilado, quando comparada com aquela na ausência de acúmulo.

2 - O segundo efeito é um "efeito de inércia" exercido pelo material acumulado, que impede a rápida mudança nas composições, aumentando o grau de separação em relação àquele na ausência de acúmulo. Este efeito é notado a baixas razões de refluxo e grande acúmulo de material.

Como os dois efeitos ocorrem simultaneamente e mudam de importância durante o curso da destilação, é difícil prever se o efeito do acúmulo será prejudicial ou benéfico. É também difícil prever a grandeza do efeito de retenção.

OBJETIVOS DO TRABALHO

O processo de destilação em batelada é caracterizado pela condição de estado não-estacionário. Por exemplo, a composição do produto coletado no topo da coluna varia ao longo do tempo (Fig.1.1), ao contrário de uma coluna contínua que apenas obtém um destilado de composição constante e com grande pureza no componente mais volátil (Fig. 1.10) .

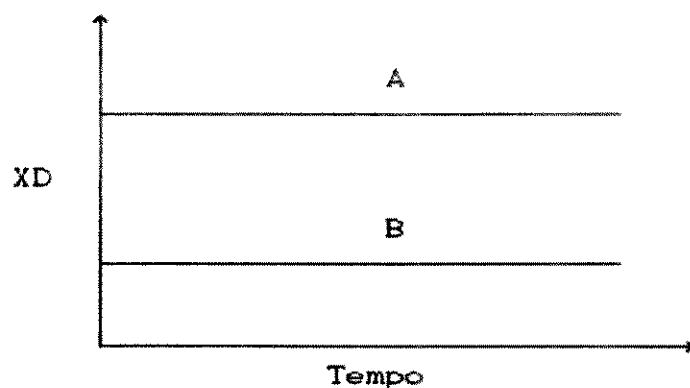


Figura 1.10 - Perfil da composição do destilado durante a destilação contínua de um sistema binário

O processo de destilação em batelada caracteriza-se também por um grande número de parâmetros operacionais como número de pratos, tamanho da carga inicial, e razão de refluxo, que devem ser otimizados para a o projeto e operação da coluna. Existe também a necessidade do desenvolvimento de estratégias que otimizem a operação de destilação em batelada multicomponente.

O presente trabalho tem como objetivo analisar os

parâmetros operacionais como número de pratos, quantidade da carga inicial, razão de refluxo, volatilidade relativa e pureza dos produtos sobre o desempenho das colunas de destilação em batelada multicomponente utilizando simulação digital.

A simulação de equipamentos ou de processos químicos é de grande importância no projeto e controle dos mesmos. Pelo uso de um modelo computacional é possível prever as condições de operação mais econômicas para o processo bem como determinar os valores limites de vários parâmetros.

Será apresentado os resultados das várias simulações do processo de destilação em batelada e também a análise dos resultados obtidos. O programa foi desenvolvido para sistemas multicomponentes e um número variável de pratos. Para a execução é necessário que a composição e tamanho da mistura a ser destilada, taxa de refluxo, as especificações dos produtos, o passo de integração, acúmulo molar de líquido nos pratos e no condensador sejam definidas na entrada de dados.

Revisão Bibliográfica

O crescimento significativo da química fina, a necessidade de recuperação de materiais a partir de rejeitos de produtos e o grande desenvolvimento de métodos computacionais no controle de processos tem renovado o interesse pelo processo de destilação em batelada.

Muitos dos trabalhos sobre destilação em batelada tem sido limitados a sistemas binários. Treybal [1], Coates e Pressburg [2], Benjamin Block [3], Guy [4], todos consideraram sistemas binários. Grande parte destes trabalhos não consideraram quantidade de líquido retida nos pratos e outros trabalhos preliminares foram realizados para determinar uma estratégia ótima de operação para colunas de destilação em batelada.

Bauerle e Sandall [5] derivaram equações analíticas para o projeto de colunas de destilação em batelada, operando sob razão de refluxo mínima. As equações se limitaram a sistemas binários e foram obtidas para os dois modos de operação mais comuns: taxa de refluxo fixa e composição do destilado constante. Na dedução das equações a quantidade de líquido retida nos pratos e no condensador foi desprezada em comparação com a carga no refeedor.

Luyben [6] mostrou que o processo de destilação em batelada para sistemas binários pode ser significativamente afetado pelos parâmetros operacionais tais como quantidade de líquido retida nos pratos e no condensador, e número de pratos. Luyben propôs um método para o projeto de colunas de destilação em batelada utilizando do conceito do fator capacitador (CAP). Este foi definido como a quantidade total de produtos produzidas

por unidade de tempo. Um período de 30 minutos foi assumido para esvaziar e recarregar o reservador, então o tempo total de batelada foi considerado como $t_f + 0.5$ h. O tempo total de batelada inclui o tempo a refluxo total e o período necessário para produzir os produtos e as frações intermediárias. Este conceito foi empregado para comparar formas alternativas de operação.

$$CAP = \frac{\sum_{j=1}^{nc} P_j}{t_f + 0.5}$$

Mais tarde Luyben [7] estendeu o conceito de fator capacitor para separação de sistemas ternários. A estratégia de operação utilizada foi o reciclo de todas frações intermediárias para a próxima carga no reservador. O efeito dos parâmetros operacionais foi explorado através de simulações. O conceito do fator capacitor foi utilizado para determinar o número ótimo de estágios e a taxa de refluxo ótima. Os resultados mostraram pequenas diferenças entre as duas políticas adotadas taxa de refluxo fixa e variável.

Meadows [8] apresentou um modelo para destilação em batelada multicomponente que utiliza balanço de massa e calor bem como balanço de volume para um dado estágio da coluna. Algumas considerações foram feitas como pratos ideais, acúmulo molar de líquido constante nos pratos e operação adiabática. O modelo foi testado para a destilação em batelada de um sistema com quatro componentes numa coluna com cinco pratos e percentagem total de holdup.

Distefano [9] realizou um estudo detalhado dos vários métodos numéricos de integração das equações diferenciais que descrevem o processo de destilação em batelada multicomponente. O modelo utilizado por Distefano inclui balanço de energia e massa e é limitado pelas mesmas considerações mencionadas por Meadows [8]. Embora resultados teóricos foram obtidos para o problema exemplo, nenhuma verificação experimental do modelo matemático foi realizada. Os programas desenvolvidos por Meadows [8] e Distefano [9] exigem operações demoradas em computadores de grande porte.

Stewart [10] realizou um estudo experimental e teórico, o qual tinha por objetivo determinar o efeito de três importantes parâmetros: taxa de refluxo, percentagem total de refluxo e número de pratos, sobre o grau de separação obtido em destilação em batelada multicomponente. Para a execução deste estudo Stewart definiu, de maneira quantitativa, uma medida do grau de separação. A variável escolhida foi chamada de concentração média do produto (APC). Em termos de uma curva típica para destilação em batelada, na qual a fração molar do produto de topo para cada componente ($X_{0,i}$) foi representada em função da fração da carga inicial removida (Φ), o APC para o componente em particular foi definido como a fração molar do produto de topo para o componente medido sob uma faixa específica da fração da carga inicial removida. O modelo matemático empregado na simulação do processo foi o mesmo utilizado por Distefano [9], acrescido da suposição de pratos não ideais. A validade do modelo usado para descrever a separação de uma

mistura multicomponente em uma unidade de destilação em batelada foi comprovada através da boa concordância entre as curvas de destilação experimental e teórica e os valores da concentração média do produto.

Dois aspectos do processo de destilação em batelada tem recebido considerável atenção: a determinação de uma estratégia ótima para o refluxo líquido e a comparação entre o desempenho da coluna operando sob os modos de operação, taxa de refluxo constante e produto de topo constante.

Converse e Gross [11] definiram a política ótima de refluxo como sendo aquela sob a qual a máxima quantidade de destilado, de uma dada composição, é obtida em um tempo mínimo a partir de condições iniciais de composição e tamanho da carga conhecidas. Murty e Husain [12] empregaram o mesmo modelo e compararam a solução obtida por diferentes técnicas de otimização. No entanto, o trabalho de Murty e Husain ficou restrito a sistemas binários e colunas de destilação com um número muito pequeno de pratos.

Robinson [13-14] estudou o problema do tempo mínimo para sistemas binários e multicomponentes usando o modelo desenvolvido por Converse e Gross [11]. A política utilizada supôs quantidade de líquido retida negligenciável e nos cálculos foi usada taxa de refluxo constante, e produto de topo constante. Mayur e outros [15] estudaram o problema do tempo mínimo para uma operação quase-estacionária onde uma fração intermediária foi reciclada usando um procedimento sequencial. Kerkhof e Vissers [16] maximizaram uma função lucro ao invés de

maximizarem a produção final de destilado para um determinado tempo ou minimizarem este tempo para obtenção de determinada quantidade de destilado. Eles mostraram que separações com controle de refluxo ótimo produzem 5% a mais de destilado correspondendo a um lucro de 20 - 40% mais alto do que em cada política de controle : refluxo ou produto de topo constante.

A separação de misturas multicomponentes em colunas com pratos para muitas frações foi considerado por Mayur e Jackson [17]. Eles também investigaram o efeito de holdup no prato com política de refluxo ótimo através da solução de métodos apropriados. Para uma coluna com três pratos encontraram que, exceto para a condição inicial de refluxo total, a política de refluxo com nenhum holdup nos pratos foi próxima da política com holdup. Em contraste com os outros trabalhos, Egly e Seid [18] incluíram comportamento ideal de misturas multicomponentes e a possibilidade de reação na coluna. Eles transformaram o problema do tempo mínimo em um com tempo mínimo fixo e condições finais livres, o qual foi resolvido pelo uso do método modificado do gradiente.

Hansen e Jorgensen [19] demonstraram que técnicas de colocação ortogonal podem ser usadas para a solução do problema de controle do tempo ótimo de sistemas binários em colunas de destilação em batelada com pratos ou recheios quando o acúmulo molar de líquido no refeedor for dominante, ou seja acúmulo molar líquido nos pratos desprezível.

Rose e O'Brien [20] conduziram uma investigação de destilação multicomponente em batelada. O estudo informa sobre

resultados experimentais e teóricos com resultados obtidos a partir de uma coluna recheada. Weissberger [21] apresentou diagramas de destilação em batelada para sistemas ternários em uma coluna com 10 pratos ideais e com uma carga inicial igual a 100 moles. O modelo matemático em ambos estudos foi simplificado assumindo quantidade de líquido retida nos pratos constante.

A literatura existente tem tratado o problema da determinação da política ótima da taxa de refluxo para colunas de destilação em batelada com sistemas binários usando programação dinâmica. Estudos similares sobre sistemas multicomponentes, no entanto, são esporádicos na literatura corrente e tem sido limitados a três componentes. Procedimentos de otimização ainda não são avaliados para destilação multicomponente em batelada. Isto é devido a complexidade inerente do problema. Estudos recentes sobre vários sistemas multicomponentes ideais e seleção de sistemas binários não-ideais tem mostrado que o uso de métodos "Short-Cut", ao invés de técnicas rigorosas, para projetos preliminares dão resultados os quais não são apreciavelmente diferentes daqueles obtidos pelos métodos rigorosos especialmente para colunas com holdup nos pratos negligenciável. Esta aproximação tem sido estendida para a determinação da política da taxa de refluxo.

Uma dificuldade encontrada nos métodos de otimização, já discutida por outros autores, é o aumento do tempo computacional e o limite de memória devido ao aumento do número de equações ocasionado pelo aumento do número de componentes.

Então, visando solucionar os problemas citados anteriormente Diwekar e outros [22] sugeriram o uso de um modelo de ordem reduzida baseado na extensão do método "Short-Cut" normalmente utilizado para colunas contínuas. As aproximações feitas proporcionaram consideráveis reduções no tempo computacional sem muito comprometimento sobre a exatidão da solução.

Galindez e Fredenslund [23] propuseram um método para simulação rigorosa de um sistema com dez componentes em uma coluna de destilação batelada com trinta estágios e condensador total ou parcial. O estado não estacionário foi simulado como uma sucessão de um número finito de estados estacionários de curta duração. A solução para cada intervalo de tempo foi realizada usando um modelo matemático correspondente a destilação contínua. A temperatura e a concentração no final de uma operação foi utilizada como estado inicial da nova etapa. Durante cada etapa da operação as especificações da coluna foram mantidas constantes. Os dois modos de operação (taxa de refluxo constante e composição do destilado constante) foram considerados. Apesar da simulação de um comportamento dinâmico por sucessivos estados quase-estacionários parecer obsoleta, Galindez e Fredenslund conseguiram obter uma drástica redução no tempo de CPU sem sacrificar a exatidão.

Procurando também a simulação da operação de destilação em batelada Domenech e Enjalbert [24] desenvolveram um programa para sistemas multicomponentes, o qual pode ser usado para muitos casos (holdup negligenciável ou não, misturas complexas, refluxo variável ou constante) e inclui numerosas opções de entrada e

saída dos resultados.

Um simulador conhecido como "Batchfrac" para simular operações de uma coluna de destilação em batelada multiestágios foi desenvolvido por Boston e outros [25]. Este programa foi planejado para tratar uma grande variedade de especificações tipicamente encontradas nas operações de destilação em batelada. Neste trabalho, o acúmulo molar do vapor foi desconsiderado e os efeitos hidráulicos da coluna não foram considerados.

Poucos estudos foram realizados para verificar a influência dos parâmetros operacionais sobre a produtividade global. O problema torna-se mais complexo a medida que o número de componentes no sistema aumenta. Luyben e Quintero [26] exploraram formas alternativas de operação de colunas de destilação em batelada a fim de melhorar a taxa de produção. Foram estudadas seis diferentes estratégias com duas volatilidades relativas e diferentes especificações do produtos.

Luyben e Al-Tuwaim [27] desenvolveram um método para colunas de destilação em batelada para sistemas binários e ternários. O objetivo deste trabalho foi encontrar a taxa de refluxo ótimo, para certa separação considerando diferentes especificações dos produtos, pela maximização do fator capacitador. A limitação deste trabalho foi que o efeito da composição da alimentação não foi explorado.

Modelagem

3.1 - INTRODUÇÃO

No presente capítulo será apresentado o modelo matemático utilizado para representar uma coluna de destilação em batelada. O modelo será composto de balanços materiais e relações de equilíbrio do sistema a ser destilado. Estas equações serão utilizadas na simulação de destilações em batelada de uma mistura multicomponente, com a finalidade de analisar o efeito de parâmetros operacionais tais como número de pratos, tamanho da carga inicial de líquido, taxa de refluxo, volatilidade relativa e composição da alimentação, sobre a separação dos componentes da mistura.

3.2 - DESCRIÇÃO DA ESTRATÉGIA DE OPERAÇÃO DA COLUNA EM BATELADA

Neste trabalho, a simulação da destilação em batelada de uma mistura multicomponente foi realizada com base no procedimento descrito a seguir.

Considere a coluna de destilação em batelada mostrada na Figura 3.1. A coluna contém " n_p " pratos e será utilizada na separação de misturas líquidas contendo " n_c " componentes.

Inicialmente uma quantidade total M_{R_0} (Moles) do material líquido a ser separado é colocada no refeedor. Este material pode ser uma carga original ou uma mistura da carga original com frações intermediárias de destilações anteriores.

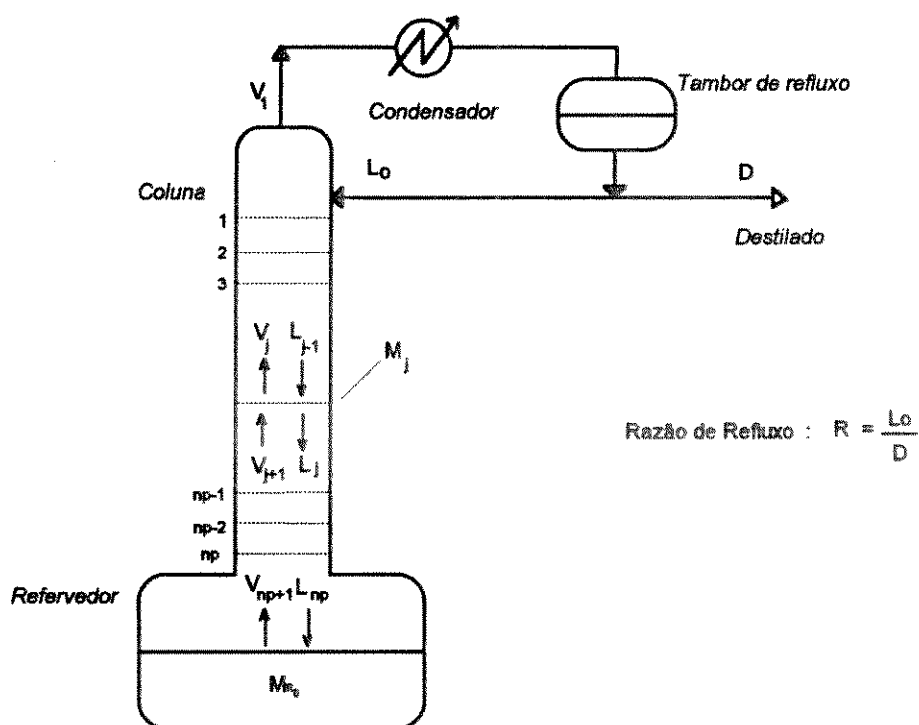


Figura 3.1 - Representação esquemática de uma coluna de destilação em batelada

No início da destilação o refeedor, os pratos da coluna e o condensador são assumidos conter líquido de composição idêntica ao da carga inicial no refeedor (X_{B0_i}).

