

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
PRÓ-REITORIA PARA ASSUNTOS DO INTERIOR
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DE VAPOR PARA PRODUÇÃO DE
ACETONA

MARIA DO SOCORRO AVELINO MARTINS

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA
1994

MARIA DO SOCORRO AVELINO MARTINS

SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DE VAPOR PARA PRODUÇÃO DE
ACETONA

Dissertação apresentada ao Curso
de Mestrado em Engenharia Química
da Universidade Federal da Paraíba,
em cumprimento às exigências
para obtenção do Grau de Mestre.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: OPERAÇÕES E PROCESSOS

ORIENTADOR : PROF. Dr. MICHEL FRANÇOIS FOSSY

CO-ORIENTADOR : PROF. NAGEL ALVES COSTA (M.Sc.)

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA



M386s

Martins, Maria do Socorro Avelino.

Simulação do processo de destilação com recompressão mecânica de vapor para produção de acetona / Maria do Socorro Avelino Martins. - Campina Grande, 1994.

72 f.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 1994.

Referências.

"Orientação : Prof. Dr. Michel François Fossy, Prof. M.Sc. Nagel Alves Costa".

1. Acetona. 2. Acetona - Produção. 3. Redução do Consumo Energético. 4. Dissertação - Engenharia Química. I. Fossy, Michel François. II. Costa, Nagel Alves. III. Universidade Federal da Paraíba - Campina Grande (PB). IV. Título

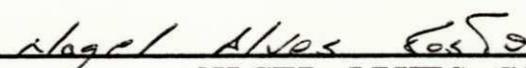
CDU 661.727.4(043)

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DE VAPOR PARA PRODUÇÃO DE
ACETONA**

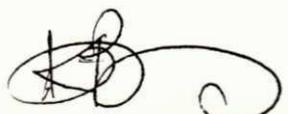
DISSERTAÇÃO APROVADA EM: 28 / Dezembro / 1994



MICHEL FRANÇOIS FOSSY
Professor Orientador



NAGEL ALVES COSTA
Professor Co-Orientador



KEPLER BORGES FRANÇA
Examinador



FLÁVIO LUIZ H. SILVA
Examinador

DEDICATÓRIA

A DEUS, por sua grandeza e sapiência.

A MANOEL MARTINS DE OLIVEIRA (IN MEMORIAM) e

ANA AVELINO DE OLIVEIRA, meus pais, pelo carinho,
respeito e admiração.

A ALBERTO BEZERRA SILVA, meu esposo, pela compreensão e
afeto.

ANA CAROLINA MARTINS SILVA, minha filha, pela sua
inestimável existência.

AGRADECIMENTOS

Aos Professores MICHEL FRANÇOIS FOSSY e NAGEL ALVES COSTA, pela orientação no desenvolvimento deste trabalho.

Ao Professor KEPLER BORGES FRANÇA, Coordenador do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química, pela amizade e força.

À Coordenação de Pós-Graduação, nas pessoas de MARIA JOSÉ BEZERRA e MARICÉ PEREIRA SILVA, pelo carinho, compreensão, apoio e paciência.

As amigas Líbia de Souza Conrado e Thalma Líbia, pela amizade sincera, incentivo e colaboração, na elaboração deste trabalho.

Aos professores e alunos do Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Ao CNPq.

RESUMO

O objetivo do presente trabalho é a redução do consumo energético da produção da Acetona. O estudo foi dividido em duas partes: Destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor. A primeira parte visa a obtenção da localização ótima do prato de alimentação, e também a faixa de análise em relação ao número de estágios. A segunda parte é dirigida para comparar os resultados obtidos com os sistemas mencionados acima, em função da influência do número de estágios, composições da alimentação, da recompressão do vapor sobre o trabalho de compressão. Através destes resultados a eficiência em termos energéticos foi observada, e concluiu-se que o sistema de compressão apresentou um menor consumo energético.

ABSTRACT

The objective of this work is to decrease the energetic consumption in the production of Acetone. It was divided in two parts: Convectonal distillation and recompression mechanic vapour distillation. The first was to locate the optimum position to feed plate and also to analyse the range related with stages number. The second part concerns to compare the results obtained from both system as a function of stages number influence, feed compositions and vapour recompression in the compression work. From these results the efficiency was observed and concluded that compression system was more economic in term of energy consumption.

SIMBOLOGIA

Símbolo	Definições
a	Parâmetro da Equação de Soave-Redlich-Kwong;
a_{ij}	Parâmetro binário de interação;
A	Energia livre de Helmholt no estado Real;
A_j	Coeficiente da Equação (2.8) no estágio j ;
A°	Energia livre de Helmholt no estado ideal;
b	Parâmetro da Equação de Soave-Redlich-Kwong;
B_j	Coeficiente da Equação (2.7) no estágio j ;
C_j	Coeficiente da Equação (2.7) no estágio j ;
C_p	Capacidade calorífica a pressão constante;
C_v	Capacidade calorífica a volume constante;
D_j	Coeficiente da Equação (2.7) no estágio j ;
E_{ij}	Equações de Equilíbrio do componente i no estágio j . Equação (2.2);
F_j	Fluxo de Alimentação no estágio j ;
F_i	Fugacidade do componente i puro;
F_i^L	Fugacidade do componente i puro na fase líquida;
F_i°	Fugacidade do componente i no estado padrão;
F_i^{sat}	Fugacidade do componente i na temperatura de saturação;

Símbolo

Definições

\hat{F}_i^L	Fugacidade do componente i na fase líquida.
\hat{F}_i^V	Fugacidade do componente i na fase vapor;
G_i	Energia livre de Gibbs do componente i puro;
H	Entalpia real;
H°	Entalpia ideal;
H_j	Equação do balanço de energia no estágio j; Equação (2.5);
$H_{F,j}$	Entalpia da alimentação no estágio j;
$H_{L,j}$	Entalpia do líquido no estágio j;
$H_{V,j}$	Entalpia do vapor no estágio j;
$K_{i,j}$	Constante de equilíbrio do componente i no estágio j;
i	Constante do componente puro para o cálculo da contribuição combinatorial;
L_j	Fluxo molar de líquido no estágio j;
$M_{i,j}$	Equação do balanço de massa do componente i no estágio j;
n	Expoente da Equação (2.36);
N	Número de estágios;
P	Pressão do sistema;

Símbolo	Definições
p_i^{sat}	Pressão de vapor do componente i;
q_i	Parâmetro de área do componente i;
Q_j	Quantidade de calor no estágio j;
r_i	Parâmetro de volume do componente i;
R	Constante dos gases;
R_D	Fator de incrustação;
S	Entropia no estado real;
S^o	Entropia no estado ideal;
T	Temperatura do sistema;
T_j	Temperatura do estágio j;
V	Volume do sistema;
V_i	Volume do componente i puro;
$X_{i,j}$	Composição molar do componente i no estágio j;
Z	Fator de compressibilidade;
$Z_{i,j}$	Número de coordenação da molécula;
W	Fator acêntrico;
W_c	Trabalho de compressão;
W_{is}	Trabalho isotérmico;
W_j	Fluxo de retirada de vapor no estágio j;
W_k	Trabalho adiabático;
W_p	Trabalho politrópico;
W_{real}	Trabalho real.

Símbolos Gregos

α	Coefficiente da equação da matriz didiagonal (Equação A-3.5).
β	Coefficiente da equação da matriz diadiagonal (Equação A-3.5).
γ_i	Coefficiente de atividade do componente i.
γ_j	Coefficiente da equação da matriz diadiagonal (Equação A-3.5).
θ_i	Fração de volume do componente (método UNIFAC)
μ	Potencial químico.
μ°	Potencial químico em um estado de referência.
ν_{ki}	Número de grupos do tipo k na molécula i.
ϕ_i^V	Coefficiente de fugacidade do componente i na fase vapor.
ϕ_i^L	Coefficiente de fugacidade do componente i na fase líquida.
ϕ	Fração de área do componente i (método UNIFAC).
ν_{ki}	Número de grupos do tipo k na molécula i.

ÍNDICE

		Páginas
CAPÍTULO I	- INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II	- FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	4
2.1	- Simulação.....	4
2.1.1	- Modelos matemáticos.....	5
2.2	- Destilação.....	7
2.2.1	- Conceito de estágio de equilíbrio.	8
2.2.2	- Economia de energia de destilação.	8
2.2.3	- Métodos rigorosos de destilação...	20
2.2.3.1	- Estrutura do problema - equação MESH.....	20
2.2.4	- Matriz tridiagonal.....	25
2.2.4.1	- Cálculo das composições.....	25
2.2.5	- Método do ponto de bolha (Bubble- Point BP)).....	27
2.3	- Equilíbrio Líquido-Vapor em Siste- mas Miscíveis.....	31
2.3.1	- Modelos para cálculo do equilíbrio- vapor.....	31
2.3.1.1	- Modelo ASOG (Analytical Solutions of Groups).....	33
2.3.1.2	- Modelo UNIQUAC (Universal Quasi Chemical).....	33

		Páginas
2.3.1.3	- UNIFAC (Uniquac Functional Group Activity Coefficients).....	33
2.4	- Sistema de Compressão.....	34
2.4.1	- Teoria de compressão.....	35
2.4.2	- Trabalho de compressão.....	35
CAPÍTULO III	- MATERIAIS E MÉTODOS.....	38
3.1	- Material Utilizado.....	38
3.2	- Metodologia da Simulação.....	38
3.3	- Métodos Utilizados pelo Simulador.	42
3.3.1	- Torre de destilação.....	42
3.3.2	- Sistema de compressão.....	43
3.3.3	- Trocador de calor.....	44
3.3.4	- Válvula.....	44
3.3.5	- Divisor.....	45
3.4	- Propriedades Termodinâmicas.....	45
3.4.1	- Cálculos do equilíbrio de fases...	45
3.4.2	- Equação de estado.....	47
3.4.2.1	- Aplicação.....	47
3.4.3	- Métodos do coeficiente de fugacidade.....	47
3.4.4	- A pressão de vapor.....	49
3.4.5	- Modelo UNIFAC.....	50
CAPÍTULO IV	- RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	52
4.1	- Destilação Convencional.....	52
4.1.1	- Localização da alimentação.....	52

		Páginas
4.1.2	- Razão de refluxo.....	56
4.1.3	- Composição da alimentação.....	58
4.2	- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (MVR).....	59
4.2.1	- Número de estágios.....	59
4.2.2	- Composição da alimentação.....	61
4.2.3	- Compressão do vapor.....	63
4.3	- Economia de Energia.....	64
CAPÍTULO V	- CONCLUSÃO.....	66
CAPÍTULO VI	- SUGESTÕES.....	68
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	69
	APÊNDICE A	
	APÊNDICE B	

INTRODUÇÃO

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

- A indústria química é um setor industrial caracterizado pelo uso intensivo de energia, especialmente de energia térmica. Com os significativos aumentos do petróleo, principal fonte desse tipo de energia, a indústria química foi particularmente atingida nos seus custos operacionais. Embora suas matérias-primas, a maioria derivados do petróleo, também tenham aumentado de preço, o aumento no preço dos combustíveis foi proporcionalmente maior.