Iniciada a vaporização da mistura líquida no refeedor

a coluna é operada sob refluxo total até que a concentração do componente mais volátil no destilado, X_{D_1} , atinja o nível de pureza especificado.

Neste instante inicia-se a retirada de produto destilado a uma taxa de D (moles/h). A taxa de vaporização V (moles/h) e a razão de refluxo R são mantidas constantes ao longo da destilação.

O produto destilado será coletado em um tanque de produto até que a composição média do material acumulado atinja o valor especificado para o produto mais volátil. Neste instante a corrente de destilado será desviada para um segundo tanque para a coleta da 1^o fração intermediária até que a composição instantânea do destilado atinja a composição especificada para o 2^o produto mais volátil. A corrente de destilado será então desviada para um terceiro tanque onde será coletado o 2^o produto mais volátil até que o nível de pureza do produto atinja o valor médio requerido.

O ciclo de retirada de produtos e frações intermediárias será repetido até que a composição média no refeedor e nos pratos da coluna encontre a pureza especificada para o componente mais pesado, terminando assim a destilação da mistura.

Como foi dito anteriormente, as frações intermediárias removidas durante a destilação, constituem-se de produtos destilados recolhidos em tanques separados durante o período em

que o produto de topo contém material fora de especificação. Para um sistema ternário, por exemplo, pode-se obter uma ou duas frações intermediárias e três produtos. No caso de se obter duas frações intermediárias, a primeira conterá principalmente o componente mais volátil, enquanto a segunda conterá basicamente o componente intermediário e o componente mais pesado. Em geral, obtem-se $n_c - 1$ frações intermediárias e n_c produtos.

Quanto à destilação das frações intermediárias, assumiremos que todas as frações serão recicladas para a próxima batelada. A estratégia de reciclo de todas as frações intermediárias é a mais simples e a mais usada na prática.

3.3 MODELO MATEMÁTICO

As equações que descrevem a separação de uma mistura multicomponente em uma coluna de destilação em batelada são apresentadas a seguir .

Algumas suposições serão consideradas na dedução destas equações :

(a) O refeedor é parcial, ou seja, a mistura líquida no refeedor está perfeitamente misturada e tem quantidade e composição instantâneas dadas por M_R (moles) e X_{R_i} para um dado componente i . O vapor efluente do refeedor está em equilíbrio

termodinâmico com a mistura líquida residual.

(b) O condensador é total e o conteúdo do condensador e tambor de refluxo é assumido estar perfeitamente misturado e com composição $X_{D,i}$ para um dado componente "i". A quantidade de líquido acumulado no tambor de refluxo é constante e igual a M_c (moles). O refluxo é um líquido saturado e retorna para a coluna a uma taxa de L , moles/h de acordo com a razão de refluxo estabelecida.

(c) Em cada um dos " np " pratos da coluna o líquido está perfeitamente misturado e tem composição $x_{i,j}$. O vapor e o líquido efluentes de cada prato estão em equilíbrio termodinâmico. Deste modo todos os pratos são estágios teóricos, isto é 100 % eficientes. A quantidade de líquido acumulada em cada prato é assumida constante e igual a M_j (moles).

(d) A quantidade de vapor retida no sistema é considerada desprezável. Embora o volume de vapor possa ser grande, o número de moles em geral é pequeno uma vez que a massa específica de vapor é menor que a massa específica de líquidos.

(e) As perdas de calor da coluna e variações de temperatura de prato para prato (efeitos de calor sensível) também são desprezados. Os fluxos molares das fases vapor e líquida (V e L) são assumidos constantes ao longo da coluna em batelada.

(f) A mistura a ser destilada será um sistema multicomponente (" nc " componentes) com volatilidade relativa

constante ao longo da coluna.

3.3.1 - BALANÇOS MATERIAIS

Seja um estágio "j" arbitrário na coluna de destilação em batelada representada na figura 3.1 :

Onde :

V = Vazão molar total do vapor

L = Vazão molar total do líquido

x = Fração molar do líquido

y = Fração molar de vapor

M = Acúmulo molar de líquido

np = número de pratos na coluna

nc = número de componentes

Subscrito : j = estágio ; j = 0,1,2,..., np+1

i = componente ; i = 1,2,..., nc+1

BALANÇOS MATERIAIS NO REFERVEDOR :

Balanço Global :

$$\frac{dM_R}{dt} = L_{np} - V_{np+1} = -D \quad (3.1)$$

Balanço para o componente mais volátil :

$$\frac{d(x_{i,np+1} \cdot M_R)}{dt} = \left[L_{np} \cdot x_{i,np} - V_{np+1} \cdot y_{i,np+1} \right] \quad (3.2)$$

BALANÇOS MATERIAIS PARA O PRATO j :

Balanço Global :

$$\frac{dM_j}{dt} = -L_j + L_{j-1} + V_{j+1} - V_j \quad (3.3)$$

Balanço para o componente mais volátil :

$$M_j \frac{dx_{i,j}}{dt} = V_{j+1} \cdot y_{i,j+1} - V_j \cdot y_{i,j} \\ + L_{j-1} \cdot x_{i,j-1} - L_j \cdot x_{i,j} \quad (3.4)$$

BALANÇOS MATERIAIS NO CONDENSADOR :

Balanço Global :

$$V_1 = L_0 + D + \frac{dM_o}{dt} \quad (3.5)$$

Balanço para o componente mais volátil :

$$M_o \left(\frac{dM_o}{dt} \right) = V_1 \cdot y_{i,1} - (L_0 + D) \cdot x_{i,0} \quad (3.6)$$

3.4.2 - RELAÇÃO DE EQUILÍBRIO DE FASES

A destilação em batelada é caracterizada por sucessivos estágios de equilíbrio líquido-vapor, então, faz-se necessário a determinação de dados de equilíbrio. Para sistemas multicomponentes é comum descrever os dados de equilíbrio por meio da razão de equilíbrio.

O valor da razão de equilíbrio (K_i) pode ser expresso como a relação do equilíbrio entre a composição do vapor e composição do líquido.

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (3.7)$$

A razão de equilíbrio é uma função da pressão, temperatura, composição do líquido e composição do vapor.

Muitos dos sistemas multicomponentes de interesse industrial podem ser considerados como sendo ideais. Isto é verdadeiro para componentes de uma mesma série homóloga, por exemplo, hidrocarbonetos. Para estes sistemas pode-se aplicar a Lei de Raoult. Esta relaciona a pressão parcial na fase vapor com a composição na fase líquida ;

$$P_i = x_i \cdot P_{vp_i} \quad (3.8)$$

Dalton postulou que a pressão parcial de um gás ideal em uma mistura gasosa é proporcional ao número de moléculas daquele gás na mistura (ou a fração molar).

$$P_i = y_i \cdot P_T \quad (3.9)$$

Combinando as leis de Raoult (equação 3.8) e Dalton (equação 3.9) resulta uma expressão a qual descreve misturas de vapores e líquidos ideais em equilíbrio.

Para um único componente, obtemos :

$$y_i \cdot P_T = x_i P_{vp_i} \quad (3.10)$$

Rearranjando a equação (3.10) , resulta :

$$\frac{y_i}{x_i} = \frac{P_{vp_i}}{P_T} \quad (3.11)$$

Deste modo, para sistemas ideais também é possível definir o valor da constante de equilíbrio (K_i) como a razão da pressão de vapor do componente " i " com a pressão total.

$$K_i = \frac{P_{vp_i}}{P_T} \quad (3.12)$$

Com a predição do valor da pressão de vapor de cada

componente (procedimento mencionado posteriormente) e conhecendo-se a pressão de operação é possível obter a razão de equilíbrio, e conseqüentemente a composição das duas fases para vários sistemas, sob inúmeras condições de operação da coluna de destilação em batelada.

3.4 - CÁLCULO DAS PROPRIEDADES

Nas duas próximas seções, serão discutidos os métodos utilizados neste trabalho para a predição da pressão de vapor e da volatilidade relativa.

3.4.1 - PRESSÃO DE VAPOR

Um grande número de estudos tem avaliado diferentes equações em termos de sua habilidade para correlacionar e/ou predizer a pressão de vapor sobre uma larga faixa de temperatura. A equação de Antoine (3.13) é a mais comum, mas não é a melhor. Os valores das constantes A,B e C são tabelados, para um número de componentes, por Prausnitz e outros [28] com T em Kelvin e Pvp em bars. A faixa de temperatura não é muito grande e em alguns casos

corresponde a um intervalo de pressão de 0,01 a 2,0 bars. A equação de Antoine (3.13) nunca deve ser usada fora dos limites das temperaturas estabelecidas. Extrapolações além destes limites podem levar a valores absurdos.

$$\ln P_{VP} = A - \frac{B}{T + C} \quad (3.13)$$

Onde A, B e C são constantes empíricas.

Foram realizadas várias comparações e a equação que melhor apresentou resultados foi a equação de Wagner (3.14). Então, esta foi selecionada como a melhor equação.

$$\ln (P_{VP}/P_c) = (1-X)^{-1} \left[(VP A) X + (VP B) X^{1.5} + (VP C) X^3 + (VP D) X^6 \right] \quad (3.14)$$

Onde : $X = 1 - T/T_c$

As constantes da equação de Wagner (VP A, VP B, VP C, VP D) foram determinadas por McGarry [29] para um número de componentes, e muitos destes valores são listados por Prausnitz e outros [28].

As pressões de vapor dependem da temperatura. Então, é necessário um procedimento iterativo, visto que as pressões de

vapor não podem ser expressas como funções simples da temperatura.

No caso de trabalharmos com componentes semelhantes, a Lei de Raoult (3.15) é suficientemente exata.

$$y = \frac{P_{vp}}{P_{abs}} \cdot x \quad (3.15)$$

A Lei de Raoult só é exata para o equilíbrio líquido - vapor de uma solução ideal em equilíbrio com uma mistura gasosa ideal, ou seja, a fase gasosa comporta-se como um gás ideal e a fase líquida como uma solução ideal. É uma aproximação útil para soluções formadas por componentes cuja natureza química e dimensões moleculares são semelhantes.

Considerando um sistema multicomponente, pode-se escrever o balanço material para a fase vapor da seguinte forma :

$$y_1 + y_2 + \dots + y_n = 1 \quad (3.16)$$

A partir da expressão da Lei de Raoult, para cada componente, temos :

$$y_1 = \frac{P_{vp_1}}{P_{abs}} \cdot x_1 \quad (3.17)$$

$$y_2 = \frac{P_{vp_2}}{P_{abe}} \cdot x_2 \quad (3.18)$$

$$\begin{array}{ccc} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{array}$$

$$y_n = \frac{P_{vp_n}}{P_{abe}} \cdot x_n \quad (3.19)$$

Substituindo as equações descritas anteriormente na equação do balanço material (3.16) obtemos a seguinte expressão

$$P_{vp_1} \cdot x_1 + P_{vp_2} \cdot x_2 + \dots + P_{vp_n} \cdot x_n = P_{abe} \quad (3.20)$$

Reescrevendo a equação de Wagner para cada componente, temos :

$$P_{vp_1} = P_{c_1} \exp \left\{ (1 - X_1)^{-1} \left[(VP \ A) X_1 + (VP \ B) X_1^{1.5} + (VP \ C) X_1^3 + (VP \ D) X_1^6 \right] \right\} \quad (3.21)$$

$$P_{vp_2} = P_{c_2} \exp \left\{ (1 - X_2)^{-1} \left[(VP \ A) X_2 + (VP \ B) X_2^{1.5} + (VP \ C) X_2^3 + (VP \ D) X_2^6 \right] \right\} \quad (3.22)$$

$$P_{VP_3} = P_{C_3} \exp \left\{ (1 - X_3)^{-1} \left[(VP - A) X_3 + (VP - B) X_3^{1.5} + (VP - C) X_3^3 + (VP - D) X_3^6 \right] \right\}$$

(3.23)

$$\begin{matrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix}$$

$$P_{VP_n} = P_{C_n} \exp \left\{ (1 - X_n)^{-1} \left[(VP - A) X_n + (VP - B) X_n^{1.5} + (VP - C) X_n^3 + (VP - D) X_n^6 \right] \right\}$$

(3.24)

Onde :

$$X_1 = 1 - T/T_{C_1} \quad (3.25)$$

$$X_2 = 1 - T/T_{C_2} \quad (3.26)$$

$$X_3 = 1 - T/T_{C_3} \quad (3.27)$$

$$\begin{matrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix}$$

$$X_n = 1 - T/T_{C_n} \quad (3.28)$$

Combinando a equação (3.20) com as equações (3.21 , 3.22, 3.23 e 3.24) chegamos na seguinte expressão :

$$x_1 = P_{C_1} \exp \left\{ (1 - X_1)^{-1} \left[(VP - A) X_1 + (VP - B) X_1^{1.5} + (VP - C) X_1^3 + (VP - D) X_1^6 \right] \right\} +$$

$$\begin{aligned}
 & x_2 \cdot P_{c_2} \exp \left\{ (1 - X_2)^{-1} \left[(VP \ A) X_2 + (VP \ B) X_2^{1.5} + (VP \ C) X_2^3 + (VP \ D) X_2^6 \right] \right\} + \\
 & \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
 & \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
 & \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\
 & x_n \cdot P_{c_n} \exp \left\{ (1 - X_n)^{-1} \left[(VP \ A) X_n + (VP \ B) X_n^{1.5} + (VP \ C) X_n^3 + (VP \ D) X_n^6 \right] \right\} = P_{abs}
 \end{aligned}
 \tag{3.29}$$

As constantes da equação de pressão de vapor, juntamente com a composição inicial do líquido e com a pressão total do sistema são conhecidas e a única incógnita presente é a temperatura. Para completar a resolução iterativa foi utilizado um procedimento sistemático de convergência numérica como o método de Newton. (Figura 1.0 - Apêndice 1.0).

3.4.2 - VOLATILIDADE RELATIVA

A volatilidade relativa é uma medida muito conveniente da facilidade ou dificuldade de separação em destilação. A volatilidade do componente " j " relativa ao componente " i " definida como :

$$\alpha_{j,i} = \frac{y_j / x_j}{y_i / x_i} = \frac{K_j}{K_i} \quad (3.30)$$

Onde x e y são as frações molares na fase líquida e na fase vapor respectivamente.

Um valor muito alto de volatilidade relativa significa que os componentes "j" e "i" podem ser facilmente separados em uma coluna de destilação. Valores de volatilidade relativa próximos de um ocasionam uma difícil separação, requerendo um grande número de pratos e alto consumo de energia.

Nas duas próximas seções, serão descritos os métodos utilizados para a predição dos parâmetros necessários para o cálculo da volatilidade relativa.

Para sistemas multicomponentes, aplicando a definição básica (equação 3.30) e rearranjando conduz a seguinte relação :

$$y_j = \frac{\alpha_j \cdot x_j}{\sum_{k=1}^n \alpha_k \cdot x_k} \quad (3.31)$$

Em colunas de destilação frequentemente a volatilidade é assumida constante devido a simplicidade nos cálculos do equilíbrio de fase líquido-vapor.

3.5 CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentadas as equações que serão utilizadas na simulação de destilações em batelada de uma mistura multicomponente. Estas equações são as equações do Balanço Material (equações 3.1 a 3.6) e a Relação de Equilíbrio (equação 3.31). Serão analisados o efeito de parâmetros operacionais sobre a separação dos componentes de uma mistura ternária.

Resultados e Análise

4.1 INTRODUÇÃO

O processo de destilação em batelada caracteriza-se por um grande número de parâmetros operacionais que devem ser otimizados para o projeto e operação da coluna.

No presente capítulo analisamos os efeitos de parâmetros como número de pratos, quantidade da carga original líquida, razão de refluxo e volatilidade relativa sobre a separabilidade de um sistema ternário por destilação em batelada.

TABELA 1.0 - Condições para a simulação da Destilação do Sistema Base

Carga Inicial	300 a 600 moles
Taxa de Vapor	100 moles
Composição da alimentação	(a) $X_{B0_1} = .60, X_{B0_2} = .25, X_{B0_3} = .15$ (b) $X_{B0_1} = .30, X_{B0_2} = .30, X_{B0_3} = .40$
Número de pratos	10 a 60
Volatilidade relativa	(a) $\alpha_1 = 4.0, \alpha_2 = 2.0, \alpha_3 = 1.0$ (b) $\alpha_1 = 3.67, \alpha_2 = 1.87, \alpha_3 = 1.0$
Destilado	20 a 50 moles/h
Composição média especificada para os produtos	(a) $X_{D_1} = .80, X_{D_2} = .80, X_{D_3} = .80$ (b) $X_{D_1} = .85, X_{D_2} = .85, X_{D_3} = .85$ (c) $X_{D_1} = .90, X_{D_2} = .90, X_{D_3} = .90$ (d) $X_{D_1} = .95, X_{D_2} = .95, X_{D_3} = .95$

O sistema n-octano / n-nonano / n-decano foi utilizado como o sistema ternário base para estudo. Os resultados obtidos na simulação da destilação do sistema base estão apresentados no apêndice 1.0. As condições operacionais utilizadas nas várias simulações estão listadas na tabela 1.0. O efeito dos diversos parâmetros operacionais, durante a destilação em batelada do sistema base, são discutidos a seguir.

As tabelas 2.0 e 3.0 mostram a possibilidade de separação do sistema ternário base para diferentes condições de razão de refluxo, número de pratos e carga inicial de líquido.

De acordo com as condições testadas observa-se que para algumas combinações de número de pratos, taxa de refluxo e carga inicial não conseguimos obter a separação dos três produtos.

A Tabela 2.0 mostra que a coluna com 10 pratos, alimentada com uma carga inicial de 300 moles deveria operar com uma razão de refluxo igual a pelo menos 2.5 para permitir a separação dos três produtos P_1 , P_2 e P_3 , com a composição média especificada ($\bar{X}_D = .90$). Aumentando-se a razão de refluxo para $R = 4.0$ a separação é atingida, retirando-se apenas uma fração intermediária (F_1).

No caso de coluna contendo 60 pratos e carregada inicialmente com 600 moles (Tabela 3.0) a separação dos três produtos seria atingida para qualquer razão de refluxo testada, na faixa de $R = 1.0$ a $R = 4.0$. O mesmo não acontece se a carga inicial for de 300 moles. Neste caso a mistura líquida no

refervedor se esgota sem que se consiga obter o produto P_3 .

Deste modo para uma dada combinação de número de pratos e carga inicial, uma razão de refluxo mínima deve ser encontrada, de modo a permitir que a separação desejada seja obtida, sem que ocorra o esgotamento de material líquido no fervedor, antes do término da destilação. A possibilidade de atingir a separação desejada aumenta com o número de pratos, mas a quantidade mínima de material adicionada inicialmente no fervedor deve ser aumentada a medida que o número de pratos aumenta.

Tabela 2.0 - Separação dos três componentes

(Carga inicial = 300 moles)

np	R	Separa todos os componentes	P_1	P_2	P_3	F_1	F_2
10	1.0	Não	S	N	N	S	N
	1.5	Sim	S	S	S	S	S
	4.0	Sim	S	S	S	S	N
40	1.0	Sim	S	S	S	S	N
	2.5	Sim	S	S	S	S	N
	4.0	Sim	S	S	S	N	N
60	1.0	Não	S	S	N	S	N
	2.5	Não	S	S	N	N	N
	4.0	Não	S	S	N	N	N

Tabela 3.0 - Separação dos três componentes

(Carga inicial = 600 moles)

np	R	Separa todos os componentes	P ₁	P ₂	P ₃	F ₁	F ₂
10	1.0	Não	S	N	N	S	N
	1.5	Sim	S	S	S	S	S
	4.0	Sim	S	S	S	S	N
40	1.0	Não	S	N	N	S	N
	2.5	Sim	S	S	S	S	N
	4.0	Sim	S	S	S	N	N
60	1.0	Sim	S	S	S	S	N
	2.5	Sim	S	S	S	S	N
	4.0	Sim	S	S	S	N	N

As Figuras 4.1, 4.2 e 4.3 mostram os perfis das composições e das taxas do produto destilado a medida que a destilação progride, sob razões de refluxo iguais a 1.0, 3.0 e 4.0, respectivamente.

O aumento da razão de refluxo modifica significativamente os perfis de composição, melhorando a separação entre os componentes da mistura.

Quando a coluna é operada sob razão de refluxo igual a 1.0 (Figura 4.1) apenas o produto P₁ é obtido na especificação

desejada ($\bar{X}_D = 0.90$) e para isto são gastos 3.0 horas de destilação. As 3 horas seguintes (entre $t_{p1} = 3.0$ hs e $t_{f1} = 5.91$ h) são utilizadas na coleta da primeira fração intermediária. Neste período, o perfil de composição para o segundo componente mais volátil (nonano) atinge o valor máximo de $X_D = 0.63$ na 5ª hora de destilação, impossibilitando a retirada do produto P_2 , na especificação desejada ($\bar{X}_D = 0.90$). Com o esgotamento da Carga líquida no refulvador, o processo é interrompido quando o tempo de destilação é igual a 5.91 horas.

O aumento da razão de refluxo de 1.0 para 3.0 melhora a separação entre os componentes, principalmente entre octano e nonano. O tempo de destilação, como era esperado, aumentou com o aumento da razão de refluxo (redução da taxa de retirada de destilação). No caso da operação sob razão $R = 3.0$ são necessárias 8.1 horas para retirar o produto P_1 . No entanto a Figura 4.2 mostra que se a destilação do primeiro produto fosse interrompida antes da 5ª hora, por exemplo, a composição média do produto seria maior do que a composição especificada ($X_{D_1} = 0.90$). O aumento da razão de refluxo favoreceu também a separação do segundo componente, o nonano. O valor máximo da composição instantânea do nonano ocorre a 9.5 horas do início da destilação e tem valor aproximado de $X_{D_2} = 0.93$, já acima da especificação para o produto P_2 . Quando a destilação é terminada, o produto P_3 no refulvador já tem a especificação desejada ($X_{D_3} = 0.90$).

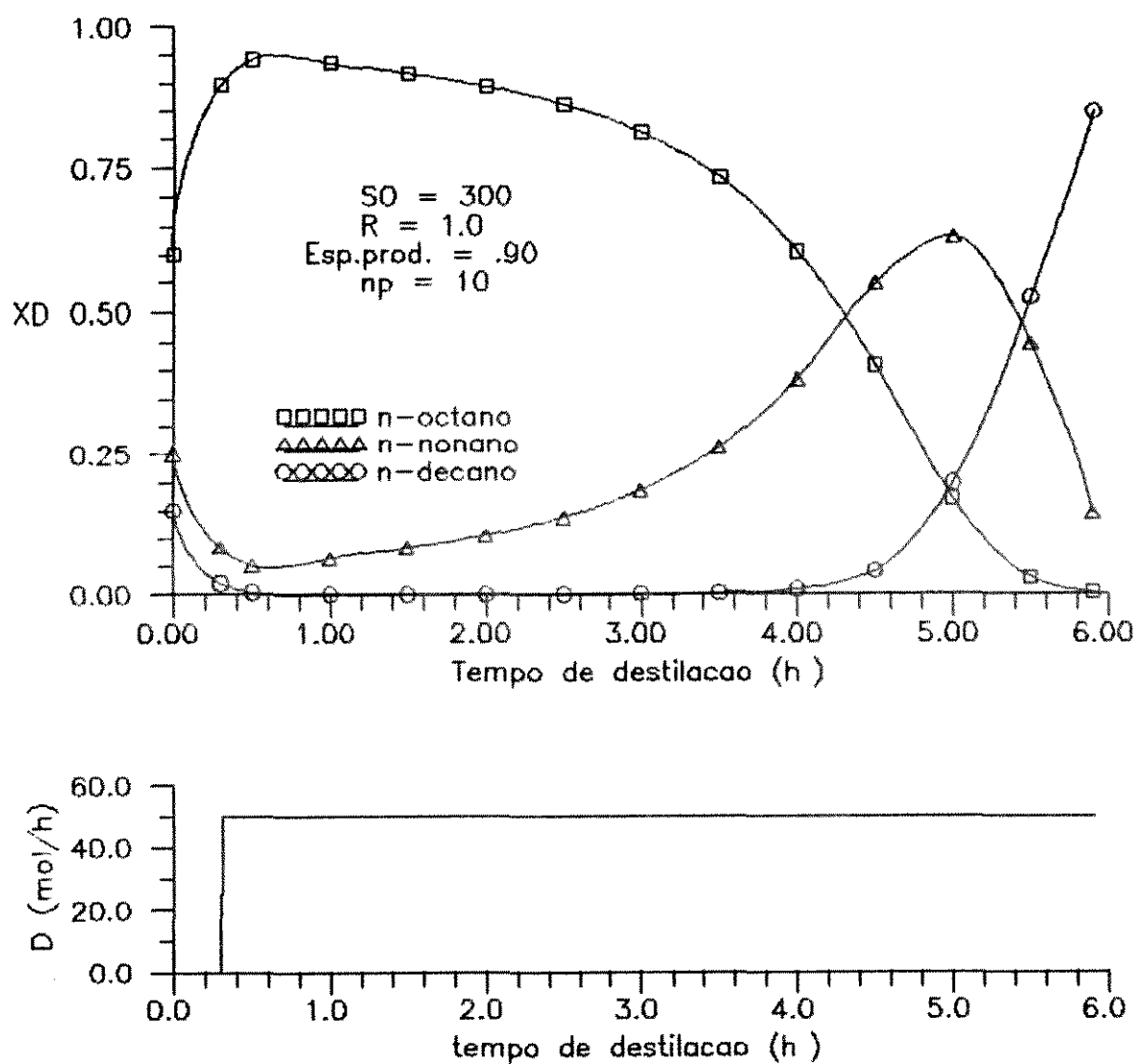


Figura 4.1 - Perfis de composição do destilado e taxa de destilado ($R = 1.0$; $np = 10$)

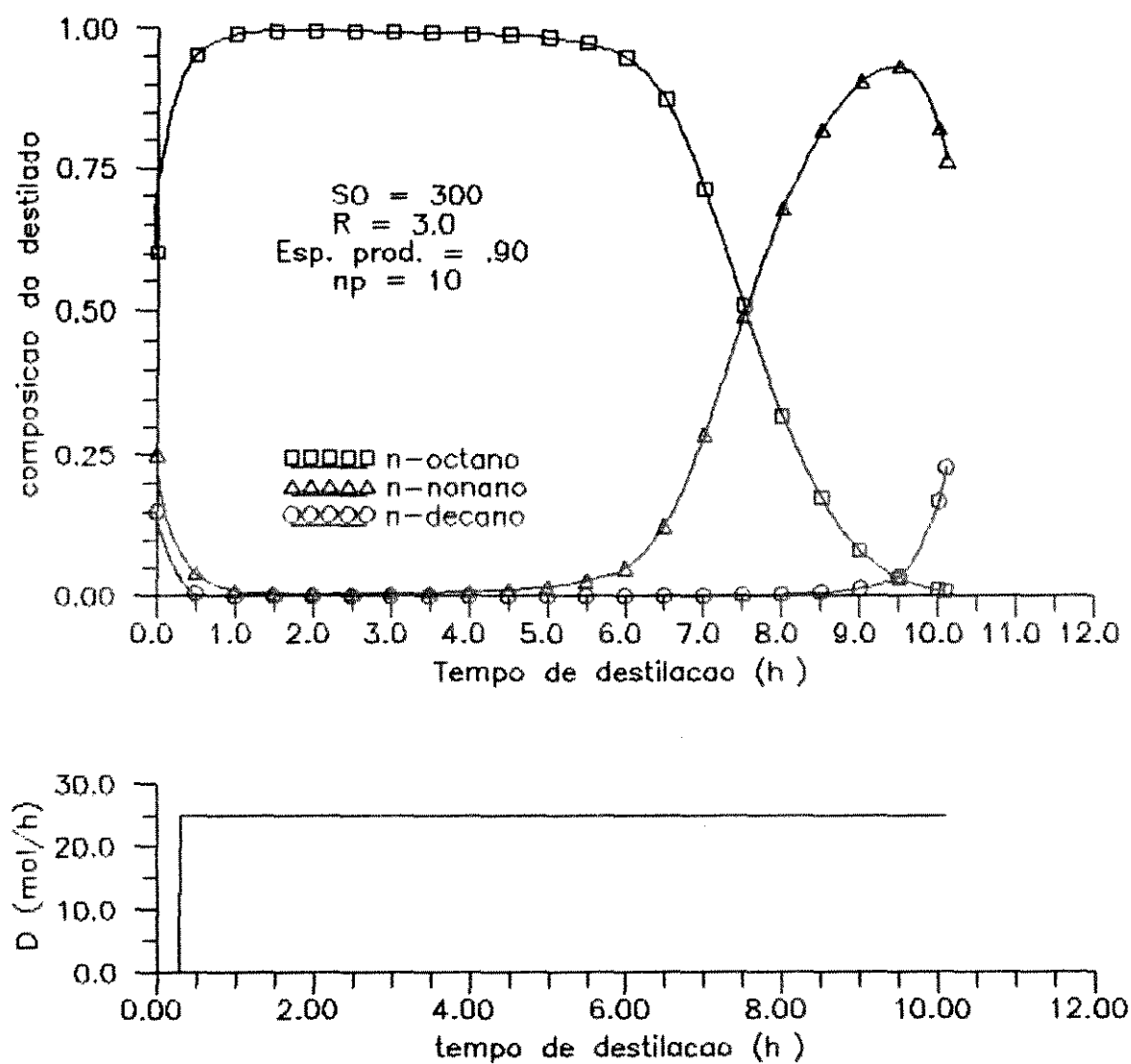


Figura 4.2 - Perfis de composição do destilado e taxa de destilado (R = 3.0 ; np = 10)

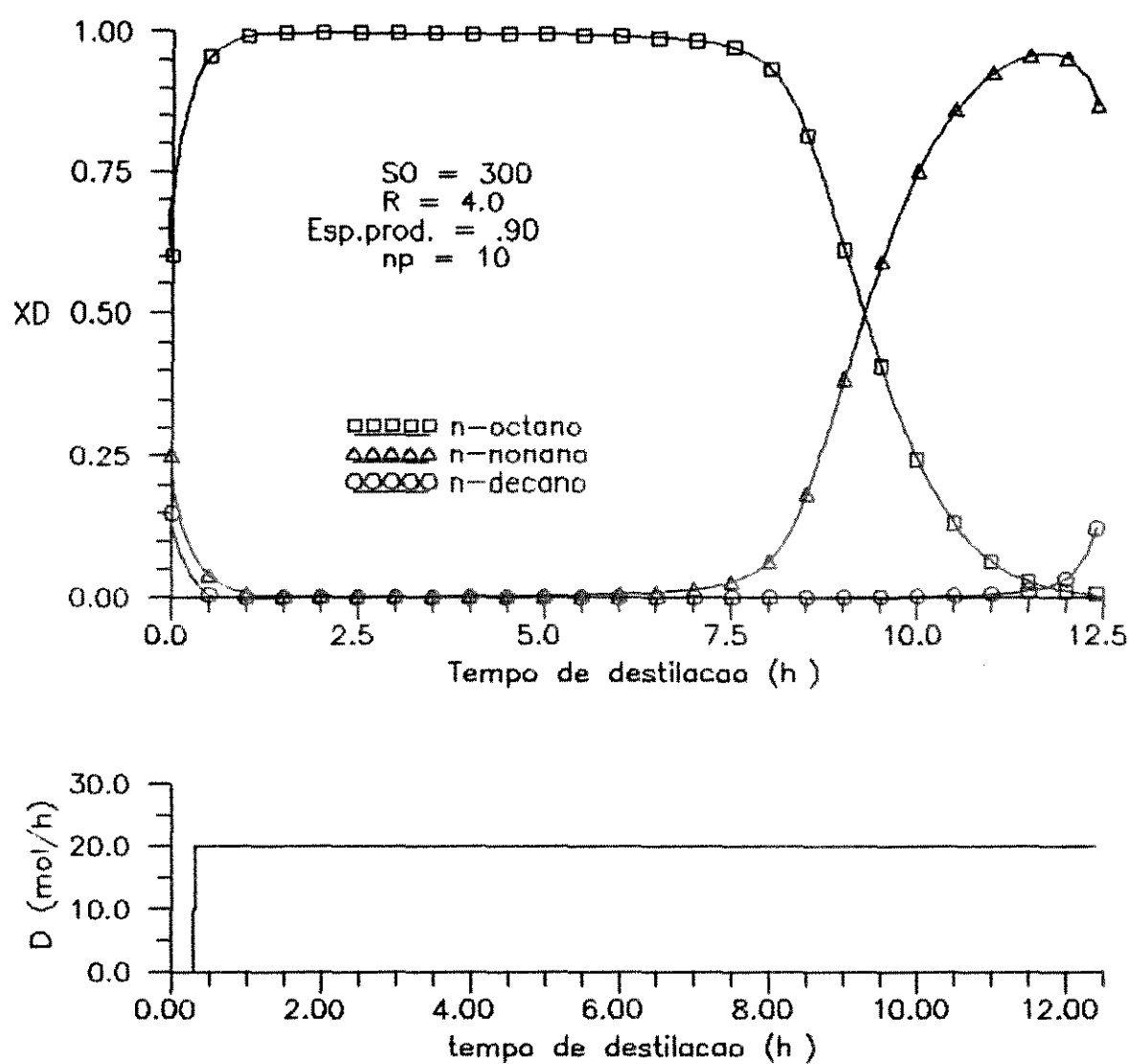


Figura 4.3 - Perfis de composição do destilado e taxa de destilado (R = 4.0 ; np = 10)

A Figura 4.3 mostra que o aumento da razão de refluxo para $R = 4.0$ melhora ainda mais a composição final dos componentes, no entanto, a operação da coluna sob razão de refluxo $R = 3.0$ já é suficiente para atingir a separação desejada, a um tempo de destilação inferior aquele sob razão de refluxo $R = 4.0$.