Essa mudança de estrutura de preços, particularmente no dos combustíveis, mudou significativamente a relação entre os custos de investimento e os custos de operação nos dias de hoje, porém justificam-se maiores investimentos em favor de um menor consumo de energia.

- O consumo de vapor vivo nas indústrias químicas pode ser fortemente reduzido ou mesmo suprido pela instalação de um sistema de compressão mecânica dos vapores.

Esse método de economia de energia por compressão mecânica dos vapores está bem longe de ser novo. As primeiras definições identificadas são constituídas por uma patente de PELLETAN registrada por volta de 1830, porém sua aplicação tecnológica somente adquiriu importância a partir da década de 70, com a crescente elevação dos custos energéticos.

- Na atualidade, onde o grande desafio é a conservação de energia, a destilação com recompressão mecânica do vapor (MVR) e integração térmica das correntes, assume um papel fundamental no sentido de racionalização de energia nos processos de destilação.

- A disponibilidade de computadores eletrônicos de grande porte tornou possível a solução rigorosa do modelo de estágios de equilíbrio de uma coluna de destilação em vários estágios, operando com um sistema multicomposto. O procedimento geral consiste em resolver alternadamente as equações de balanço material e as relações de equilíbrio até que o valor correto para o conjunto de vazão, temperatura e de composições tenham sido encontrados. A exatidão da solução é apenas limitada, entre outros fatores pela exatidão dos dados de equilíbrio de fase e de entalpia, sendo assim de fundamental importância, trabalhar com métodos termodinâmicos representativos do sistema projetado/simulado.

O presente trabalho está dividido em duas partes: destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor: o principal objetivo é otimizar em termos energéticos.

A primeira parte, visa a obtenção da localização ótima do prato de alimentação e também a razão de refluxo ótima de operação. A segunda parte, analisa a influência do número de estágios, das composições da alimentação e razão de compressão sobre o trabalho do compressor. Em seguida, analisa a economia de

energia, comparando os resultados dos modelos com recompressão mecânica do vapor com os obtidos a partir da destilação convencional.

CAPÍTULO II

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 - Simulação

Segundo Satyro (1990), simulação é a utilização de modelos matemáticos, de maneira que os mesmos reproduzam o comportamento real do sistema. É essencial em sistemas que necessitem de um conjunto muito grande de equações par a sua descrição, com vários ciclos e alimentações, cálculos iterativos, integrações, acesso ao banco de dados, etc.

Os simuladores de processo são utilizados de várias maneiras, desde avaliações preliminares de um processo até a análise da operação de uma mistura de produção. Já que cada emprego impõe uma exigência diferente sobre o sistema de simulação, é indispensável que este tenha eficiências diversificadas.

De acordo com Perry & Chilton (1985), o sistema de simulação deve fornecer ao usuário estimativas seguras sobre o tamanho dos equipamentos, as cargas de aquecimento e resfriamento, os níveis de temperatura na rejeição de calor, as

exigências de potência, de modo a se tornar possível uma avaliação confiável dos custos de instalação e produção. Além disso, o resultado da avaliação preliminar deve ter uma qualidade tal qual os seus dados possam servir de ponto de partida para o planejamento final. O projeto final inclui o planejamento detalhado das unidades de operação e o emprego de círculos rigorosos no balanço de calor e de massa de cada unidade.

2.1.1 - Modelos matemáticos

Satyro (1990), diz que o modelo matemático é aquele que reproduz o sistema abstratamente, ou seja, representa a realidade por meio de equações matemáticas.

São divididos em dois grupos, os modelos matemáticos:

- Modelos com parâmetros concentrados: onde a distribuição do sistema espacial não importa;

- Modelos com parâmetros distribuídos: onde a distribuição espacial é importante.

As equações utilizadas na elaboração de modelos matemáticos são mostrados na Tabela 2.1, abaixo:

Tabela 2.1 - Equações utilizadas nos modelos matemáticos.

Equação	Descrição
Transporte	São as equações que descrevem as taxas de transporte de energia, massa e momento.
Termodinâmica	São as equações derivadas da termodinâmica clássica (entalpia, entropia, calores de reação, equilíbrio de fases, etc...)
Balanço	São as equações que descrevem os balanços de massa e energia de um determinado sistema.
Cinéticas	São as equações que representam o comportamento cinético de um sistema químico reativo. Normalmente são equações com coeficientes a serem determinados empiricamente, ajustados ao comportamento de uma determinada reação química.
Empíricas	São as equações baseadas em observações experimentais (equações para representação de propriedades, regras de misturas, etc...).
Semi-empíricas	São as equações deduzidas a partir da teoria, mas contém coeficientes ajustados empiricamente por um procedimento estatístico qualquer (equação de Antoine par pressão de vapor, equação de Wilke para a viscosidade de gases, etc...).

2.2 - Destilação

Segundo Foust et alii (1982), o processo de separação mais amplamente usado na indústria química é a destilação. Esta operação unitária é também denominada fracionamento ou destilação fracionada. A separação dos constituintes está baseada nas diferenças de volatilidade, uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida, e há transferência de massa do líquido para o vapor e deste para aquele. O líquido e o vapor contém, em geral, os mesmos componentes, mas em quantidade relativas diferentes. O líquido está em seu ponto de bolha (é a temperatura na qual principia a vaporização, ou seja, é a temperatura onde ocorre o aparecimento da primeira bolha de vapor no líquido), e o vapor em equilíbrio no seu ponto de orvalho (é a temperatura na qual principia a condensação, ou seja, é a temperatura onde ocorre o aparecimento da primeira gota de líquido no vapor). Havendo transferência simultânea de massa do líquido pela vaporização e do vapor por condensação, o efeito final é o aumento da concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido.

2.2.1 - Conceito de estágio de equilíbrio

O modelo de estágio de equilíbrio, afirma que as correntes de líquido e de vapor que deixam um estágio de equilíbrio estão em completo equilíbrio uma com a outra e se podem usar as relações termodinâmicas para determinar as concentrações das duas correntes.

A adoção do modelo de estágio de equilíbrio divide o projeto de uma torre de destilação em três partes:

- Reunião de dados e métodos termodinâmicos necessário para prever as composições das fases em equilíbrio;
- Cálculo do número de pratos teóricos necessário para realizar a separação especificada;
- A conversão do número de estágios de equilíbrio ao número equivalente de práticas reais, Perry & Chilton (1980).

2.2.2 - Economia de energia de destilação

Estimativas indicam que 25 a 40% do total de energia consumida pelas indústrias, é usada para o funcionamento dos equipamentos de destilação, Rush Jr. (1980).

Segundo Weinstein (1985), três áreas devem ser consideradas quando nos defrontamos com o problema de conservação de energia em processos de destilação:

1 - Melhorias operacionais em colunas existentes, com pequenos investimentos (taxa de refluxo, ponto de alimentação, isolamento térmico, pré-aquecimento de alimentação, controle, efeito da pressão de operação, incrustação), etc;

2 - Modificações extensas no equilíbrio existente (integração térmica em uma mesma coluna, integração térmica com outras correntes de processo, destilação extrativa);

3 - Outros processos de separação como alternativa à destilação (extração líquido-líquido, adsorção, etc).

O consumo específico global de energia na destilação pode ser fortemente reduzido pela instalação de um sistema, de compressão mecânica dos vapores ou através da integração térmica das correntes.

Vários pesquisadores (Null (1976), Mostafa (1981), Quadri (1981), Collura (1988)), estudaram sobre a destilação com recompressão do vapor e todos eles mostraram que é viável economicamente quando as seguintes condições forem satisfeitas:

1 - a energia não é disponível de outras fontes de processos;

2 - baixas temperaturas requeridas para a refrigeração;

3 - baixas temperaturas de operação (limitação térmica do compressor);

4 - Pressão moderada;

5 - Diferença de temperatura entre topo e fundo da coluna é pequena.

Então, a maioria das aplicações práticas da técnica de destilação MVR ocorre em sistemas binários onde a separação é difícil (baixa volatilidade relativa), Muhrel et alii (1990), exigindo um grande número de estágios, alta razão de refluxo e conseqüentemente alto consumo energético, Ferré (1985).

Weinstein (1985), apresenta dois esquemas para transferir o calor do topo para base da coluna por recompressão mecânica dos vapores, mostrado a seguir:

- Compressão dos vapores do topo da coluna (Fig. 2.1): A temperatura de saturação dos vapores é aumentada por compressão antes da passagem no refulvedor de aquecimento da base da coluna.

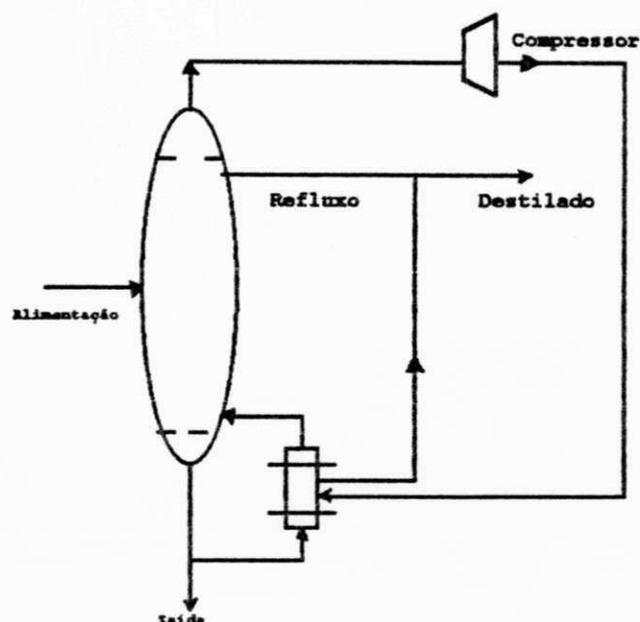


Fig. 2.1 - Compressão de vapores de topo de coluna.

- Compressão do fluido intermediário (Fig. 2.2):

Os vapores do topo são condensados em um condensador/fervevedor, vaporizando o fluido intermediário; este fluido é, em seguida, comprimido para aumentar a temperatura de saturação, com o objetivo de atingir a temperatura necessária ao reator de aquecimento da base da coluna.

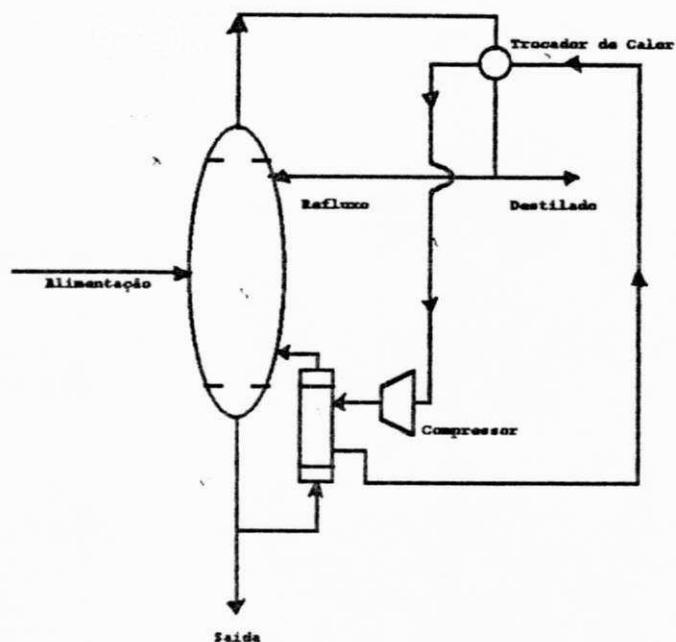


Fig. 2.2 - Compressão por fluido intermediário

Costa (1993) estudou o modelo de destilação convencional para o sistema Etanol-água (Fig. 2.3) e com recompressão mecânica do vapor (Fig. 2.4). As especificações do processo e os resultados obtidos são mostrados nas Tabelas 2.2 e 2.3, respectivamente.