Os perfis da taxa de destilado nas figuras 4.1 a 4.3 indicam que o produto destilado começa a ser retirado da coluna aproximadamente 30 minutos após o início da destilação. Durante este período a coluna opera sob refluxo total, até que a composição instantânea do componente mais volátil atinja o valor médio especificado para o produto P_1 . O aumento da razão de refluxo de $R = 1.0$ para $R = 3.0$ correspondeu a uma redução na taxa de destilado de 50 moles/h para 20 moles/h.

4.2 EFEITO DA CARGA LÍQUIDA INICIAL

As Figuras 4.4 e 4.5 e a Tabela 4.0 mostram efeito do aumento da quantidade da carga líquida inicial sobre as quantidades dos produtos e das frações intermediárias e suas respectivas composições, sobre o tempo necessário para se obter cada produto e cada fração intermediária e também sobre o tempo total de destilação. O estudo foi realizado para colunas com

número de pratos igual a 10 e 20, e razão de refluxo igual a 1, 3 e 4. Para estas simulações mantivemos 90 % como composição média de especificação para os três produtos. Os resultados obtidos na destilação do sistema base, para as condições acima, estão apresentados nas Tabelas 1.0 a 6.0 do Apêndice 1.0 .

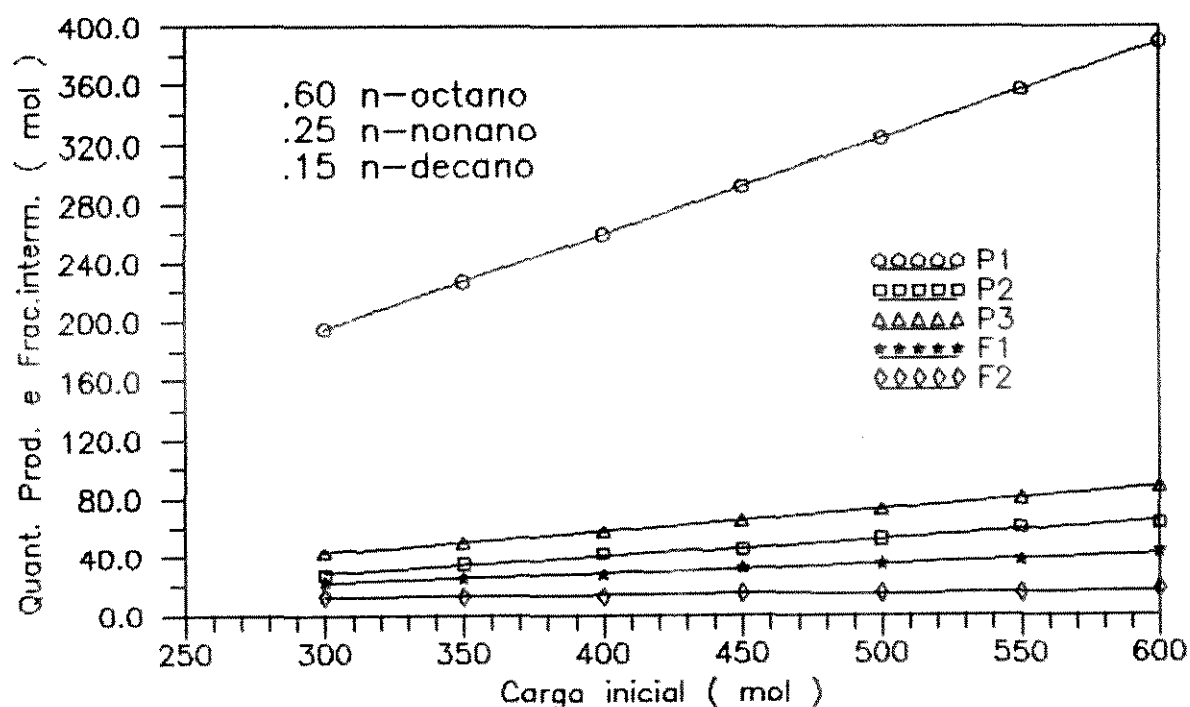


Figura 4.4 - Quantidade dos produtos e das frações intermediárias em função da carga líquida inicial ($n_p = 10$; $R = 3.0$)

A Figura 4.4 mostra, para uma coluna com dez pratos e operando sob razão de refluxo igual a três, que o aumento da carga líquida inicial (SO) aumentou as quantidades dos produtos

(P_1 , P_2 e P_3) e das frações intermediárias (F_1 e F_2) obtidas durante o processo de destilação.

As quantidades dos produtos P_1 , P_2 e P_3 e da fração intermediária F_1 , aumentaram praticamente na mesma razão que a carga inicial, o mesmo não aconteceu com as quantidades da fração intermediária F_2 .

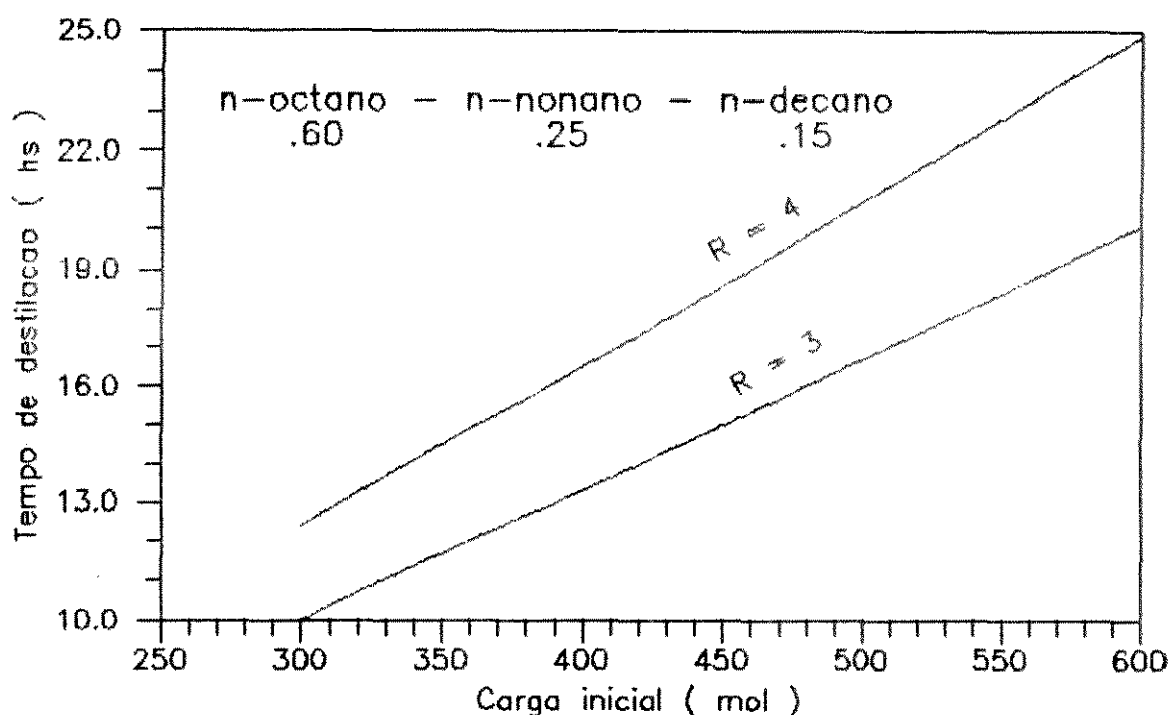


Figura 4.5 - Tempo de destilação em função da carga líquida inicial

A Tabela 4.0 e Figura 4.5 mostram a influência da quantidade da carga inicial de líquido sobre os tempos necessários para se obter os produtos e as frações intermediárias

e sobre o tempo total da destilação. Estes tempos aumentam praticamente na mesma razão que a carga líquida inicial de líquido, independentemente da razão de refluxo.

Tabela 4.0 - Efeito da Carga Inicial ($n_p = 10$)

	R = 1.0		R = 3.0		R = 4.0	
	SO=300	SO=600	SO=300	SO=600	SO=300	SO=600
tp_1	3.00	5.40	8.10	13.30	8.10	20.00
$XP_{1,1}$	.89887	.89331	.89561	.89784	.89986	.89949
$XP_{1,2}$	.09993	.09960	.10388	.10295	.09974	.10023
$XP_{1,3}$	.00120	.00109	.00052	.00035	.00004	.00027
tf_1	5.91	11.91	9.00	17.60	10.80	21.90
tp_2	—	—	10.10	20.10	12.50	25.50
$XP_{2,1}$	—	—	.03495	.03330	.03130	.02400
$XP_{2,2}$	—	—	.89463	.89882	.93172	.93134
$XP_{2,3}$	—	—	.07042	.07150	.03698	.04466
XR_1	—	—	.00000	.00002	.00000	.00000
XR_2	—	—	.06071	.09818	.05976	.08104
XR_3	—	—	.93929	.90980	.94024	.91896
tf	5.91	11.91	10.20	20.40	12.50	25.20

4.3 EFEITO DO NÚMERO DE PRATOS

O efeito do número de pratos sobre o tempo total de destilação, para o sistema n-octano / n-nonano / n-decano está representado na Figura 4.6. Observamos que para as condições de operação da coluna em que é possível obter os três produtos desejados, o número de pratos da coluna praticamente não influencia o tempo necessário para concluir a destilação.

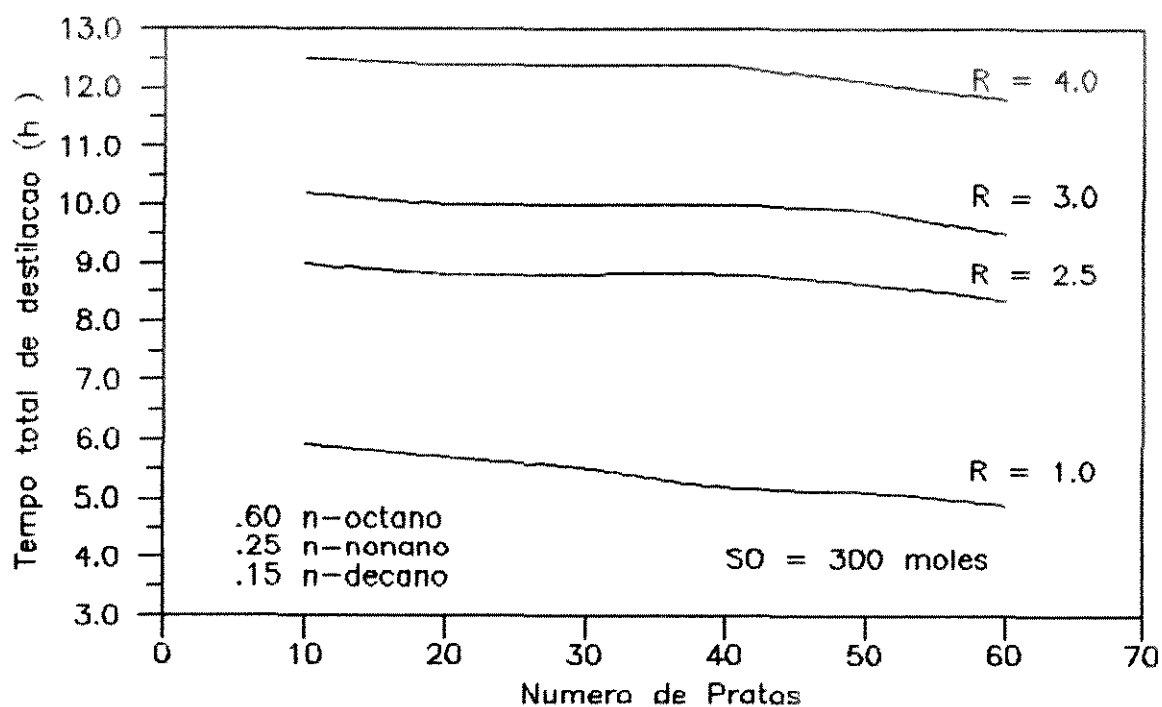


Figura 4.6 - Tempo total de destilação em função do número de pratos

Por exemplo, quando a coluna opera com uma carga líquida inicial de 300 moles e sob razão de refluxo maior que 2.5 a separação desejada é obtida para um número de pratos qualquer entre 10 e 50 pratos. Para estas condições o tempo total de destilação não se altera com a variação do número de pratos da coluna.

No caso em que a coluna opera sob razão de refluxo igual a 1.0, por exemplo, o tempo de destilação diminui com o aumento do número de pratos, no entanto nestas condições, nem sempre a separação desejada é alcançada.

Mais tarde analisamos os tempos de retiradas dos produtos e frações intermediárias (Tabela 5.0). Quanto aos tempos de retirada do primeiro e segundo produto, tp_1 e tp_2 respectivamente, e ao tempo de retirada da primeira fração intermediária, - tf_1 , verificamos que também não ocorreram alterações muito significativas.

Tabela 5.0 - Influência do número de pratos nos tempos de retiradas dos produtos e e frações intermediárias

	np = 10	np = 20	np = 40	np = 60
te	.31	.31	.31	.31
tp ₁	15.90	16.00	16.20	16.20
tf ₁	17.60	17.10	16.50	——
tp ₂	20.10	20.10	20.00	20.00
tf ₂	20.40	——	——	——
tf	20.40	20.10	20.00	20.00

A tabela 6.0 mostra o efeito do número de pratos sobre as composições dos produtos da destilação de uma carga de 600 moles sob razão de refluxo igual a 3.0.

Tabela 6.0 - Influência do números de pratos sobre as composições dos produtos ($S_0 = 600$ moles ;
 $R = 3.0$)

	np = 10	np = 20	np = 40	np = 60
$XP_{1,1}$	.89784	.89945	.899634	.89977
$XP_{1,2}$	.10182	.10042	.10353	.10010
$XP_{1,3}$	.00035	.00013	.00012	.00012
$XP_{2,1}$	.02968	.02909	.02442	.01593
$XP_{2,2}$	.89882	.95095	.97528	.98404
$XP_{2,3}$	.07150	.01997	.00300	.00003
XR_1	.00002	.00002	.00000	.00000
XR_2	.09018	.08701	.03023	.00593
XR_3	.90980	.91297	.96977	.99407

4.4 EFEITO DA RAZÃO DE REFLUXO

As vazões dos produtos obtidos (P_1 , P_2 e P_3) estão representadas na Figura 4.7, para a carga inicial de 600 moles.

Os perfis mostrados na Figura 4.7 indicam a razão de refluxo mínima necessária para atingir a separação dos três produtos independentemente do número de pratos da coluna.

Por exemplo, quando a coluna opera com uma razão de refluxo igual a 2.5 são retiradas aproximadamente 390 moles do produto P_1 a uma composição $X_{D_1} = 0.8982$, independente do número de pratos. Deste modo são retirados (no produto P_1) 350 moles de octano, o que é praticamente toda a quantidade deste componente (0.60×600 moles = 360 moles) presentes na carga líquida inicial. Por outro lado, para estas condições de operação ($S_0 = 600$ moles e $R = 2.5$) as quantidades retiradas de produto P_2 e P_3 aumentam com o aumento do número de pratos na coluna.

Para as condições de operação onde a razão de refluxo é igual a 4.0, por exemplo, os três produtos são prontamente separados, independente do número de pratos.

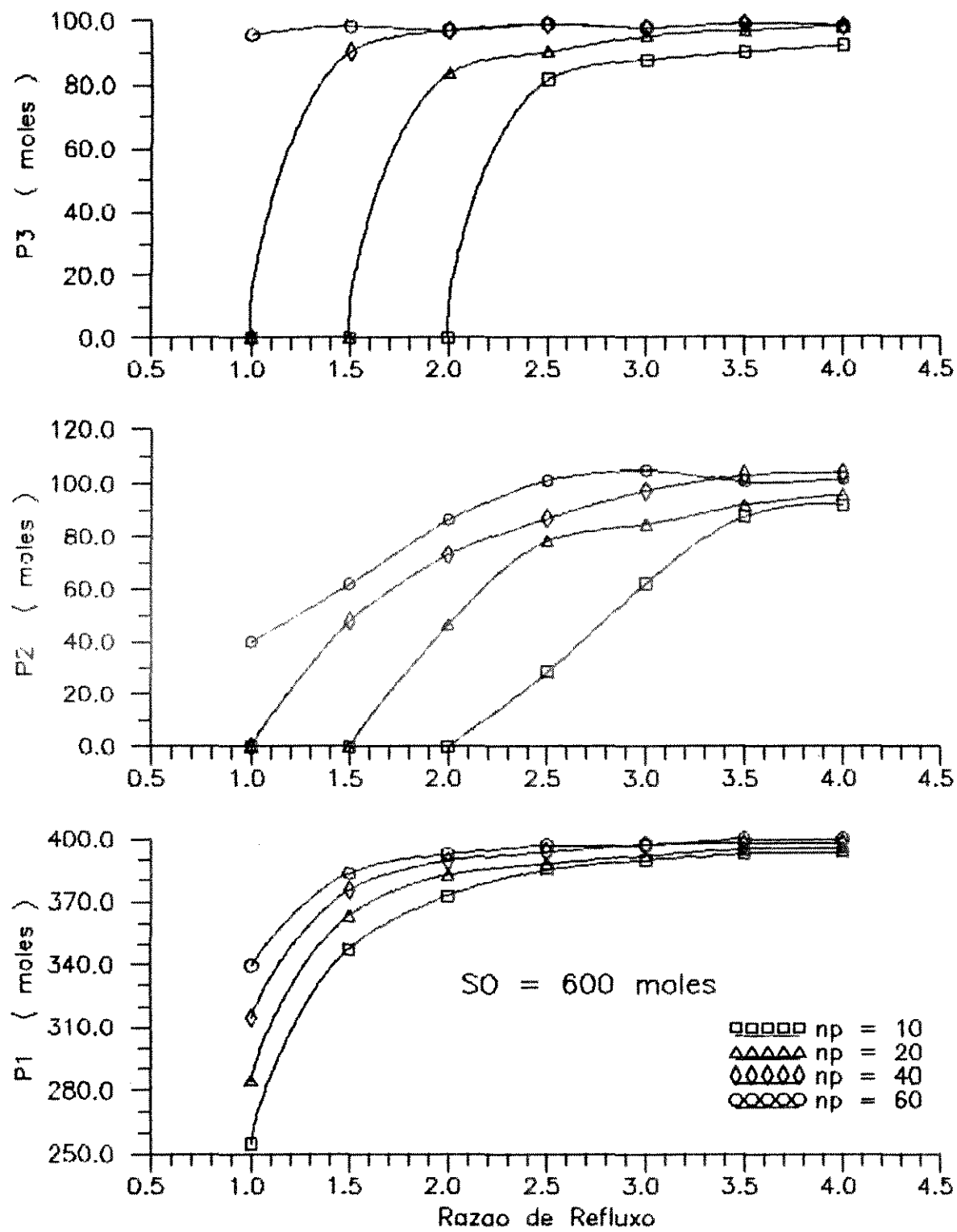


Figura 4.7 - Quantidade dos produtos (P_1 , P_2 e P_3) em função da razão de refluxo

A Figura 4.8 mostra a influência da razão de refluxo sobre a quantidade da primeira fração intermediária (F_1) durante a destilação da carga de 600 moles, em colunas com diferentes números de pratos. As quantidades de frações intermediárias retidas diminuem a medida que o número de pratos e a razão de refluxo aumentam. Verifica-se que na operação da coluna com número de pratos superior a 40 e altas razões de refluxo ($R > 3.5$), alcançamos a separação dos três componentes sem a formação de frações intermediárias.

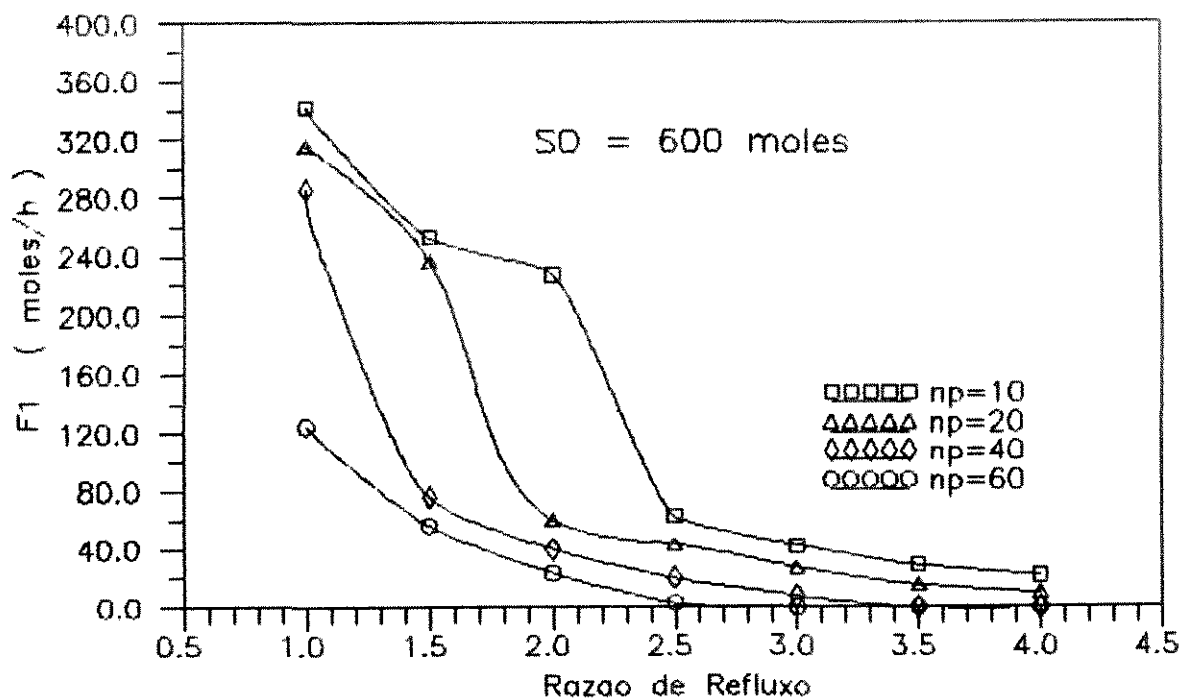


Figura 4.8 - Quantidade da 1ª fração intermediária em função da razão de refluxo

O Fator Capacitor definido por Luyben [6] foi utilizado para verificar o desempenho da destilação em batelada do sistema 0.60 octano / 0.25 nonano / 0.15 decano.

O Fator Capacitor (CAP) da coluna em batelada é definido como a quantidade total de produtos obtidos na especificação desejada dividido pelo tempo total de destilação. Assumindo-se um tempo de 30 minutos como o período requerido para esvaziar e recarregar o refeedor, o tempo total de batelada é $t_f + 0.5$ h. Deste modo

$$\text{CAP} = \frac{P_1 + P_2 + P_3}{t_f + 0.5}$$

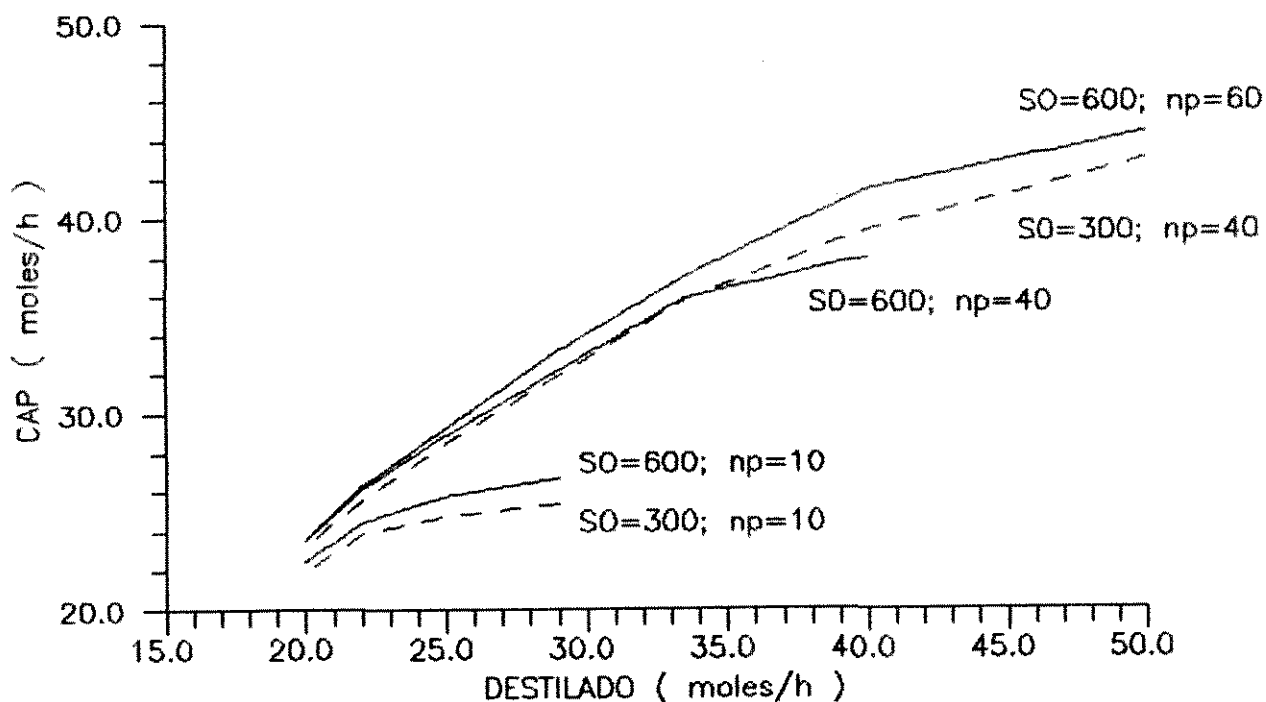


Figura 4.9 -

O Fator Capacitor é mostrado na Figura 4.9 função da taxa de destilado, para diferentes condições de carga inicial de líquido, número de pratos e razão de refluxo.

A Figura 4.9 mostra como a taxa ótima de destilado (e correspondente razão de refluxo) é obtida para colunas de diferentes tamanhos. Os valores do fator capacitor e taxa de destilado são representados na Figura 4.9 apenas para as condições de operação em que a separação dos três produtos (P_1 , P_2 e P_3) é possível.

A taxa ótima de destilado é aquela para a qual o fator capacitor (CAP) é máximo. Por exemplo, para a coluna de 10 pratos, com carga inicial de 600 moles a taxa de destilado é aproximadamente 29 moles/h, o que corresponde a uma razão de refluxo de 2.5 e uma capacidade de cerca de 27 moles/h. Para razões de refluxo (R) maiores do que 2.5 a capacidade da coluna diminui e para valores de R menores do que 2.5 a coluna não consegue separar os três componentes P_1 , P_2 e P_3 . No caso da coluna de 10 pratos, mudar a carga de 600 moles para 300 moles não modifica os resultados para a taxa ótima de destilado e fator capacitor.

Para a coluna com 10 pratos, com carga inicial de 600 moles, a taxa ótima de destilado foi de 40 moles/h (razão de refluxo = 1.5) correspondendo a uma capacidade de aproximadamente 38 moles/h. Deste modo tanto a capacidade quanto a taxa ótima de destilado aumentam com o aumento do número de

pratos. No caso da coluna de 40 pratos a taxa ótima de destilado foi maior para colunas com carga de 300 moles, isto é para esta carga a razão de refluxo mínima necessária para permitir a separação dos três produtos pode ser menor do que aquela para a carga de 600 moles.

Na coluna de 60 pratos, e para a faixa de condições operacionais estudadas, a separação dos três produtos só foi possível com a carga de 600 moles. A carga de 300 moles foi insuficiente para a coluna de 60 pratos, esgotando-se antes do término da destilação.

A Figura 4.10 mostra, para a carga de 600 moles, o tempo total de destilação em função da taxa de retirada de destilado.

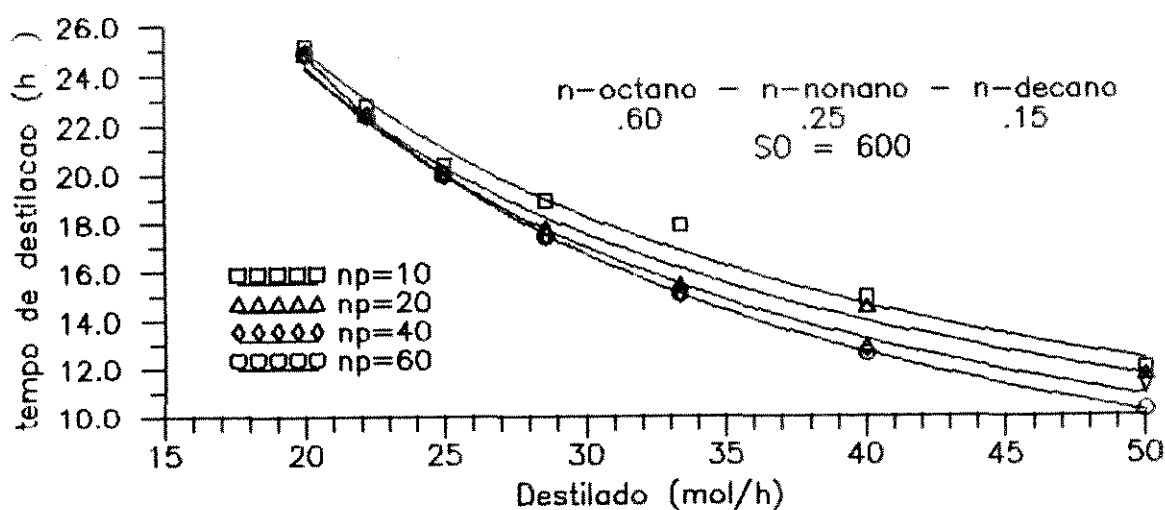


Figura 4.10 - Tempo de destilação em função do destilado

Como foi observado anteriormente, o aumento da taxa de destilado aumenta a quantidade das frações intermediárias como mostra a Figura 4.8. Por outro lado, o aumento da taxa de destilado (diminuição da razão de refluxo) faz diminuir o tempo total de destilação. A combinação destes dois efeitos leva à uma redução das quantidades de produtos, causando um aumento da capacidade até um valor máximo correspondente à taxa ótima de destilado (Figura 4.9). O aumento da taxa de destilado acima do valor ótimo impossibilita a separação dos três produtos, reduzindo a capacidade da coluna.

4.5 - EFEITO DA VOLATILIDADE RELATIVA

Para a análise do efeito da composição da alimentação, realizamos a destilação do sistema ternário base (n-octano / n-nonano / n-decano) em uma coluna de destilação em batelada com dez pratos, carga líquida inicial de 300 moles, e taxa de refluxo igual a três. Podemos verificar na tabela 11 (Apêndice 1.0) o efeito da mudança da composição da alimentação de .60/.25/.15 para .30/.30/.40. As volatilidades relativas, para as condições de operação estabelecidas, correspondentes as estas composições são 4.0/2.0/1.0 e 3.67/1.87/1.0 , respectivamente. Executamos várias simulações para cada uma das

alimentações, sendo a especificação dos produtos aumentada de 80% a 90%. Neste estudo, utilizamos a mesma especificação para todos produtos. Embora tenhamos feito esta simplificação, é possível realizar simulações do processo de destilação, com o programa desenvolvido, onde as especificações dos produtos assumam valores diferentes.

Com base nos resultados obtidos das simulações (Tabela 11 - Apêndice 1.0) observamos que em algumas situações não conseguimos obter a separação dos três componentes. Quando trabalhamos com a segunda faixa de composição (.30/.30/.40), os valores de volatilidade relativa encontrados tornaram-se muito próximos. Devido a aproximação dos valores da volatilidade relativa verificamos que a separação dos três componentes não ocorreu. Conseguimos obter somente o primeiro produto (P_1) e uma fração intermediária (F_1) composta pelo componente 2 e principalmente pelo componente 3. Apesar de não alcançarmos a separação dos três componentes, o tempo necessário para completar a destilação aumentou.

A Figura 4.11 mostra a influência da especificação dos produtos sob o tempo em que a coluna opera a refluxo total (t_e), durante a destilação da carga de 300 moles. Para uma especificação de produtos igual a 80 % e uma composição de alimentação de 0.60 octano / 0.25 nonano / 0.15 decano, por exemplo, o tempo no qual a coluna operou a refluxo total foi de .35 hs. A medida que a especificação foi aumentada, para esta

mesma faixa de composição, verificamos um aumento no tempo a refluxo total. Ao trabalharmos com especificação dos produtos de 80 % e com outra faixa de composição de alimentação (0.30 octano/ 0.30 nonano/ 0.40 decano) observamos que a coluna operou mais tempo a refluxo total. O tempo em que a coluna opera a refluxo total depende apenas da especificação dos produtos e da faixa da composição da alimentação.