Tabela 2.2 - Dados operacionais empregados por Costa
Sistema Etanol - Água

Alimentação	Convencional	MVR
. Fluxo molar	13200 lbmol/h	13200 lbmol/h
. Composição molar do etanol	2,9%	2,9%
. Local	Ponto ótimo	Ponto ótimo
. Pressão da alimentação	2 atm	2 atm
. Temperatura	210°F	90°F
Grau de Separação		
. Composição molar do etanol no topo	83%	83%
. Composição molar do etanol no fundo	0,01%	0,01%
Dados Operacionais		
. Pressão do topo	1,0 atm	1,0 atm
. Pressão de descarga do compressor	-	4,0 atm

Além dessas especificações, adotou-se o número de estágios em 30, a eficiência politrópica de 70%, e em todas as simulações fixou-se, em cada prato, uma eficiência de 50% e uma queda de pressão de 5 mm Hg. Quanto ao modelo termodinâmico, adotou-se o modelo de UNIFAC.

Tabela 2.3 - Resultados obtidos por Costa.

Número de Estágio	Carga térmica (Gj/h)		Razão de Refluxo		Trabalho de Compressão 6 J/h	Economia
	Convencional	MVR	Convencional	MVR		
30	35,6272	34,6360	2,7922	2,8990	5,4267	84,77%

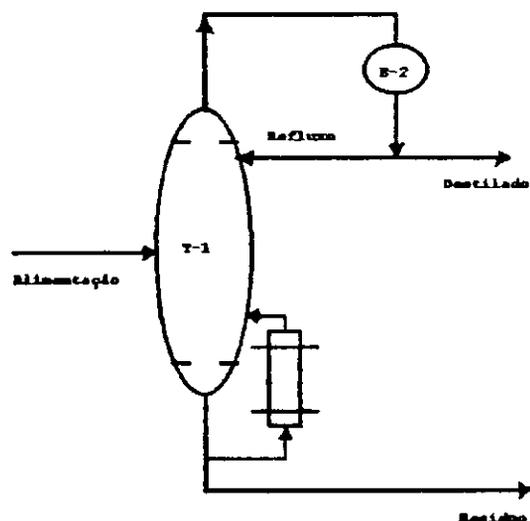


Fig. 2.3 - Coluna de destilação convencional

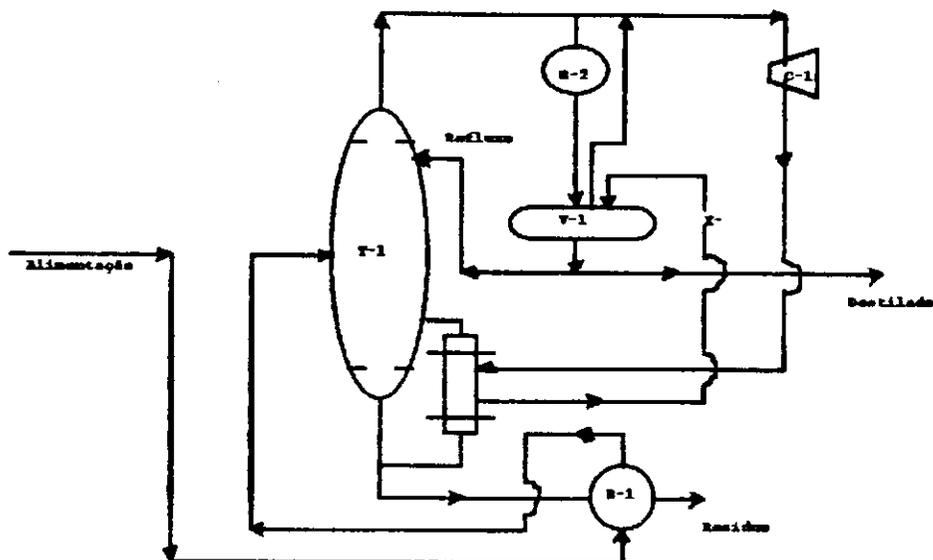


Fig. 2.4 - Destilação com recompressão do Vapor (MVRL)

Carta et alii, estudaram a separação da mistura etil benzeno - xilenos por destilação com recompressão mecânica de vapor (Fig. 2.5). A figura 2.6 mostra o ciclo termodinâmico.

Eles mostram que a característica mais aplicável requerida pelo sistema com a aplicação econômica da recompressão de vapor são mostradas a seguir:

- a pequena diferença do ponto de bolha dos componentes;
- a pequena pressão da coluna;
- um alto consumo de energia;
- baixas temperaturas no processo.

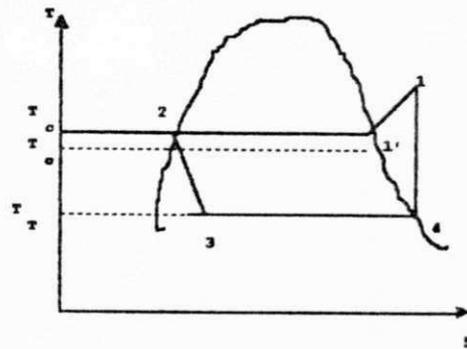


Fig. 2.6 - Ciclo termodinâmico da bomba de calor.

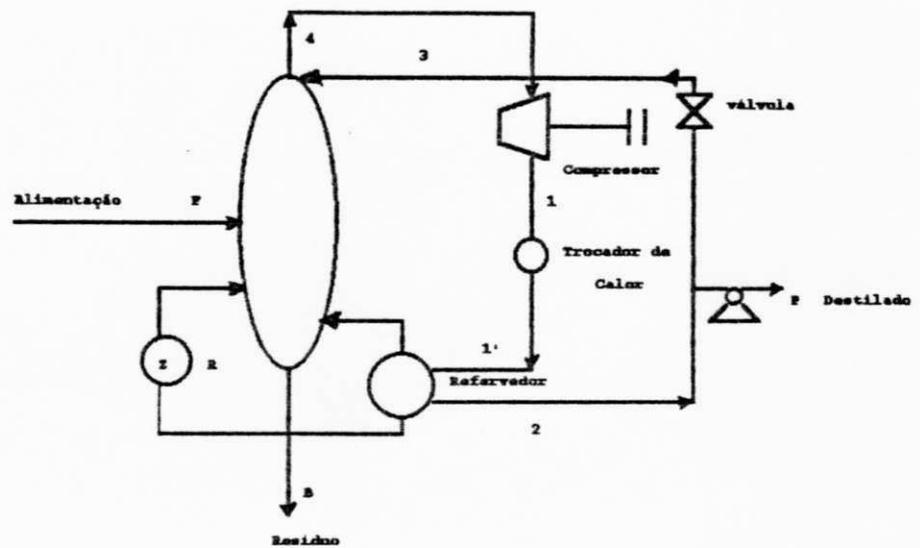


Fig. 2.5 - Coluna de destilação com recompressão de vapor.

As especificações do processo e os resultados obtidos são mostrados nas Tabelas 2.4 e 2.5 respectivamente.

Tabela 2.4 - Dados operacionais empregados por Carta et alii.

Alimentação	
- Fluxo molar, kg/h	16700
- Composição	37,8% etilbenzeno
	39,07% p-xileno
	28,97% o-xileno
Composição do destilado etilbenzeno	99%
Composição do topo, etilbenzeno	4%
Temperatura de alimentação, K	383
Temperatura do topo, K	455
Temperatura do fundo, K	484
Pressão do topo, bar	2.93
Destilado, kg/h	4.250
Razão de Refluxo	63,5
Calor do Refervedor Mwatt	30.6
Vapor de topo, kg/h	274.252
Número real de pratos	432

Tabela 2.5 - Resultados obtidos por R. Carta.

Pressão de saída do compressor	6.09
Razão do compressor	2.33
Tempertura de saída do compressor, K	490
Potência do compressor, KW	6.078
Trocador de calor,	9579
Produção de vapor	5.00
Trabalhado horas por ano	8.000
Custos do equipamento	705
Compressor 1000	1407
Consumo energia elétrica horas por ano	2480

No esquema (Fig. 2.7) apresentado por Gonzales (1984), os vapores do topo de uma coluna de destilação são compressíveis por um compressor acionado por energia elétrica. A energia elétrica transforma-se em energia de pressão e temperatura que é absorvida pelos vapores, aumentando assim o seu nível energético, de forma a poder usar tais vapores para acionar o refeedor onde então os vapores são condensados. Caso fosse usado o sistema convencional com refeedor acionado com vapor das caldeiras e condensador de topo descartando a energia para

AGR, o consumo total de energia seria muito maior. Entretanto, como a energia elétrica é realmente mais cara que a térmica e o custo de investimento pode ser maior, o sistema tem aplicação limitada a casos de destilações difíceis, que usam altos refluxos e onde as diferenças de temperatura entre o topo e o fundo são pequenos, exigindo baixa faixa de compressão dos vapores de topo.

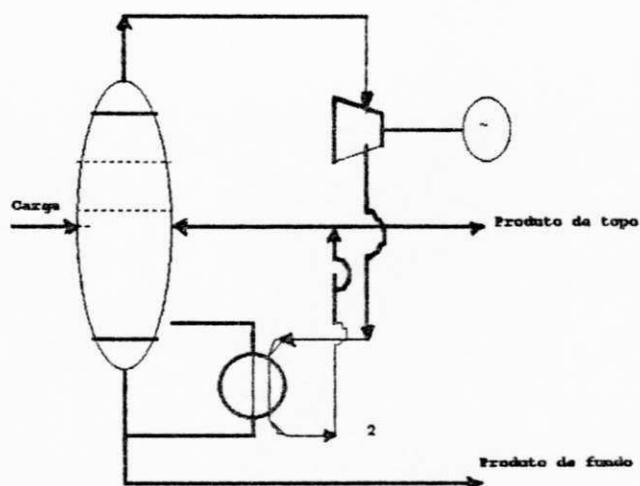


Fig. 2.7 - Recompressão de vapor.

2.2.3 - Métodos rigorosos de destilação

2.2.3.1 - Estrutura do problema - equação MESH

Os algoritmos para a resolução do conjunto de equações algébricas não lineares advindo da modelagem de sistemas multicomponentes são os mais diversos, mas baseiam-se nas equações de MESH para formação do conjunto de equações.

As equações que aparecem no modelo de estágio de equilíbrio, conforme as Figuras 2.8 e 2.9, são mostrados a seguir, que representam respectivamente um estágio de equilíbrio genérico e uma cascata contra corrente de N estágios respectivamente.

As equações MESH, referem-se respectivamente a:

- Balanço de massa, equilíbrio de vapor e líquido, somatório das frações molares ($\sum x_i = 1$) e balanço energético.