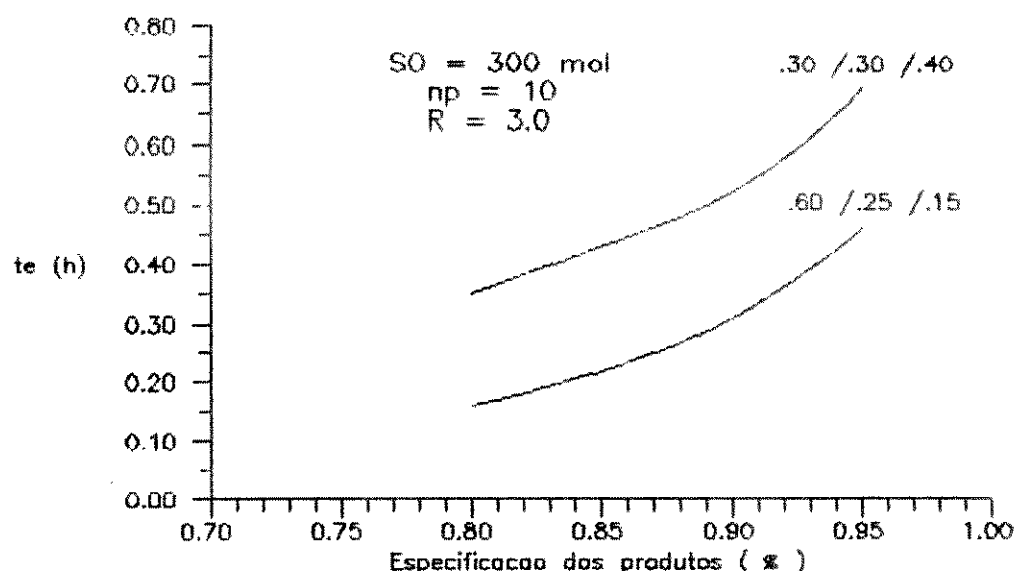


Figura 4.11 - Tempo de operação a refluxo total em função da especificação dos produtos

Os resultados obtidos para diferentes razões de refluxo e especificações de produto na destilação do sistema base estão

apresentados nas tabelas 11.0 a 17.0 do Apêndice 1.0. Observamos que a separação dos três componentes somente ocorreu para valores de razões de refluxo igual ou superior a 2.5. No entanto, para a segunda faixa de composição, a separação só ocorreu para valores de refluxo igual a 3.5 e 4.0 e para uma restrita faixa de especificação (80 % a 85 %).

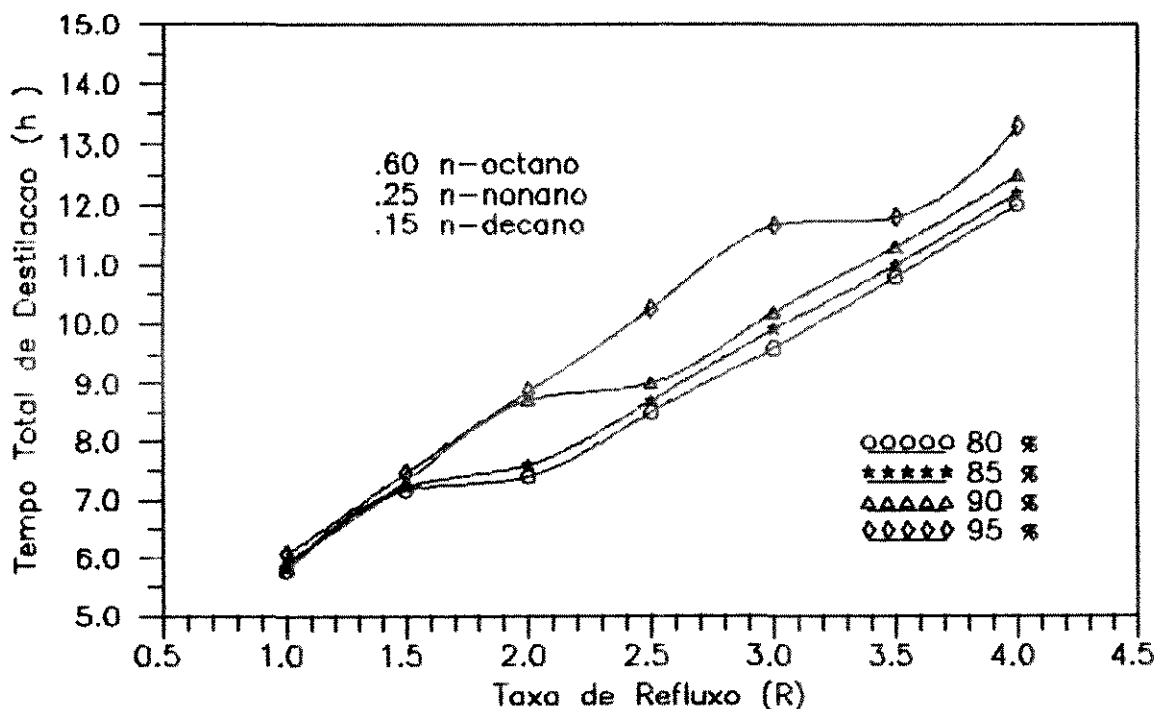


Figura 4.12 - Efeito da Especificação dos Produtos

A Figura 4.12 mostra o efeito da especificação dos produtos sob o tempo total de destilação para diferentes razões de refluxo. Como esperado, o efeito do aumento da pureza dos produtos de 80% a 90% ocasionou um aumento no tempo total de destilação (tf).

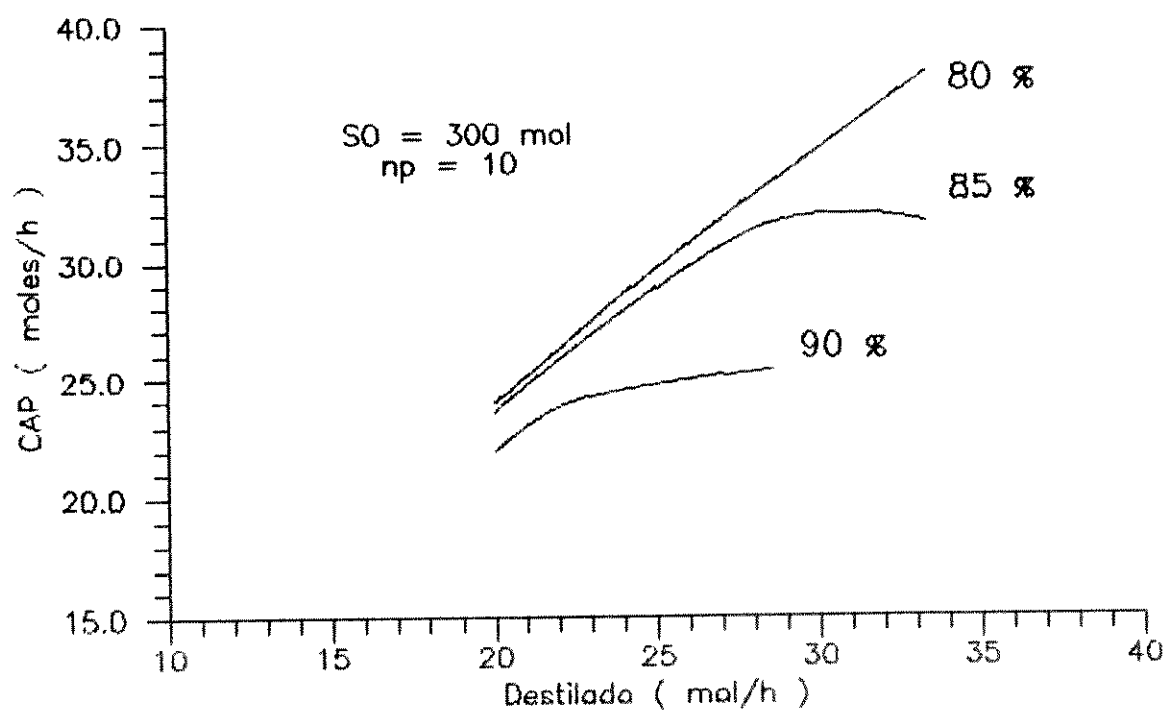


Figura 4.13 - Influência da especificação dos produtos sob o fator capacitador

Observamos também uma redução no fator capacitador (CAP), ou seja a medida que a especificação dos produtos foi aumentada verificamos uma redução na capacidade de separação da coluna (Figura 4.13).

Conclusão

Um estudo completo dos efeitos dos parâmetros operacionais, como número de pratos, quantidade da carga original líquida, razão de refluxo e volatilidade relativa sobre a separabilidade de um sistema ternário por destilação em batelada, foi realizado ao longo do capítulo 4.0 .

De acordo com as condições testadas observamos que para algumas combinações de número de pratos, taxa de refluxo e carga líquida inicial não foi possível obter a separação dos três produtos. Para uma dada combinação destes parâmetros operacionais, uma razão de refluxo mínima deve ser encontrada, de modo a permitir a separação desejada, sem que ocorra o esgotamento do material líquido no reboiler antes do final da destilação.

Para as condições de operação da coluna em que foi possível obter os três produtos, observamos que o número de pratos pouco influenciou o tempo necessário para concluir a destilação. Para baixos valores de razões de refluxo, apesar do baixo tempo necessário para finalizar a destilação nem sempre a separação dos produtos foi alcançada. Quanto aos tempos de retirada do primeiro e segundo produto, tp_1 e tp_2 respectivamente, e ao tempo de retirada da primeira fração intermediária, tf_1 , verificamos que também não ocorreram modificações muito significativas.

A possibilidade de atingir a separação desejada aumenta

com o número de pratos, mas a quantidade mínima de material adicionado inicialmente no reservador deve ser aumentada a medida que o número de pratos aumenta. Observamos que as quantidades dos produtos P_1 , P_2 , P_3 e que a quantidade da fração intermediária, F_1 , aumentaram praticamente na mesma razão que a carga líquida inicial.

Para o sistema em estudo verificamos que as quantidades das frações intermediárias diminuiu a medida que o número de pratos e razão de refluxo aumentou. Na operação da coluna com número de pratos superior a 40 e altas razões de refluxo, observamos que a separação dos três produtos ocorreu sem formação de frações intermediárias. Por outro lado, um aumento da taxa de destilado ocasionou uma redução no tempo total de destilação. Acima de um valor ótimo da taxa de destilado verificamos que a separação dos três componentes não foi possível. Tendo desta forma, uma redução na capacidade da coluna.

Baseado no conceito do Fator Capacitor (CAP) definido por Luyben foi possível analisar o desempenho da destilação em batelada do sistema ternário (octano / nonano / decano). A taxa ótima de destilado foi aquela na qual a capacidade da coluna (CAP) foi máxima. A partir dos resultados das várias simulações verificamos que tanto a capacidade quanto a taxa ótima de destilado aumentaram com o aumento do número de pratos. Por outro lado, associado a este aumento da taxa de destilado (diminuição

da razão de refluxo encontramos uma redução no tempo total de destilação. A combinação destes dois efeitos levou à uma redução nas quantidades de produtos, causando um aumento na capacidade até um valor máximo correspondente a taxa ótima de destilado.

As simulações foram realizadas para duas faixas de composições, 0.60/ 0.25/ 0.15 e 0.30/ 0.30/ 0.40 respectivamente. Para segunda faixa de composição, os valores correspondente as volatilidades relativas tornaram-se muito próximos impossibilitando a separação dos três produtos. Apesar de não alcançar a separação desejada, o tempo necessário para finalizar a destilação do sistema aumentou.

Quanto a especificação dos produtos, observamos que para altos valores de especificação a coluna operou mais tempo a refluxo total. No entanto, a capacidade de separação da coluna nesta situação sofreu uma sensível redução. O tempo de operação a refluxo total depende apenas da especificação dos produtos e da faixa da composição da alimentação.

A partir da análise dos resultados das várias simulações realizadas, pode-se notar que existe muitas condições de operação possíveis para a operação de uma coluna de destilação em batelada. Logo, faz-se necessário realizar uma análise rigorosa do conjunto de parâmetros operacionais tendo em vista a separação de todos produtos. É também importante ressaltar quais são as prioridades da unidade em questão bem como

quais são as quantidades e as especificações dos produtos esperadas, e o tempo viável para a realização da destilação.

A simulação do processo de destilação em batelada, neste trabalho, foi realizada para sistemas ideais. Uma sugestão para futuros trabalhos seria a realização de um estudo do desempenho da coluna de destilação em batelada para sistemas não ideais. Outra sugestão seria o estudo das estratégias de operação conhecidas durante a destilação em batelada de sistemas multicomponentes.

Apendice

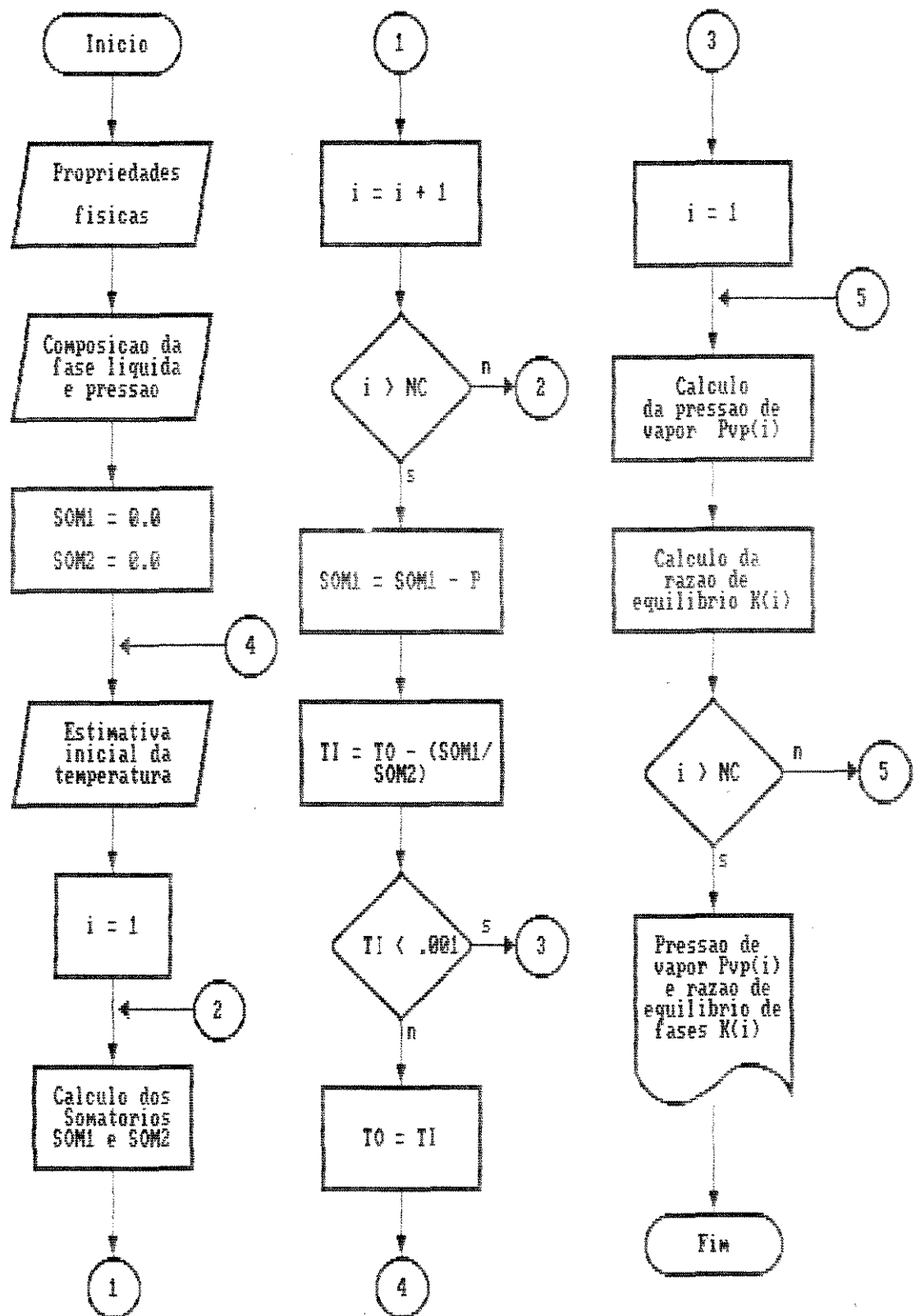


Figura 1.0 - Calculo da Pressao de vapor e da Razao de equilibrio

TABELA 1.0 - Efeito da Carga Líquida Inicial

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

R = 1.0 / np = 10 / Esp. Produtos = .90

	300	350	400	450	500	550	600
te (hr)	.31	.31	.31	.31	.31	.31	.31
P ₁ (mol /h)	135.5	154.5	174.5	194.5	215.50	234.50	254.50
tp ₁ (hs)	3.00	3.40	3.80	4.20	4.60	5.00	5.40
XP _{1,2}	.89887	.8933	.8995	.89975	.89926	.89994	.90000
XP _{1,2}	.09993	.0996	.0994	.09932	.09926	.09922	.09920
XP _{1,3}	.00120	.0010	.0010	.00094	.00088	.00084	.00080
F ₁ (mol /h)	165.4	195.5	225.5	255.5	285.55	315.60	354.60
tf ₁ (hs)	5.91	6.91	7.91	8.91	9.91	10.91	11.91
P ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tp ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
XP _{2,1}	—	—	—	—	—	—	—
XP _{2,2}	—	—	—	—	—	—	—
XP _{2,3}	—	—	—	—	—	—	—
F ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
XR ₁	—	—	—	—	—	—	—
XR ₂	—	—	—	—	—	—	—
XR ₃	—	—	—	—	—	—	—
tf (hs)	5.91	6.91	7.91	8.91	9.91	10.91	11.91

TABELA 2.0 - Efeito da Carga Líquida Inicial

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

R = 3.0 / np = 10 / Esp. Produtos = .90

	300	350	400	450	500	550	600
te (hr)	.31	.31	.31	.31	.31	.31	.31
P ₁ (mol /h)	194.72	227.25	259.78	292.28	324.80	357.33	389.83
tp ₁ (hs)	8.10	9.40	10.70	12.00	13.30	14.60	15.90
XP _{1,1}	.89561	.89658	.89713	.89747	.89768	.89780	.89784
XP _{1,2}	.10388	.10295	.10244	.10213	.10194	.10184	.10182
XP _{1,3}	.00052	.00047	.00043	.00040	.00038	.00036	.00035
F ₁ (mol /h)	22.53	25.00	27.50	32.52	35.03	37.53	42.52
tf ₁ (hs)	9.0	10.40	11.90	13.30	14.70	16.10	17.60
P ₂ (mol /h)	27.50	35.03	42.53	45.02	52.53	60.03	62.55
tp ₂ (hs)	10.10	11.80	13.50	15.10	16.80	18.50	20.10
XP _{2,1}	.03495	.03330	.03225	.03061	.03065	.03078	.02968
XP _{2,2}	.89463	.89413	.89247	.90000	.89711	.89424	.89882
XP _{2,3}	.07042	.07258	.07498	.06939	.07225	.07499	.07150
F ₂ (mol /h)	12.50	12.50	12.50	15.00	15.00	15.00	17.50
tf ₂ (hs)	10.20	11.90	13.60	15.30	17.00	18.70	20.40
P ₃ (mol /h)	42.78	50.27	57.76	65.24	72.73	80.20	87.62
XR ₁	.00000	.00001	.00001	.00001	.00001	.00002	.00002
XR ₂	.06071	.06885	.07517	.08020	.08427	.08756	.09018
XR ₃	.93929	.93115	.92482	.91979	.91571	.91243	.90980
tf (hs)	10.20	11.90	13.60	15.30	17.00	18.70	20.40

TABELA 3.0 - Efeito da Carga Líquida Inicial

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

R = 4.0 / np = 10 / Esp. Produtos = .90

	300	350	400	450	500	550	600
te (hr)	.31	.31	.31	.31	.31	.31	.31
P ₁ (mol/h)	195.80	229.82	263.84	295.86	327.88	361.90	393.92
tp ₁ (hs)	8.10	11.80	13.50	15.10	16.70	18.40	20.00
XP _{1,1}	.89986	.89705	.89474	.89765	.89991	.89776	.89949
XP _{1,2}	.09974	.10257	.10491	.10202	.09979	.10195	.10023
XP _{1,3}	.00004	.00037	.00035	.00032	.00030	.00029	.00027
F ₁ (mol/h)	14.02	14.80	14.00	16.00	18.00	20.00	22.00
tf ₁ (hs)	10.80	12.50	14.00	16.0	17.60	19.40	21.90
P ₂ (mol/h)	44.02	52.02	60.04	68.04	76.04	84.04	92.06
tp ₂ (hs)	12.50	14.60	16.70	18.00	20.90	23.10	25.20
XP _{2,1}	.03130	.02883	.02754	.02688	.02656	.02388	.02400
XP _{2,2}	.93172	.93478	.93613	.93675	.93651	.93170	.93134
XP _{2,3}	.03698	.03640	.03633	.03655	.36930	.04442	.04466
F ₂ (mol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol/h)	46.16	54.16	62.17	70.18	78.19	84.16	98.11
XR ₂	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
XR ₂	.05976	.08175	.07439	.09094	.09417	.08701	.08104
XR ₃	.94024	.91824	.92561	.90905	.90583	.91229	.91896
tf (hs)	12.50	14.60	16.70	18.80	20.90	23.10	25.20

TABELA 4.0 - Efeito da Carga Líquida Inicial

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

R = 1.0 / np = 20 / Esp. Produtos = .90

	300	350	400	450	500	550	600
te (hr)	.31	.31	.31	.31	.31	.31	.31
P ₁ (mol/h)	154.45	174.55	199.55	219.50	239.50	264.50	284.50
tp ₁ (hs)	3.40	3.80	4.30	4.70	5.10	5.60	6.00
XP _{1,1}	.89833	.89998	.89781	.89883	.89953	.89791	.89849
XP _{1,2}	.10095	.09938	.10163	.10066	.10002	.10167	.10112
XP _{1,3}	.00072	.00064	.00056	.00051	.00047	.00042	.00039
F ₁ (mol/h)	145.45	175.50	200.50	230.50	260.55	264.50	315.60
tf ₁ (hs)	5.71	6.71	7.71	8.71	9.71	10.71	11.71
P ₂ (mol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tp ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
XP _{2,1}	—	—	—	—	—	—	—
XP _{2,2}	—	—	—	—	—	—	—
XP _{2,3}	—	—	—	—	—	—	—
F ₂ (mol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
XR ₁	—	—	—	—	—	—	—
XR ₂	—	—	—	—	—	—	—
XR ₃	—	—	—	—	—	—	—
tf (hs)	5.71	6.71	7.71	8.71	9.71	10.71	11.71

TABELA 5.0 - Efeito da Carga Líquida Inicial

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

R = 3.0 / np = 20 / Esp. Produtos = .90

	300	350	400	450	500	550	600
te (hr)	.31	.31	.31	.31	.31	.31	.31
P ₁ (mol /h)	197.22	229.75	262.27	294.77	327.29	359.82	392.33
tp ₁ (hs)	8.20	9.50	10.80	12.10	13.40	14.70	16.00
XP _{1,1}	.89518	.89698	.89801	.89866	.89906	.89933	.89945
XP _{1,2}	.10457	.10280	.10180	.10118	.10006	.10053	.10042
XP _{1,3}	.00025	.00022	.00019	.00017	.00015	.00014	.00013
F ₁ (mol /h)	10.00	12.50	15.00	17.53	20.03	25.00	27.53
tf ₁ (hs)	8.60	10.00	11.40	12.80	14.20	15.70	17.10
P ₂ (mol /h)	45.03	52.53	57.52	65.02	72.52	77.55	85.05
tp ₂ (hs)	10.00	11.70	13.30	15.00	16.70	18.40	20.10
XP _{2,1}	.03436	.03195	.03234	.03175	.03150	.02894	.02909
XP _{2,2}	.95799	.95806	.96100	.95007	.95631	.95492	.95094
XP _{2,3}	.00764	.00998	.00666	.00918	.01219	.01614	.01997
F ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol /h)	47.78	52.27	65.25	72.74	80.23	87.71	95.13
XR ₁	.00000	.00000	.00001	.00001	.00001	.00002	.00001
XR ₂	.03262	.04181	.07276	.06620	.08140	.08455	.07796
XR ₃	.96738	.95819	.92723	.93380	.91858	.91544	.92203
tf (hs)	10.00	11.70	13.30	15.00	16.70	18.40	20.10

TABELA 6.0 - Efeito da Carga Líquida Inicial

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

R = 4.0 / np = 20 / Esp. Produtos = .90

	300	350	400	450	500	550	600
te (hr)	.31	.31	.31	.31	.31	.31	.31
P ₁ (mol/h)	197.79	231.82	263.82	297.87	329.89	363.92	395.94
tp ₁ (hs)	10.20	11.90	13.50	15.20	16.80	18.50	20.10
XP _{1,1}	.89788	.89550	.89937	.89697	.89967	.89754	.89954
XP _{1,2}	.10192	.10433	.10048	.10290	.10021	.10235	.10036
XP _{1,3}	.00020	.00017	.00015	.00013	.00012	.00012	.00011
F ₁ (mol/h)	4.00	4.00	6.00	4.00	6.00	6.00	10.00
tf ₁ (hs)	10.40	12.10	13.80	15.40	17.10	18.80	20.60
P ₂ (mol/h)	50.04	58.04	64.04	74.04	82.04	90.04	96.04
tp ₂ (hs)	12.40	14.50	16.50	18.50	20.70	22.80	24.90
XP _{2,1}	.02954	.02586	.02496	.02637	.02577	.02547	.02359
XP _{2,2}	.96733	.97106	.97348	.97193	.97229	.97227	.97368
XP _{2,3}	.00314	.00308	.00155	.00170	.00195	.00226	.00274
F ₂ (mol/h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol/h)	48.15	56.16	66.17	74.17	82.18	90.18	98.11
XR ₁	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
XR ₂	.01842	.02662	.04175	.04831	.05393	.05872	.06994
XR ₃	.98158	.97338	.95825	.95169	.94607	.94128	.93006
tf (hs)	12.40	14.50	16.50	18.60	20.70	22.80	24.90

TABELA 7.0 - Vazões dos produtos e das frações intermediárias

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

S0 = 300 / Especificação dos Produtos = .90

np	R	P ₁	F ₁	P ₂	F ₂	P ₃	t _f
10	1.0	134.55	165.45	0.00	0.00	0.00	5.91
20		154.55	145.45	0.00	0.00	0.00	5.71
40		174.35	54.95	25.00	0.00	45.49	5.20
60		189.55	29.95	80.50	0.00	0.00	4.91
10	1.5	175.60	124.44	0.00	0.00	0.00	7.31
20		183.60	116.44	0.00	0.00	0.00	7.06
40		191.60	28.00	34.00	0.00	46.42	6.40
60		195.60	12.00	92.44	0.00	0.00	6.06
10	2.0	186.33	113.73	0.00	0.00	0.00	8.71
20		193.0	26.67	33.30	0.00	47.47	7.60
40		196.33	10.00	46.63	0.00	47.07	7.60
60		199.66	0.00	100.37	0.00	0.00	7.21
10	2.5	191.11	34.29	8.57	24.31	41.75	9.00
20		196.83	14.29	41.46	0.00	47.47	8.80
40		199.68	2.86	50.03	0.00	47.40	8.80
60		199.68	0.00	100.34	0.00	0.00	8.36
10	3.0	194.72	22.53	27.50	12.50	42.78	10.20
20		197.22	10.00	45.03	0.00	47.78	10.00
40		199.72	0.00	52.52	0.00	47.47	10.00
60		199.72	0.00	100.30	0.00	0.00	9.51
10	3.5	195.33	17.78	41.13	0.00	46.00	11.30
20		197.56	6.67	47.80	0.00	48.21	11.20
40		199.78	0.00	52.24	0.00	48.03	11.20
60		199.78	0.00	100.29	0.00	0.00	10.66
10	4.0	195.80	14.02	44.02	0.00	46.16	12.50
20		197.79	4.00	50.04	0.00	48.15	12.40
40		199.80	0.00	52.04	0.00	48.14	12.40
60		199.80	0.00	100.20	0.00	0.00	11.81

TABELA 8.0 - Vazões dos produtos e das frações intermediárias

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

SO = 600 / Especificação dos Produtos = .90

np	R	P ₁	F ₁	P ₂	F ₂	P ₃	tf
10	1.0	254.50	342.60	0.00	0.00	0.00	11.91
20		284.50	315.60	0.00	0.00	0.00	11.71
40		314.50	285.60	0.00	0.00	0.00	11.30
60		339.45	125.05	40.00	0.00	95.56	10.20
10	1.5	347.60	252.44	0.00	0.00	0.00	14.91
20		363.60	236.40	0.00	0.00	0.00	14.56
40		375.60	76.04	48.04	10.00	90.31	12.80
60		383.60	56.04	62.04	0.00	98.29	12.60
10	2.0	373.03	227.10	0.00	0.00	0.00	17.91
20		383.03	60.03	46.70	26.67	83.68	15.50
40		389.68	40.03	73.37	0.00	97.00	15.10
60		393.03	23.37	86.70	0.00	97.00	15.10
10	2.5	385.49	62.89	28.57	41.46	81.68	18.10
20		388.35	42.89	78.60	0.00	90.28	17.80
40		394.02	20.03	87.17	0.00	98.85	17.50
60		396.90	2.86	101.46	0.00	98.84	17.50
10	3.0	389.83	42.52	62.55	17.50	87.62	20.40
20		392.33	27.53	85.05	0.00	95.13	20.10
40		397.31	7.50	97.55	0.00	97.65	20.00
60		397.31	0.00	105.05	0.00	97.67	20.00
10	3.5	393.22	28.89	87.87	0.00	90.11	22.80
20		395.44	15.56	92.27	0.00	96.85	22.50
40		397.63	0.00	103.38	0.00	99.07	22.40
60		399.84	0.00	101.15	0.00	99.07	22.40
10	4.0	393.92	22.00	92.06	0.00	92.07	25.20
20		395.94	10.00	96.04	0.00	98.11	24.90
40		397.90	0.00	104.04	0.00	98.13	24.90
60		399.89	0.00	102.04	0.00	98.15	24.90

TABELA 9.0 - Composições dos Produtos

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

50 = 300 / Especificação dos Produtos = .90

np	R	1º Produto			2º Produto			3º Produto		
		1	2	3	1	2	3	1	2	3
10	1.0	.89887	.09993	.00120	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
20		.89833	.10093	.00072	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
40		.89999	.09937	.00063	.05122	.90698	.04180	.00000	.00754	.97497
60		.89486	.10456	.00058	.06226	.93773	.00000	.00000	.00000	.00000
10	1.5	.89724	.10201	.00076	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
20		.89943	.10012	.00045	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
40		.89992	.09966	.00043	.03458	.95565	.00977	.00000	.00335	.99665
60		.89902	.10051	.00042	.04453	.95547	.00000	.00000	.00000	.00000
10	2.0	.89917	.10020	.00064	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
20		.89564	.10401	.00035	.04269	.92119	.03613	.00002	.06246	.93751
40		.89737	.10229	.00034	.03431	.96259	.00310	.00000	.00147	.99565
60		.88945	.11022	.00033	.03589	.96411	.00000	.00000	.00000	.00000
10	2.5	.89920	.10023	.00056	.04789	.89845	.05366	.00003	.09130	.90867
20		.89183	.10788	.00029	.03988	.94548	.01464	.00000	.04465	.95535
40		.88925	.11047	.00028	.02610	.97203	.00186	.00000	.00062	.99938
60		.89132	.10833	.00028	.02797	.97203	.00000	.00000	.00000	.00000
10	3.0	.89561	.10388	.00052	.03495	.89463	.07042	.00000	.06071	.93929
20		.89518	.10457	.00025	.03436	.95799	.00764	.00000	.03262	.96738
40		.89122	.10853	.00024	.02413	.97453	.00143	.00000	.00027	.99973
60		.89241	.10753	.00024	.02396	.97604	.00000	.00000	.00000	.00000
10	3.5	.89900	.10055	.00045	.03322	.91867	.04811	.00000	.06921	.93079
20		.89773	.10205	.00222	.03168	.96413	.00419	.00000	.02503	.97497
40		.89302	.10676	.00022	.02127	.97776	.00098	.00000	.00013	.99987
60		.89373	.10605	.00022	.02329	.97671	.00000	.00000	.00000	.00000
10	4.0	.89986	.09974	.00040	.03130	.93172	.03698	.00000	.05976	.94024
20		.89788	.10192	.00020	.02954	.96733	.00314	.00000	.01842	.98158
40		.89276	.10705	.00019	.01921	.97975	.00104	.00000	.00005	.99995
60		.89318	.10662	.00019	.02254	.97746	.00000	.00000	.00000	.00000