Se designarmos C, o número total de composições; N, o número de estágios, para cada componente em cada componente em cada estágio, teremos balanços de energia, material de equilíbrio líquido vapor e os requerimentos de frações molares de líquido e vapor para cada prato que deverá ser igual a 1.

Os quatro conjuntos de equações são:

Tipo 1 - Equação M - Balanço de massa para cada componente (C equações para cada estágio).

$$M_{i,j} = L_{j-1}X_{i,j-1} + V_{j+1}Y_{i,j+1} + F_jZ_{i,j} - (L_j - U_j)X_{i,j} - (V_j + W_j)Y_{i,j} =$$

(2.1)

Tipo 2 - Equação E - Relação de equilíbrio para cada componente.

$$E_{i,j} = Y_{i,j} - K_{i,j}X_{i,j} = 0$$

(2.2)

Tipo 3 - Equação S - Somatório das frações molares (uma equação para cada estágio).

$$(S_Y)_j = \sum_{i=1}^C Y_{i,j} - 1 = 0$$

(2.3)

$$(S_X)_j = \sum_{i=1}^c X_{i,j} - 1 = 0$$

(2.4)

Tipo 4 - Equação H - Balanço de energia e Entalpia (uma equação para cada estágio)

$$H_j = L_{j-1}H_{Lj-1} + V_{j+1}H_{Vj+1} + F_jH_{Fj} - (L_j + U_j)H_{Lj} - (V_j + W_j)H_{Vj} - Q_j =$$

(2.5)

onde os termos de energia cinética e potencial foram ignorados.

Para simplificar tais equações, uma equação de balanço material poderá ser usada ao invés das equações (2.3) e (2.4). Ela é obtida por combinação destas duas equações, e a

equação $\sum_{i=1}^C z_{i,j} = 1,0$. Com a expressão (2.1) somada sobre os C componentes e sobre os estágios 1 até j, chegaremos ao balanço total de massa na seção de retificação, conforme a figura 2.7, temos:

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{n=1}^j (F_n - U_n - W_n) - V_1 \quad (2.6)$$

Uma cascata em contra corrente com N estágios, conforme a figura 2.9 é representada por $N(2C+3)$ equações com $[N(3C+10)+1]$ variáveis. Se especificamos N e todos os $F_j, Z_{i,j}, T_{fj}, P_{fj}, P_j, V_j, W_j$ e Q_j , conseguiremos representar o modelo por $N(2C+3)$ equações algébricas simultâneas com $N(2C+3)$ variáveis de saída desconhecidas que compreendem todos os $x_{i,j}, y_{i,j}, L_j, V_j$ e T_j , onde as equações de Massa, Equilíbrio e Entalpia são equações não lineares. O conjunto de equações não lineares devem ser resolvidas por técnicas iterativas.

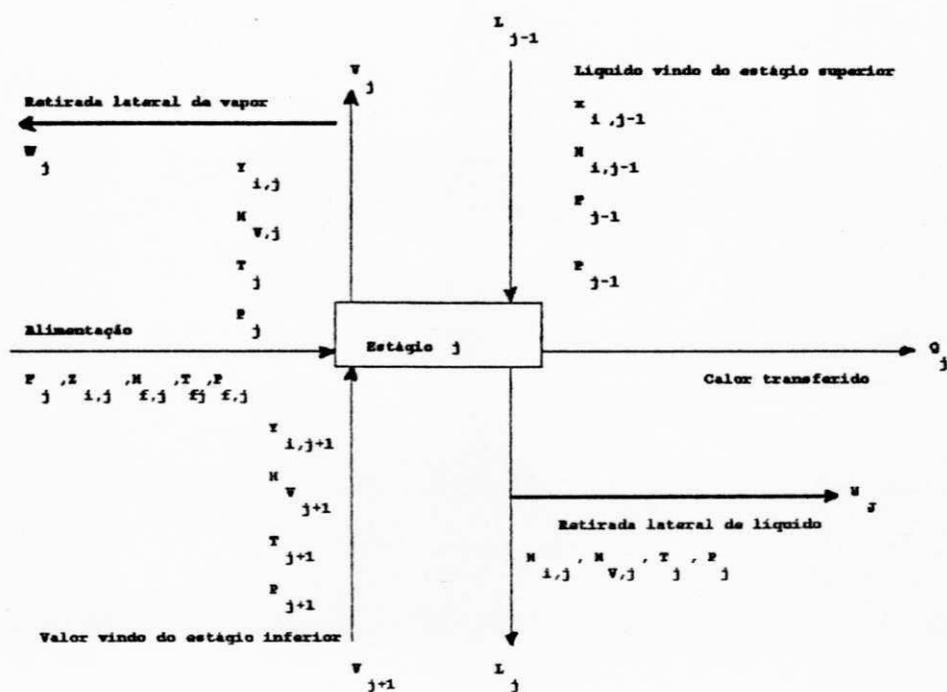


Fig. 2.8 - Estágio de equilíbrio genérico.

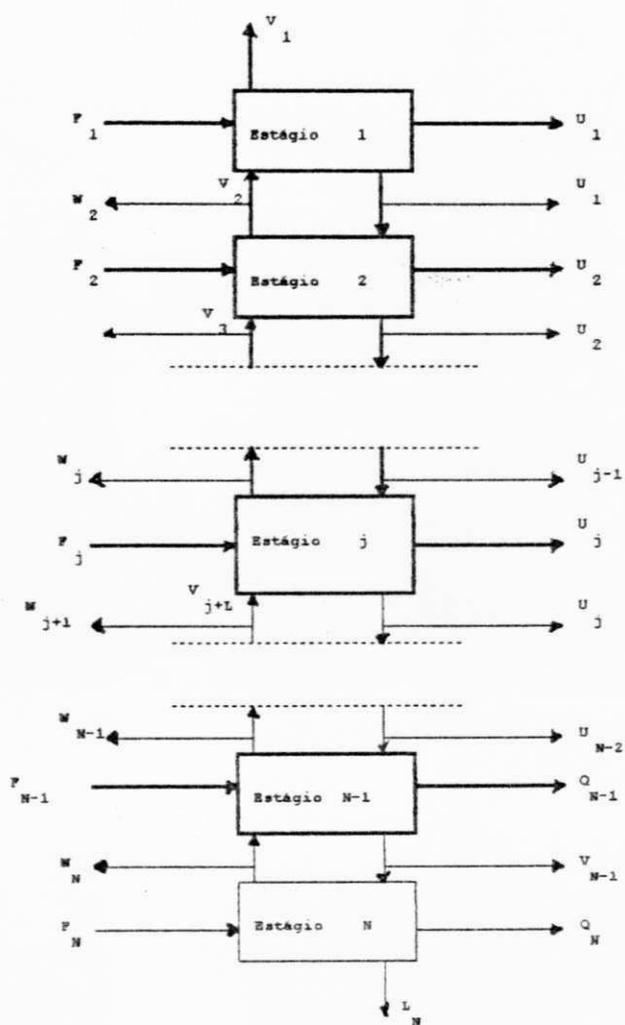


Fig. 2.9 - Esquema geral cascata contra-corrente.

2.2.4 - Matriz tridiagonal

2.2.4.1 - Cálculo das composições

O algoritmo da matriz tridiagonal é o grande responsável pelo sucesso dos procedimentos iterativos do ponto de bolha. Ele resulta de uma forma modificada das equações de Massa, quando elas são obtidas a partir de outras equações, selecionando-se T_j e V_j como variáveis iterativas, que deixamos as N equações lineares modificadas na variável desconhecida fração molar na fase líquida. O conjunto de equações de cada componente é resolvido por um algoritmo eficiente de autoria de Thomas e aplicado por Wang & Henke.

A modificação da equação M é obtida pela substituição das equações (2.2) e (2.6) na equação (2.1) para eliminar Y e L . Os resultados para cada componente em cada estágio são os seguintes:

$$A_j X_{i,j-1} + B_j X_{i,j} + C_j X_{i,j+1} = D_j \quad (2.7)$$

onde:

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad 2 \leq j \leq N \quad (2.8)$$

$$B_j = [V_j + 1 + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - v_1 + U_j + (V_j + W_j)K_{ij}]$$

$$1 \leq j \leq N$$

(2.9)

$$C_j = V_j + 1K_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad (2.10)$$

$$O_j = -F_j Z_{i,j} \quad 1 \leq j \leq N \quad (2.11)$$

De acordo com a figura 2.9, $X_{1,0} = 0$, $V_{N+1} = 0$, $W_1 = 0$ e $U_N = 0$.

Se as equações do tipo M modificadas forem agrupadas por componentes, elas poderão ser separadas como uma série de $C_{i,n}(X_{i,n}, V_n, f_n) = 0$, onde, as funções $C_{i,n}$ representam os balanços das componentes.

As equações $C_{i,n}$ são, em geral, não lineares em $V_{i,n}$, pois os valores de $K_{i,n}$, V_n e f_n que aparecem nestas equações serão funções de $X_{i,n}$. No entanto no procedimento iterativo necessário para a solução, o conjunto $C_{i,n}$ é resolvido, em cada etapa, com um conjunto de valores dados de $K_{i,n}$, V_n e f_n ; o conjunto é resolvido, portanto, como se fosse linear nos $K_{i,n}$, com os coeficientes constantes. Por isso os $C_{i,n}$ pode ser representado pelas equações matriciais.

$$C_i X_i = F_i \quad (2.12)$$

As matrizes dos coeficientes C_i , são tridiagonais e quadrados de ordem N (Fig.. 2.8) os x_i e f_i são matrizes coluna, Perry e Chilton (1980).

2.2.5 - Método do ponto de bolha (Bubble-Point (BP))

Friday e Smith (1964), investigaram o comportamento do método BP quanto a convergência e sugeriram que este método é eficiente apenas para alimentações com pequenas faixas de ebulição. A Fig. 2.10, apresenta o algoritmo do BP, desenvolvido por Wang & Henke para este método.

O nome ponto de bolha refere-se ao fato de que um novo conjunto de temperaturas dos estágios, é calculado a cada nova iteração a partir das equações do ponto de bolha. No método, todas as equações são separadas e resolvidas sequencialmente, exceto para as M equações modificadas que são resolvidas separadamente para cada componente pela técnica da matriz tridiagonal. A especificação do problema consiste na localização dos estágios e das condições térmicas das alimentações, pressão a cada estágio, fluxo de todas as correntes de retiradas laterais, taxas de transferência de calor a partir e para todos os estágios exceto para o estágio 1 (condensador) e o estágio N (Refrervedor), número total de estágios, taxa de refluxo externo no ponto de bolha e taxa de vapor destilado.

Para início dos cálculos, o perfil de temperatura e as vazões de vapor ao longo da coluna devem ser previamente

admitidos, antes do começo do procedimento iterativos. Para a temperatura admite-se um perfil de temperatura linear com relação ao número de estágios. A temperatura do topo é assumida como sendo a de orvalho dos produtos destilados, e a temperatura de fundos é assumida como sendo a de bolha dos produtos residuais para as vazões de vapor admite-se vazão molar constante ao longo da coluna.

Na resolução do método BP, os valores $K_{i,j}$ são requeridos, emprega-se, para primeira operação, o valor de $K_{i,j}$ ideal dado por:

$$K_{i,j} = \frac{p_i^{\text{sat}}}{P} \quad (2.13)$$

Dispõe-se agora de um conjunto de $x_{i,j}$ de onde se pode calcular as novas temperaturas pelo ponto de bolha usando o método de Newton-Raphoson e antes porém, os x_{ij} são normalizados para garantir que os valores usados no cálculo das novas temperaturas, tenham soma unitária. A normalização é dada por:

$$(X_{i,j})_{\text{normalizado}} = \frac{X_{i,j}}{\sum_{i=1} X_{i,j}} \quad (2.14)$$

Os valores de Q_1 , Q_N são calculados a partir do balanço de energia, conforme a Fig. 2.9. Esses valores são dados por:

$$Q_1 = F_1^H f_1 + v_2^H v_2 - v_1^H v_1 - (v_1 + L_1)^H L_1 \quad (2.15)$$

$$Q_N = \sum_{i=1}^N (F_i^H f_i - w_j^H v_j - v_j^H L_j) - \sum_{i=1}^{N-1} Q_i - v_1^H v_1 - L_N^H L_N \quad (2.16)$$

Os novos valores de V_j são dados pela resolução da matriz didiagonal (ver apêndice B).

O critério é dado por:

$$\tau = \sum_{i=1}^N |T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}|^2 \leq 0,01N \quad (2.17)$$

Partida

Especificação: todos F_j , Z_{ij} , condições da alimentação (T_{Fj} , P_{Fj} , ou H_{Fj}),

P_j , V_j , W_j ; todos Q_j exceto Q_1 e Q_N

N ; L (razão de refluxo), V_1 (vazão do destilado)

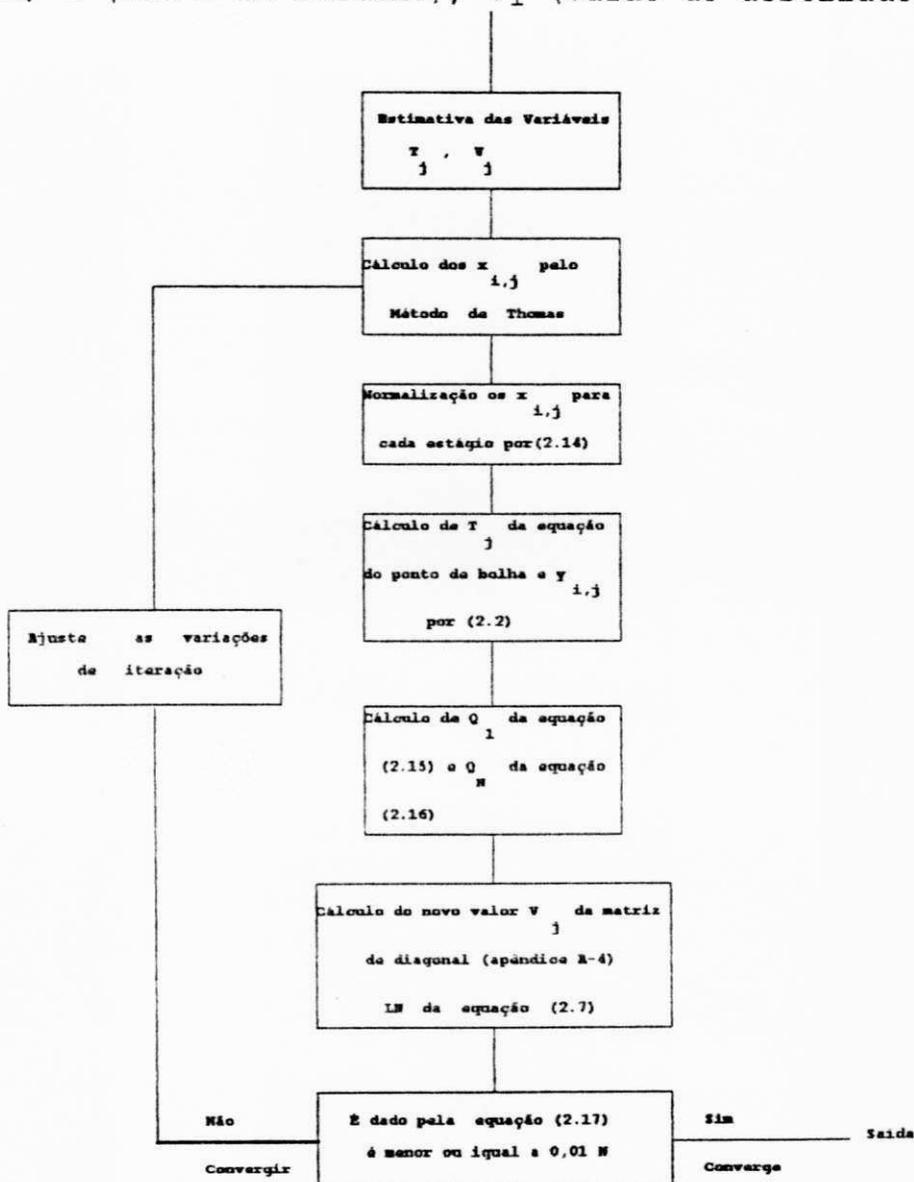


Fig. 2.10 - Algoritmo de Wang-Manke para o método do ponto de bolha.

2.3 - Equilíbrio Líquido-Vapor em Sistemas Miscíveis

2.3.1 - Modelos para cálculo de equilíbrio líquido-vapor

O critério que deve ser satisfeito para o equilíbrio entre uma fase líquida e uma fase vapor, nas mesmas condições de temperatura e pressão, é dado por:

$$F_i^V = F_i^L \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.18)$$

para um componente na fase vapor,

$$F_i^V = Y_i \phi_i P \quad (2.19)$$

para um componente na fase líquida

$$F_i^L = X_i Y_i F_i^O \quad (2.20)$$

Portanto, substituindo as equações 2.19 e 2.20 na equação 2.18, obtém-se:

$$Y_i \phi_i P = X_i Y_i F_i^O \quad (2.21)$$

Segundo SMITH & VAN NESS (1980), quando a fugocidade padrão F_i^O é dada pela regra de Lewis-Randall, F_i^O . Em pressões baixa é possível fazer as seguintes hipóteses:

- a fase vapor se comporta idealmente;
 - as coordenadas da fase líquida são dependente da pressão.

então, de acordo com a segunda hipótese, temos:

$$F_i^O = F_i^L = F_i^{Sat} = \phi_i^{Sat} p_i^{Sat} \quad (2.22)$$

Uma vez que a fase vapor tem comportamento ideal,
 $p_i^V = \phi_i^{Sat} = 1$.

Substituindo estes resultados na equação (2.21),
 temos:

$$Y_i = \frac{X_i Y_i p_i^{Sat}}{P} \quad (2.23)$$

A constante de equilíbrio do componente i em uma
 mistura é definido como:

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} \quad (2.24)$$

Comparando a equação (2.24) com a equação (2.23),
 obtemos:

$$K_i = \frac{Y_i p_i^{Sat}}{P} \quad (2.25)$$

2.3.1.1 - Modelo ASOG (Analytical Solutions of Groups)

Desenvolvido por Derr & Deal (1984), onde o coeficiente de atividade é dividido em duas partes:

- Contribuição devido a diferença de tamanho das moléculas, determinado pela equação de Flory-Huggings (1953).

- Contribuição devido a interação molecular determinada pela equação de Wilson (1964) com aplicação de parâmetros binários de grupos.

2.3.1.2 - Modelo UNIQUAC (Universal Quasi Chemical)

Desenvolvido por Abrams & Prausnitz (1975), onde energia livre de Gibbs em excesso é dividida em duas partes:

- termo combinatorial leva em conta a não idealidade da fase líquida devido a diferença no tamanho e forma das moléculas.

- termo residual leva em conta a não idealidade devido às interações intermoleculares.

2.3.1.3 - UNIFAC (Uniquac Functional Group Activity Coefficients)

O método UNIFAC foi originalmente desenvolvido por Fredenslund et alii (1975). É utilizado para prever o coeficiente

de atividade de componentes abaixo do ponto crítico, temperatura entre 300 e 425 K, pressão moderando (até 5 atm), líquidos miscíveis, misturas não eletrolíticas e não poliméricas, GMEHLING et alii (1982).

Conforme Prausnitz et alii (1975), o método é baseado no conceito de contribuição de grupos. A hipótese fundamental é que a contribuição de um grupo é independente da contribuição de um outro grupo. A mistura líquida é considerada como uma solução de grupos estruturais, tais como CH_3 , OH , CO e outros que quando adicionados formam a molécula. Considerando que a propriedade física de um fluido é a soma das contribuições individuais de cada grupo funcional, é possível calcular as propriedades da mistura a partir das propriedades dos grupos ao invés das propriedades das moléculas.

2.4 - Sistema de Compressão

Compressores são máquinas operatrizes de fluxo compressível, são utilizadas para proporcionar a elevação de pressão do gás ou escoamento gasoso, normalmente superior a 2,5 atm.

Segundo Barbosa (1984), algumas condições são impostas na instalação de um compressor:

- pressão de sucção;
- temperatura de sucção;
- pressão de descarga;

- natureza do gás.

Resultam da interação do compressor com o sistema:

- Vazão;
- Potência de compressão;
- Temperatura de descarga.

2.4.1 - Teoria de compressão

$$Pv^n = \text{constante} \quad (2.26)$$

onde n assume os seguintes valores:

- processo isométrico, $n = \infty$;
- processo isobárico, $n = 0$;
- processo isotérmico, $n = 1$;
- processo isoentrópico, $n = K = \frac{C_p}{C_v}$

Quando o expoente n é diferente de 0, 1, K e ∞ , o processo é denominado politrópico.

2.4.2 - Trabalho de compressão

O trabalho é obtido a partir do balanço de massa em escoamento permanente, desprezando as variações de energia cinética e potencial gravitacional, obtém-se:

$$W_C = - \int_{P_1}^{P_2} v_{cp} \quad (2.27)$$

Avaliando a integral e definindo o rendimento termodinâmico, para cada processo, temos:

- trabalho isotérmico: é calculado ao longo de uma evolução isotérmica.

$$W_{is} = R t_1 \ln \left(\frac{P_2}{P_1} \right) \quad (2.28)$$

$$\eta_{is} = \frac{W_{is}}{W_{real}} \quad (2.29)$$

- trabalho adiabático, é calculado ao longo de uma evolução adiabática

$$W_K = - \frac{K}{K-1} R t_1 \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-1}{K}} - 1 \right] \quad (2.30)$$

$$\eta_K = \frac{W_K}{W_{real}} \quad (2.31)$$

Os trabalhos ideais isotérmico e adiabático dependem apenas das características do sistema. Enquanto que, o trabalho ideal politrópico depende do estado final do gás, que resulta da interação máquina-sistema.

O rendimento politrópico resulta na melhor apreciação da qualidade do projeto, visto que provém da comparação entre dois processos cujos estados inicial e final coincidem.

MATERIAIS E MÉTODOS

CAPÍTULO III

MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 - Material Utilizado

Foi utilizado o simulador de processo CHEMCAD II - V.2.2, desenvolvido pela Chemstations Inc., para ser implementado em microcomputadores. Ele simula o processo em estado estacionário que realiza balanços de massa e energia em sistemas químicos, sendo muito usado em plantas químicas, petroquímicas e de gás natural. Permite simular desde simple equilíbrio líquido vapor até completas unidades químicas.