TABELA 10.0 - Composições dos Produtos

.60 n-octano / .25 n-nonano / .15 n-decano

50 = 600 / Especificação dos Produtos = .90

np	R	1º Produto			2º Produto			3º Produto		
		1	2	3	1	2	3	1	2	3
10	1.0	.90000	.09920	.00080	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
20		.89849	.10112	.00039	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
40		.89859	.10106	.00035	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
60		.89807	.10160	.00033	.04755	.90581	.04664	.00013	.05953	.94034
10	1.5	.89895	.10055	.00050	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
20		.89653	.10324	.00023	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
40		.89675	.10303	.00022	.03874	.87967	.08159	.00008	.07047	.92945
60		.89736	.10242	.00021	.03621	.96252	.00127	.00001	.03793	.96205
10	2.0	.89952	.10005	.00043	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000	.00000
20		.89682	.10300	.00018	.04533	.89280	.06168	.00006	.08308	.91686
40		.89783	.10200	.00017	.03402	.95903	.00695	.00004	.07239	.92757
60		.89996	.10097	.00017	.02947	.97025	.00028	.00000	.01890	.00000
10	2.5	.89672	.10288	.00040	.04052	.89674	.06274	.00004	.08766	.91230
20		.89988	.09997	.00015	.03078	.90666	.06256	.00003	.08029	.91968
40		.89847	.10134	.00014	.02986	.96954	.00060	.00000	.04664	.95335
60		.89797	.10188	.00014	.02465	.97532	.00003	.00000	.01192	.98808
10	3.0	.89784	.10182	.00035	.02968	.89882	.07150	.00002	.09018	.90980
20		.89945	.10042	.00013	.02909	.95094	.01997	.00001	.07796	.92203
40		.89634	.10353	.00012	.02442	.97528	.00030	.00000	.03023	.96977
60		.89977	.10010	.00012	.01593	.98404	.00003	.00000	.00593	.99407
10	3.5	.89738	.10231	.00031	.02629	.90897	.06474	.00001	.08509	.91491
20		.89790	.10199	.00011	.02700	.96573	.00726	.00000	.06943	.93056
40		.89829	.10160	.00011	.02136	.97858	.00006	.00000	.02369	.97631
60		.89598	.10391	.00011	.00926	.99073	.00001	.00000	.00394	.99606
10	4.0	.89949	.10023	.00027	.02400	.93134	.04466	.00000	.08104	.91896
20		.89954	.10036	.00010	.02359	.97368	.00274	.00000	.06994	.93006
40		.89931	.10060	.00010	.01481	.98513	.00006	.00000	.01602	.98398
60		.90676	.10134	.00010	.00611	.99388	.00001	.00000	.00207	.99793

TABELA 11.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

$SO = 300 / R = 1.0 / np = 10$

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
te (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P ₁ (mol /h)	223.58	96.10	209.45	84.37	194.72	69.40	175.92	47.78
tp ₁ (hs)	9.10	4.20	8.60	3.80	8.10	3.30	7.50	2.60
F ₁ (mol /h)	0.00	203.89	0.00	215.67	22.5	230.65	124.12	252.27
tf ₁ (hs)	—	11.56	—	11.63	9.00	11.73	11.66	11.89
P ₂ (mol /h)	22.50	0.00	42.52	0.00	27.50	0.00	0.00	0.00
tp ₂ (hs)	9.60	—	9.90	—	10.10	—	—	—
F ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	12.50	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	10.20	—	—	—
P ₃ (mol /h)	53.96	0.00	48.06	0.00	42.78	0.00	0.00	0.00
tf (hs)	9.60	11.56	9.90	11.63	10.20	11.73	11.66	11.89

TABELA 12.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

$$S0 = 300 / R = 1.5 / n_p = 10$$

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
te (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P ₁ (mol /h)	217.15	27.45	184.00	18.90	134.55	19.00	51.95	15.80
tp ₁ (hs)	4.50	0.90	3.90	0.80	3.00	0.90	1.50	1.0
F ₁ (mol /h)	82.85	272.55	116.00	281.10	165.45	281.00	248.05	284.20
tf ₁ (hs)	5.76	5.95	5.82	6.02	5.91	6.12	6.06	6.28
P ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tp ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—	—
F ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol /h)	—	—	—	—	—	—	—	—
tf (hs)	5.76	5.95	5.82	6.02	5.91	6.12	6.06	6.28

TABELA 13.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

SO = 300 / R = 2.0 / np = 10

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
te (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P ₁ (mol /h)	221.72	50.00	203.16	35.16	175.60	23.20	129.56	16.64
tp ₁ (hs)	5.70	1.60	5.30	1.30	4.70	1.10	3.70	1.10
F ₁ (mol /h)	78.32	250.04	96.88	264.88	124.44	276.84	170.48	283.48
tf ₁ (hs)	7.16	7.35	7.22	7.42	7.31	7.52	7.46	7.69
P ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tp ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—	—
F ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	—	—
P ₃ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf (hs)	7.16	7.35	7.22	7.42	7.31	7.52	7.46	7.69

TABELA 14.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

$SO = 300 / R = 2.5 / np = 10$

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
te (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P1 (mol /h)	221.43	75.00	205.97	55.97	186.33	39.37	161.27	23.90
tp1(hs)	6.80	2.60	6.40	2.10	5.90	1.70	5.30	1.40
F1 (mol /h)	0.00	244.10	19.97	244.10	113.73	260.70	138.80	276.17
tf1 (hs)	—	8.75	7.00	8.82	8.71	8.92	8.86	9.09
P2 (mol /h)	29.97	0.00	6.67	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tp2 (hs)	7.40	—	7.20	—	—	—	—	—
F2 (mol /h)	0.00	0.00	23.33	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
tf2 (hs)	—	—	7.60	—	—	—	—	—
Pa (mol /h)	48.64	—	44.11	—	—	—	—	—
tf (hs)	7.40	8.75	7.60	8.82	8.71	8.92	8.86	9.09

TABELA 15.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

$SO = 300 / R = 3.0 / n_p = 10$

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
t_e (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P_1 (mol /h)	224.06	90.00	207.94	73.69	191.11	56.60	172.51	34.77
tp_1 (hs)	8.00	3.50	7.50	3.00	7.00	2.50	6.50	1.90
F_1 (mol /h)	0.00	210.06	8.57	226.37	34.29	243.46	127.54	265.29
tf_1 (hs)	—	10.15	7.80	10.22	8.20	10.32	10.26	10.49
P_2 (mol /h)	24.29	0.00	35.71	0.00	8.57	0.00	0.00	0.00
tp_2 (hs)	8.50	—	8.70	—	8.50	—	—	—
F_2 (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	24.31	0.00	0.00	0.00
tf_2 (hs)	—	—	—	—	9.00	—	—	—
P_3 (mol /h)	51.70	0.00	47.81	0.00	41.75	0.00	0.00	0.00
tf (hs)	8.50	10.15	8.70	10.22	9.00	10.32	10.26	10.49

TABELA 16.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

SO = 300 / R = 3.5 / np = 10

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
te (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P ₁ (mol /h)	225.40	101.09	210.64	90.62	195.33	77.33	178.60	60.38
tp ₁ (hs)	10.30	4.90	9.70	4.50	9.10	4.00	8.50	3.40
F ₁ (mol /h)	0.00	24.44	0.00	209.44	17.78	222.71	48.93	239.69
tf ₁ (hs)	—	6.00	—	13.02	9.90	13.12	10.70	13.29
P ₂ (mol /h)	21.13	30.00	38.91	0.00	41.13	0.00	4.44	0.00
tp ₂ (hs)	10.80	6.90	11.00	—	11.30	—	10.90	—
F ₂ (mol /h)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	30.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	—	—	—	—	—	11.80	—
P _a (mol /h)	53.52	144.50	50.50	0.00	46.00	0.00	38.08	0.00
tf (hs)	10.80	6.90	13.02	11.00	13.12	11.30	13.29	11.80

TABELA 17.0 - Efeito da Pureza dos Produtos

SO = 300 / R = 4.0 / np = 10

(a).60 n-octano /.25 n-nonano /.15 n-decano

Volatilidade 4.0 / 2.0 / 1.0

(b).30 n-octano /.30 n-nonano /.40 n-decano

Volatilidade 3.67 / 1.87 / 1.0

	.80		.85		.90		.95	
	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)	(a)	(b)
te (hs)	.16	.35	.22	.42	.31	.52	.46	.69
P ₁ (mol/h)	224.88	102.98	209.60	93.56	195.80	81.60	180.80	66.34
tp ₁ (hs)	11.40	5.50	10.70	5.10	10.10	4.60	9.50	4.00
F ₁ (mol/h)	0.00	16.00	0.00	36.00	14.02	218.40	40.02	233.60
tf ₁ (hs)	—	6.30	—	6.90	10.80	14.52	11.50	15.68
P ₂ (mol/h)	22.00	35.98	40.00	19.98	44.02	0.00	20.02	0.00
tp ₂ (hs)	12.00	7.60	12.20	7.90	12.50	—	12.50	—
F ₂ (mol/h)	0.00	35.98	0.00	16.00	0.00	0.00	20.00	0.00
tf ₂ (hs)	—	7.60	—	7.90	10.20	—	13.00	—
P ₃ (mol/h)	53.12	145.03	50.40	134.35	46.16	0.00	39.20	0.00
tf (hs)	12.00	7.60	12.20	8.20	12.50	14.52	13.30	15.68

- 1 - Treyball, R. E., " A Simple Method for Batch Distillation ",
Chem. Eng., October 5, 1970, pp. 95-98.
- 2 - Coates, J.; Pressburg, B., S., " How Analyze the Calculations
for Batch Rectification in Tray Columns ", Chem. Eng., January
23, 1961, pp. 131-136.
- 3 - Block, B., " Batch Distillation of Binary Mixtures Provides
Versatile Process Operations " , Chem. Eng., February 6, 1961,
pp. 87-98.
- 4 - Guy, J. L. , " Modeling Batch Distillation in Multitray
Columns ", Chem. Eng., January 10, 1983, pp. 99-103.
- 5 - Bauerle , G. L. ; Sandall , O. C. , " Batch Distillation of
Binary Mixtures at Minimum Reflux " , AIChE J., June 1987,
Vol. 33, No. 6, pp. 1034-1036.
- 6 - Luyben , W. L. , " Some Practical Aspects of Optimal Batch
Distillation Design ", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. ,
1971, 10, pp. 54-59.
- 7 - Luyben , W. L., " Multicomponent Batch Distillation. 1.
Ternary Systems with Slop Recycle ", Ind. Eng. Chem. Res. 1988,
27, pp. 642-647.
- 8 - Meadows , E. L. , " Multicomponent Batch Distillation
Calculations on a Digital Computers " , Chem. Eng. Progr.
Sump. Ser. , 1963, No. 46, 59, 48.
- 9 - Distefano , G. P. , " Mathematical Modeling and Numerical
Integrating of Multicomponent Batch Distillation Process ",

AICHE J., 1968, 14, 190.

- 10 - Stewart, R. R. ; Weisman, E. ; Goodwin, B. M. ; Speigt , C. E.
" Effect of Design Parameters in Multicomponent Batch Distillation ", Ind. Eng. Chem. Des.Dev.,1973, Vol.12, No.2, pp. 130-136.
- 11 - Converse, A. O. ; Gross, G. D. , " Optimal Control of an Distillation Column " , Ind. Eng. Chem. Fund. , 1963, 2, pp. 217-221.
- 12 - Murty, B. S. N. ; Gabngiah, K. ; Hunsain, A., " Perfomance of Various Methods in Computing Optimal Control Policies ", Chem. Eng. J. , 19, 1980, pp. 201-208.
- 13 - Robinson, E. R. , " The Optimization of Batch Distillation Operations ", Chem. Eng. Sci. ,1969, Vol. 24, pp. 1661-1668.
- 14 - Robinson, E. R. , " The Optimal Control of an industrial Batch Distillation Column " , Chem. Eng. Sci. ,1970, Vol.25, pp. 921-928.
- 15 - Mayur , D. N. ; May , R. A. ; Jackson , R. , Chem. Eng. J. , 1970, 1, 15.
- 16 - Kerkhof, L. H. J. ; Vissers, H. J. M. , " On The Profit of Optimum Control in Batch Distillation " ,Chem. Eng. Sci. , 1978, Vol. 3 , pp. 961-970.
- 17 - Mayur, D. N. , Chem. Eng. J. , 1971, 2, 150.
- 18 - Egly, H. ;Ruby, V.;Seid, B. ; " Optimun Design and Operation of Batch Rectification Accompanied by Chemical Reaction " ,

- Comp. Chem. Eng. , Vol. 3 , 1979, pp. 169-174.
- 19 - Hansen , T. T. ; Jorgensen , S. B. , " Optimal Control of Binary Batch Distillation in Tray or Packed Columns " , Chem. Eng. J. , 33 , 1986, pp. 151-155.
- 20 - Rose, A. ; O'Brien, V. J. Jr. , " Effect of Holdup - charge Ratio in Laboratory Ternary Batch Distillation " , Ind. Chem. , 1953, 44, 1480.
- 21 - Weissberger , A. , " Technique of Organics Chemistry - Distillation " , Vol. IV , pp. 1-229 , Wiley , New York , 1965.
- 22 - Dikemar, U. M. , Malik, R. K. , Madhavan, K. P. , " Optimal Reflux Rate Policy Determination for Multicomponent Batch Distillation Columns " , Comp. Chem. Eng. , Vol. 11, No. 6, 1987, pp. 629-637.
- 23 - Galindez, H. ; Fredenslund, A. , " Simulation of Multicomponent Batch Distillation Processes " , Comp. Chem. Eng. , Vol. 12, No. 4, 1988, pp. 281-288.
- 24 - Domenech, S. ; Enjalbert, M. , " Program for Simulating Batch Rectification as a Unit Operation " , Comp. Chem. Eng. , Vol. 5, No. 3, 1981, pp. 181-184.
- 25 - Boston, J. F. , Britt, H. I. , Jirapongphan, S. ; Shah, V. B. , " An Advanced System for the Simulation of Batch Distillation Operations " , Found. Comput.-Aided Chem. Process Des. , 1981, 2 , 203.

- 26 - Luyben, W. L. ; Quintero-Marmol, E. , " Multicomponent Batch Distillation. 2. Comparison of Alternative Slop Handling and Operating Strategies " , Ind. Eng. Chem. Res., 1990, 29, pp. 1915-1921.
- 27 - Luyben W. L. ; Al-Tuwaim , M. S. , " Multicomponent Batch Distillation. 3. Shortcut of Design of Batch Distillation Columns " , Ind. Eng. Chem. Res. , 1991, 30 , pp. 507-516.
- 28 - Reid, R. C. ; Prausnitz, J. M. ; Poling, B.E. , " The properties of Gases and Liquids " , McGarry-Hill, 3^o Edition.
- 29 - McGarry, J. ; Ind. Eng. Chem. Process Design Dev., 22, 313, 1983.

Nomenclatura

A, B, C = Constantes da equação de Antoine

D = Vazão de Destilado

F_1 = Quantidade da primeira fração intermediária

F_2 = Quantidade da segunda fração intermediária

K = Razão de equilíbrio

L = Vazão molar do líquido

L_o = Vazão de refluxo

M_j = Acúmulo molar de líquido em cada prato

M_c = Acúmulo molar de líquido no tambor de refluxo

M_{R_0} = Acúmulo molar inicial de líquido no reservador

n_c = número de componentes

n_p = número de pratos

P = Pressão parcial

P_{abs} = Pressão absoluta do sistema

P_c = Pressão Crítica

P_T = Pressão Total

P_{vp} = Pressão de vapor

P_1 = Quantidade do primeiro produto

P_2 = Quantidade do segundo produto

P_3 = Quantidade do terceiro produto

R = Razão de refluxo

S_0 = Quantidade da carga líquida inicial

T = Temperatura

T_c = Temperatura crítica

t_e = Tempo no qual a coluna operada a refluxo total

t_{f1} = Tempo final da retirada da primeira fração intermediária

t_{f2} = Tempo final da retirada da segunda fração intermediária

t_{p1} = Tempo final da retirada do primeiro produto

t_{p2} = Tempo final da retirada do segundo produto

t_f = Tempo total de destilação

V = Vazão molar total do vapor

$VP\ A, VP\ B, VP\ C, VP\ D$ = Constantes da equação de Wagner

x = Fração molar na fase líquida

x_d = Fração molar do destilado

$X_{i,j}$ = Fração molar do componente "i" no prato "j"

X_{B0_i} = Composição inicial do componente i

X_{D_i} = Composição do componente i no destilado

$X_{D_1}^{ESP}$ = Composição especificada para o 1º produto

$X_{D_2}^{ESP}$ = Composição especificada para o 2º produto

$\bar{X}_D$ = Composição média especificada

$X_{Fm,i}$ = Composição do componente "i" na "mº" fração intermediária

$X_{Pn,i}$ = Composição do componente "i" no "nº" produto

X_R = Composição instantânea no retervedor

$X_{R_3}^{ESP}$ = Composição especificada para o 3º produto

X_{R_i} = Composição do componente i no retervedor

y = fração molar na fase gasosa

LETRAS GREGAS

α = Volatilidade relativa

SUBSCRITOS

i = componente

j = estágio

k = componente