Neste trabalho foi utilizado um microcomputador tipo 486 DX.

3.2 - Metodologia da Simulação

O simulador CHEMCAD II, utiliza uma seqüência de módulos para o projeto e avaliação dos equipamentos, dividindo o problema de simulação global em suas partes, ou seja torres, trocadores, compressores, divisores etc, e exigindo a especificação completa de cada equipamento. A pressão de cálculo

de cada modo, é pré-determinada pelo usuário com passagem automática, seguindo para outro módulo, quando a convergência é alcançada.

A simulação foi feita em duas partes: A destilação convencional e a destilação com recompressão mecânica do vapor (MVC). A primeira parte simula a unidade convencional (Figura 3.1), estudando a influência da localização do prato de alimentação, para um certo número de estágio, sobre a carga térmica e sua razão de refluxo.

A partir desta análise, estudou-se o comportamento da razão de refluxo em função do número de estágios, com o objetivo de se determinar o refluxo mínimo e a faixa de análise, com relação ao número de estágio, para a destilação com recompressão mecânica do vapor.

A segunda parte, estuda as unidades com recompressão mecânica do vapor (Figura 3.2), estudando a influência do número de estágios, das composições da alimentação, carga térmica e razão de compressão.

No estudo da destilação convencional, para análise da influência do prato da alimentação as especificações dos processos são mostradas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Dados operacionais empregados na coluna convencional.

Sistema Acetona - Álcool Isopropílico

Alimentação:

- . Fluxo molar: 100 kg m/h
- . Composição molar da acetona: 70%
- . Local ponto ótimo

Grau de Separação:

- . Composição molar da acetona no topo: 99,5%
- . Composição molar da acetona no fundo: 0,5%

- . Estado - Estacionário

Dados de Operação

Coluna convencional:

- . Pressão do topo: 1 atm
- . Pressão da alimentação: 1 atm

Coluna MVR:

- . Pressão do topo: 1.0 atm
- . Pressão de descarga do compressor: 2.5 atm.

Na avaliação da flexibilidade, manteve-se as especificações citadas acima, porém variando em cada, as composições da alimentação (além disso, adotou-se o número de estágios em 30).

Para a destilação com recompressão mecânica do vapor, na análise da influência do número de estágio, manteve-se a especificação da Tabela 3.1. Além dessas especificações, adotou-se a eficiência politrópica de 75%, na avaliação da

flexibilidade, manteve-se as especificações citadas. Também usou-se os mesmos dados operacionais em termo das composições da alimentação, da análise de flexibilidade da unidade convencional.

Em todas as simulações fixou-se, em cada prato, uma eficiência de 50% e uma queda de pressão de 5 mm Hg.

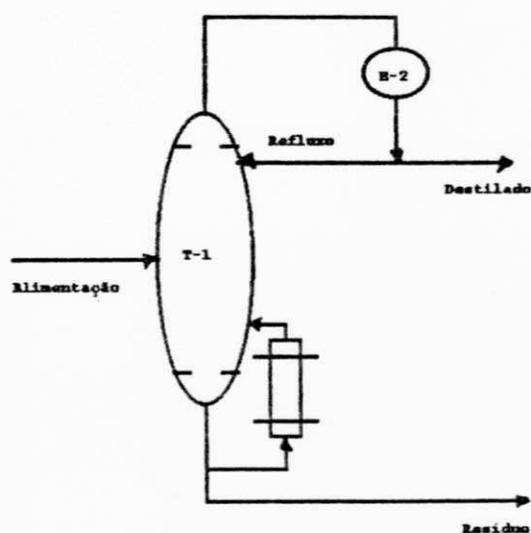


Figura 3.1 - Coluna de destilação convencional.

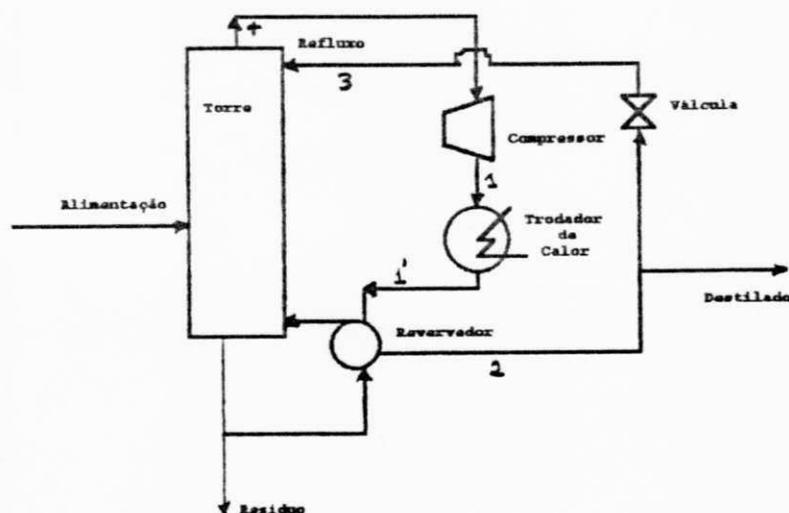


Figura 3.2 - Destilação com recompressão do vapor.

3.3 - Métodos Utilizados pelo Simulador

3.3.1 - Torre de destilação

O módulo tower faz cálculo de equilíbrio líquido vapor multi-estágio, permitindo simular qualquer coluna simples, incluindo colunas de destilação e absorção.

Trabalha com colunas de até 100 estágios, 4 correntes de alimentação e 4 correntes de retirados laterais. Possui convergência muito rápida. É recomendado para a maioria dos sistemas químicos, com eficiência de estágio igual a 1.

Constitui-se num módulo altamente flexível, podendo-se especificar condições para o condensador, reverteredor ou qualquer prato. Especificações como: razão de refluxo, temperatura, fração molar, fração recuperada, peso molecular de produtos, entre outras são também aceitas.

O módulo tower usa um algoritmo tipo inside-out para simular os cálculos prato a prato. O loop externo fornece um modelo local de entalpia e K (constante de equilíbrio) simples para ser usado em cálculos no loop interno. O loop interno executa a maioria dos cálculos de equilíbrio mássico-energético, baseado no modelo criado pelo loop externo, para encontrar as equações Mesh e as especificações do usuário. Quando o loop interno converge, o controle retorna ao loop externo que atualiza o modelo inicial usando resultados de cálculos rigorosos da

controle retorna ao loop externo que atualiza o modelo inicial usando resultados de cálculos rigorosos da constante de equilíbrio e entalpia. Quando o modelo simples equipara-se ao modelo rigoroso dentro de uma especificada tolerância, o loop externo é dado como convergido. Se não, um novo e simples modelo entalpia e "K" é gerado pelo loop externo e os cálculos dentro do loop interno são repetidos.

3.3.2 - Sistema de compressão

O "módulo comp" simula operações iso-entrópicas e politrópicas. São especificadas as seguintes variáveis:

- Pressão final;
- Razão de compressão;
- Trabalho requerido.

Se a pressão no final ou a razão de compressão for especificada, as condições de corrente de saída e o trabalho requerido são calculados. Se o trabalho requerido for especificado, a pressão final e as condições da corrente de saída são calculadas. A eficiência adiabática pode ser obtida se a pressão final e o trabalho de compressão forem especificadas.

Para o nosso trabalho foi usada uma compressão politrópica.

3.3.3 - Trocador de calor

O "módulo HTXR" é usado para simular um trocador com uma ou duas corrente de entrada. Para uma corrente de entrada, o trocador pode ser usado como aquecedor ou resfriador, se o trocador possui duas correntes de entrada, dependendo da especificação, formas de operações mais complicadas são avaliadas, tais como:

- Cálculos de utilidade;
- Avaliação;
- Projeto do equipamento.

3.3.4 - Válvula

O "módulo VALV" faz um flash adiabático da corrente de entrada. A pressão final; queda de pressão, temperatura de bolha ou de orvalho pode ser especificadas.

No caso da especificação do ponto de bolha ou de orvalho, o módulo primeiro determina a pressão correspondente, depois a performance do flash adiabático. O módulo, também é utilizado como um separador de fases, se duas ou mais correntes de saídas forem especificadas.

3.3.5 - Divisor

O "módulo DIVI" produz, a partir de uma corrente de entrada, diversas correntes de saída com a mesma composição e propriedades intensivas. O fluxo molar ou a composição molar podem ser especificadas.

3.4 - Propriedades Termodinâmicas

O CHEMCAD II provém uma grande variedade de opções de modelos para gerar a constante de equilíbrio K , entalpia, entropia, densidade, viscosidade e tensão superficial para as correntes do processo.

3.4.1 - Cálculos do equilíbrio de fases

O tratamento do equilíbrio líquido-vapor seria simples se todos os sistemas obedecessem a lei de Raoult, o que não é o caso do sistema do trabalho, pois, nestas circunstâncias, não seria necessária qualquer informação a respeito das misturas constituintes das fases. O fracasso da lei de Raoult deve, fundamentalmente, às diferenças entre as dimensões das moléculas e às interações entre as moléculas dos componentes.

O cálculo da constante de equilíbrio, depende do modelo termodinâmico selecionado pelo usuário. A Tabela 3.2,

apresenta as possibilidades de seleção mais importante para a destilação.

Tabela 3.2 - Métodos para o cálculo da constante de equilíbrio

Equação de Estado	Soave-Redlicen-Kwong Grayson-Street/Chad- Seader Peng-Robinson API Soave-Redlich-Kwong Soave-Redlich-Kwong mo- dificador (4 parâmetros)	$K_i = \frac{\phi_i^L}{\phi_i^V}$	São usadas principalmente para sistemas de Hidrocarbonetos
Semi-Empírico	Grayson-Streed modifica- ção do modelo de Chow- Seada	$K_i = \frac{V_i^O}{\phi_i^V}$	É usada para sistemas de Hidrocarboneytos e frações pesadas de petróleo
Método do Coeficiente de atividade	UNIQUAC UNIFAC NILSON VAN LAAR NRTL MARGULES SCATCHARD-HILDEBRAND	$K_i = \frac{Y_i F_i^O L}{P \phi_L^V}$	São usados em sistemas químicos e componentes não polares
	Pressão de vapor	$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P}$	É usado quando as fases vapor e líquido se comportam idealmente.

Fonte: Manual CHEMCAD II.

3.4.2 - Equação de estado

O comportamento do estado de uma substância é conhecida através da relação PVT, podendo matematicamente serão representados por $F(P, T, V) = 0$, que nos leva a equação de estado.

3.4.2.1 - Aplicação

É usada para avaliar propriedades (de substâncias puras ou misturas), tais como:

- 1 - Densidade das fases líquida e vapor;
- 2 - Pressão de vapor;
- 3 - Propriedades críticas das misturas;
- 4 - Relações de um equilíbrio líquido-vapor;
- 5 - Funções desvios da idealidade para entalpia e entropia.

3.4.3 - Métodos do coeficiente de fugacidade

Os coeficientes de fugacidade da fase vapor são determinados pela equação de estado de Soave-Readlich-Kwong.

Equação de Soave-Redlich-Kwong:

$$P = (Rt - V - b) - \frac{a}{V(V + b)} \quad e \quad (3.2)$$

$$z^3 - z^2 + (A - B - B^2)xz - AB = 0 \quad (3.3)$$

Coeficiente de fugacidade da fase vapor:

$$\ln \phi_i^V = -\ln(Z - B) + (Z - 1)B; \quad -A / b(A_i - B_i) \ln[1 + B / Z] \quad (3.4)$$

Desvio de entalpia

$$\frac{H - H^H}{RT} = 2 - 1 - \frac{A}{B} \left[1 - \frac{T}{a} \frac{da}{dt} \right] \ln \left(1 + \frac{B}{Z} \right) \quad (3.5)$$

onde

$$b = \sum_i^n [x_i, b_i] \quad b_i = 0,08664 RTc_i Pc_i$$

$$a = \sum_i^n \sum_j^n (x_i x_j (a_i a_j)^{0,5} (1 - K_{ij}))$$

$$a_i = a_{c_i} a_i \quad a_{c_i} = \frac{0,42748(RTc_i)^2}{Pc_i}$$

$$\alpha_i^{0,5} = 1 + \mu_i (1 - Tr_i^{0,5})$$

$$\mu_i = 0,48 + 1,574\omega_i - 0,176 \omega_i^2$$

$$A = \frac{P}{(PT)^2} \quad B = \frac{bP}{RT}$$

$$B_i = \frac{b_i}{b} \quad A_i = \frac{1}{a} [2a_i^{0,5} \sum_j^n x_j a_j^{0,5} (1 - K_{ij})]$$

$$T \left(\frac{da}{dt} \right) = - \sum_i^n \sum_j^n x_i x_j \mu_j (a_{c_i} a_{c_j} T_{ij}^{0,5}) (1 - K_{ij})$$

A fugacidade no estado padrão, é definida como:

$$F_i^{OL} = P_i^{sat} \phi_i \exp \left[(P - P_i^{sat}) \frac{V_i}{(RT)} \right] \quad (3.6)$$

3.4.4 - A pressão de vapor

A pressão de vapor das componentes puras é calculada através da equação de Antoine.

$$\ln P_i^{sat} = A - \frac{B}{T - C} \quad (3.7)$$

3.4.5 - Modelo UNIFAC

Foi escolhido como método para cálculo do coeficiente de afinidade, o método UNIFAC, de características préditivas, e que faz uso do método de contribuição dos grupos e é adequado para sistemas químicos líquidos não ideais.

3.4.6 - Modelos de entalpia e entropia

A entalpia de uma corrente de processo é calculada segundo a equação:

$$H^* = H^* + \left(\frac{H - H^*}{RT} \right) \cdot RT \quad (3.8)$$

onde, H^* e a entalpia do gas ideal, calculada por:

$$H^* = \int C_p dt \quad (3.9)$$

$$\text{com } C_p = a + bT^2 + cT^3 + dT^4 + eT^5 + fT^6 \quad (3.10)$$

Com as constantes a, \dots, f armazenadas no banco de dados do simulador o

$\frac{H - H^2}{RT}$ e' a função de desvio da entalpia.

Quando o modelo de Soave-Redlich-Kwong (SRK) é selecionado, os fatores de compressibilidade e desvios de entalpia, são obtidos a partir da equação de estado SRK para a fase líquida e gasosa, sendo o modelo bastante acurado para sistemas contendo Hidrocarbonetos. A equação é:

$$\frac{H - H^*}{RT} = Z - 1 - \frac{A}{B} [1 - T / q + dq / dt]^* \ln(1 + B / 2) \quad (3.11)$$

$$T(dg / dt) = - \sum \sum x_i * x_j * m_j * (a_{c_i} + a_{c_j} * Tr_j^{0,5}) * (1 - K_{ij}) \quad (3.12)$$

A entalpia das correntes é calculada através da equação:

$$s = \int C_p / T * dt + s_p \quad (3.13)$$

onde:

$$s_p = s - s^*, \text{ e' o desvio da entropia.}$$

Com a escolha do modelo SRK, o desvio de entropia e' calculado conforme se segue:

$$s - s^* / R + \ln P / P_o = \ln(2 - B) + A / B^* [T / q dq / dt]^* (1 + B / 2), \quad (3.14)$$

Onde P_o é a pressão de referência (14.699 psi).

RESULTADOS E DISCUSSÕES

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 - Destilação Convencional

Os resultados das simulações são mostrados nas Tabelas 4.1 e 4.2. Os dados da Tabela 4.1 foram obtidos fixando o número de estágios e avaliando uma ótima localização do prato de alimentação.

A alimentação ótima, foi definida, como sendo, aquela em que se obtém a menor razão de refluxo para uma determinada especificação.

As especificações do processo utilizadas são mostradas na Tabela (3.1).

4.1.1 - Localização da alimentação

Tendo como parâmetro o número de estágios, foi determinada a localização do prato de alimentação, onde graficamos a influência do estágio de alimentação sobre a razão de refluxo (Figura 4.1.a) e a influência do estágio de alimentação sobre a carga térmica (Figura 4.1.b). Observa-se que a razão de refluxo e a carga térmica variam em função da localização do prato de alimentação.

A localização do prato de descarga exerce influência significativa sobre a carga térmica e razão de refluxo, quando o número de estágio está próximo ao valor mínimo (Figura 4.2) tornando-se independente, na faixa de análise do prato de carga, para número de estágios acima de 25.

Este comportamento se deve ao número reduzido de estágio na retificação.

Com a alimentação em uma bandeja cuja concentração não está próxima à sua composição, ocorre uma contaminação por efeito de mistura, alterando os perfis de temperatura e concentração ao longo da coluna, perdendo a eficiência de separação.

Portanto, necessita-se aumentar a razão de refluxo, o que implica em um aumento da carga térmica, para realizar a separação especificada.

Tabela 4.1 - Resultados das simulações para a coluna convencional.

Estágios	Prato de Alimentação	Razão de Refluxo	Carga Térmica K _j /h	ΔP atm
	13	5.3021	1,359x10 ⁷	
	14	4.9991	1,295x10 ⁷	
20	15	4.9546	1,285x10 ⁷	0,256
	16	5.1003	1,316x10 ⁷	
	17	5.5373	1,410x10 ⁷	
	17	3.4	0,9532x10 ⁷	
	18	3.2893	0,9295x10 ⁷	
25	19	3.2390	0,9186x10 ⁷	0,32
	20	3.2608	0,9234x10 ⁷	
	21	3.3451	0,9413x10 ⁷	
	22	2.7641	0,8179x10 ⁷	
	23	2.7290	0,8104x10 ⁷	
30	24	2.7217	0,8098x10 ⁷	0,384
	25	2.7461	0,8141x10 ⁷	
	26	2.8183	0,8294x10 ⁷	
	26	2.5361	0.77x10 ⁷	
	27	2.5098	0,7644x10 ⁷	
35	28	2.4935	0,7608x10 ⁷	0,448
	29	2.5020	0,7627x10 ⁷	
	30	2.5223	0,7671x10 ⁷	
	31	2.3703	0,7350x10 ⁷	
	32	2.36	0,7328x10 ⁷	0,512
40	33	2.3551	0,7317x10 ⁷	
	34	2.3714	0,7354x10 ⁷	
	35	2.3834	0,7378x10 ⁷	

Tabela 4.2 - Resultados das simulações para a Destilação Convencional.

Composição da Alimentação (molar)	Razão de Refluxo	Carga Térmica kg/h
0.65	2.7610	$0,7632 \times 10^7$
0.70	2.7217	$0,8089 \times 10^7$
0.75	2.6996	$0,8619 \times 10^7$
0.80	2.6696	$0,9100 \times 10^7$

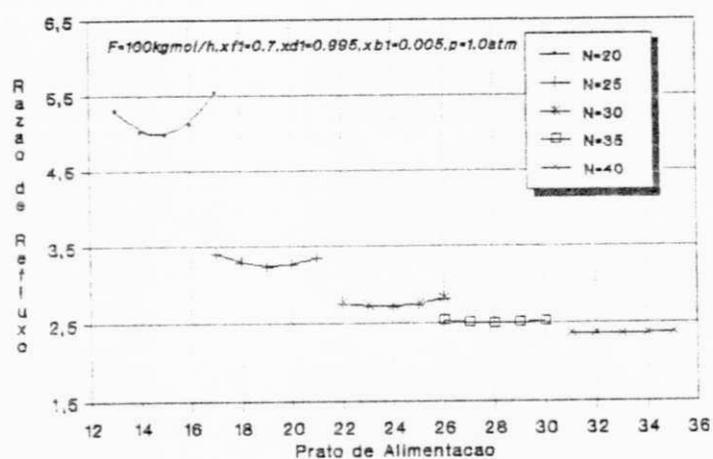


Figura 4.1a - Influência do Estágio de Alimentação Sobre a Razão de Refluxo.

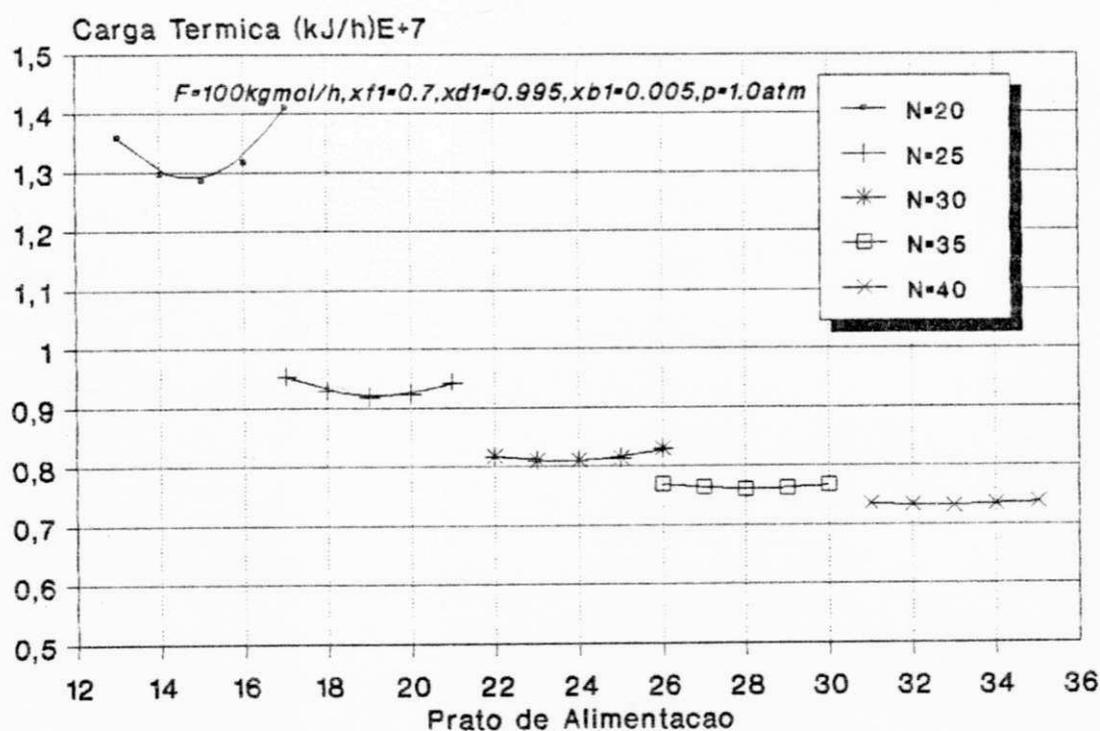


Figura 4.1b - Influência do Estágio de Alimentação Sobre a Carga Térmica.

4.1.2 - Razão de refluxo

Quando se projeta colunas de destilação, o número de estágios necessários para realizar uma determinada separação depende da escolha do refluxo de operação. Então a otimização do refluxo torna-se um problema onde o objetivo é operar mínimos, mas garantindo que os produtos estejam dentro da especificação, CAMARGO (1990). O refluxo ótimo está situado entre 1.1 a 1.5 vezes o refluxo mínimo PERRY & GREEN (1984).

O número de estágios em função da razão de refluxo teve como objetivo o estudo da obtenção do refluxo mínimo e a definição da faixa de análise, com relação ao número de estágios, e o prato de alimentação ótimo para a destilação com recompressão mecânica do vapor (MVR). Pela Figura 4.2, observa-se que o refluxo mínimo é aproximadamente 2.4. Então encontra-se o valor da razão de refluxo ótima de operação entre 2.6 a 3.6, correspondendo, a partir da Figura 4.2, a um número entre 24 a 33 estágios. Neste trabalho, adota-se a faixa de 20 a 40 estágios para análise da destilação MVR.

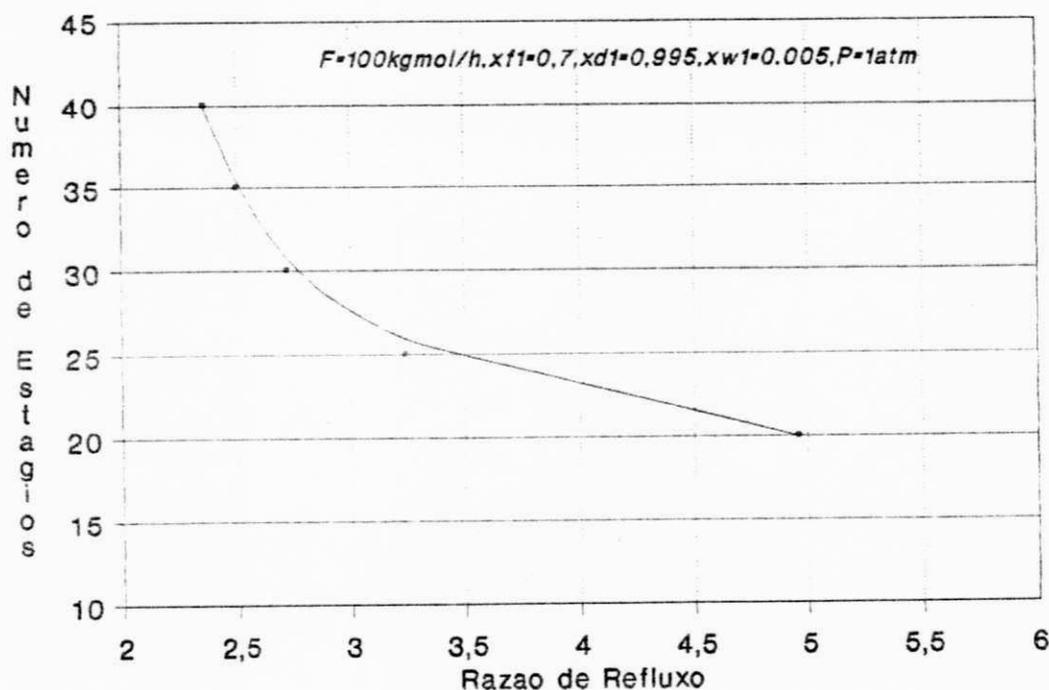


Figura 4.2 - Influência da Razão de Refluxo Sobre o Número de Estágios.

4.1.3 - Composição da alimentação

A Figura 4.3 apresenta o efeito da composição da Acetona na alimentação sobre a carga térmica e a razão de refluxo. O comportamento inverso, com relação a quantidade de Acetona na alimentação, entre a carga térmica e razão de refluxo, devido o aumento da composição da Acetona, produz uma diminuição da temperatura de saturação da alimentação, diminuindo a temperatura em cada estágio, necessitando assim de um aumento da carga térmica para manter o perfil de temperatura e atingir as especificações do processo. Enquanto que a razão de refluxo, a alimentação entra na coluna com maior pureza, necessitando menor razão de refluxo para efetuar a mesma separação.

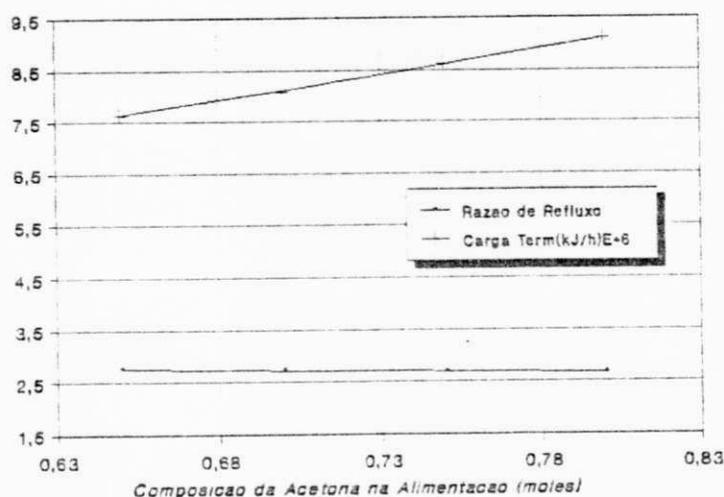


Figura 4.3 - Influência da Composição da Acetona na Alimentação Sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo.

4.2 - Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (MVR)

Através dos resultados obtidos para a coluna convencional foi possível montar a configuração MVR.

Foi estudado a influência do número de estágio, composição da alimentação e a razão de compressão do vapor. Manteve-se as especificações da Tabela (3.1), exceto os parâmetros analisados em cada caso.

Para a análise da influência das composições da alimentação e compressão, o valor do refluxo foi fixado como sendo 3 vezes o destilado. Assim, o número de estágios foi tomado como 30, com a localização da alimentação no ponto ótimo, os resultados das simulações são mostrados na Tabela 4.3.

4.2.1 - Número de estágios

Foram fixados 5 valores para o número de estágio da coluna. O prato foi escolhido de acordo com a destilação convencional. A Figura 4.4 mostra o comportamento de trabalho de compressão em função do número de estágios. Carga térmica é proporcional ao número de estágios.

Este comportamento deve-se ao fato de que quanto menor o número de estágios maior será a razão de refluxo, conseqüentemente maior será a vazão de vapor de topo. Como o trabalho de compressão é função da vazão de vapor do topo, o

aumento desta vazão ocasiona uma elevação deste trabalho, como também para vaporização de parte do refluxo quando a pressão é reduzida de 2,5 pra 1 atm.

Tabela 4.3 - Resultados das simulações para o MVR

Número de Estágios	Razão de Refluxo	Carga Térmica kg/h	Trabalho de Compressão kg/h
20	7.30	0.153015×10^8	0.20214×10^7
25	3.327	0.843218×10^7	$0,10512 \times 10^7$
30	3.292	0.8366×10^7	0.10426×10^7
35	3.2618	0.8314×10^7	0.10351×10^7
40	3.081	0.789648×10^7	0.099166×10^7
Composição da Alimentação	Razão de Refluxo	Carga Térmica kg/h	Trabalho de Compressão kg/h
0.65	3.35	$0,7526 \times 10^7$	0.098092×10^7
0.70	3.293	0.8366×10^7	0.10426×10^7
0.75	3.14	0.8429×10^7	0.1077×10^7
0.80	2.99	0.8896×10^7	0.11113×10^7

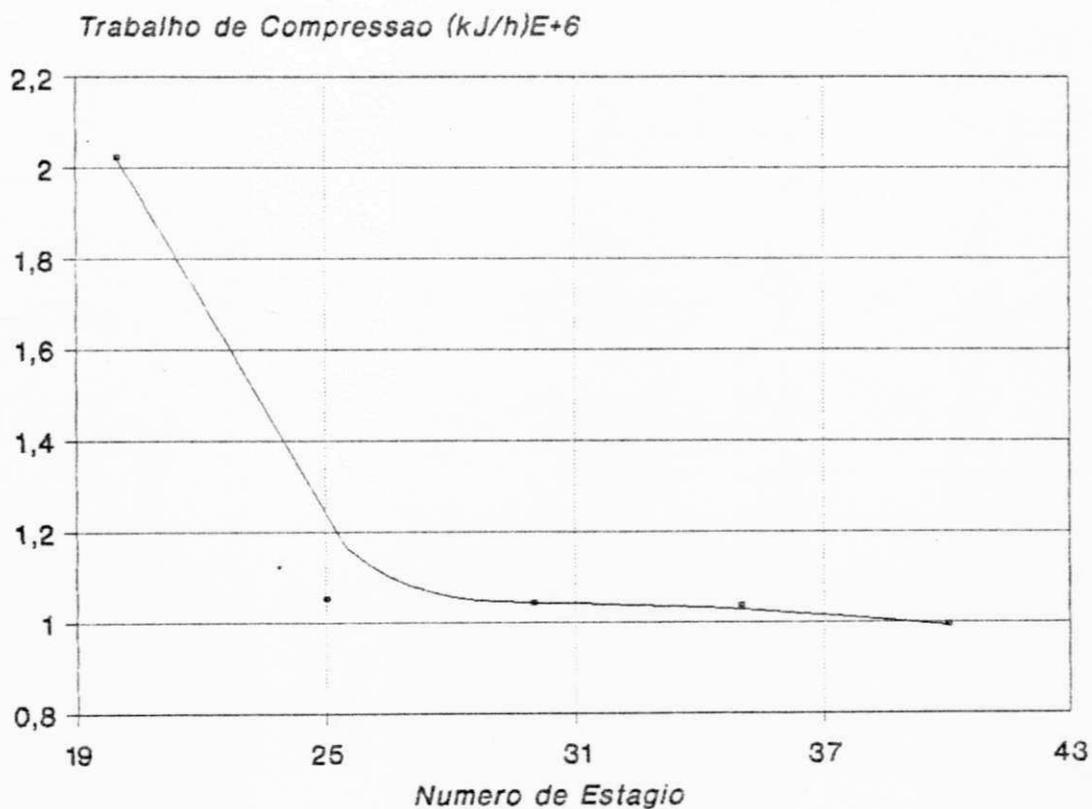


Figura 4.4 - Influência do Estágio Sobre o Trabalho de Compressão.

4.2.2 - Composição da alimentação

A simulação foi realizada variando a composição da alimentação, Figura 4.5. Verifica-se que o trabalho de compressão é diretamente proporcional a composição da alimentação.

Esse efeito pode ser explicado observando-se que, para uma determinada especificação de processo, quanto mais concentrado for a alimentação, maior será o fluxo de vapor na seção de retificação. Conseqüentemente, maior será a vazão de destilado e menor o refluxo. Portanto, como o trabalho de compressão é função da vazão de vapor de topo, o aumento de vapor produz uma elevação deste trabalho.

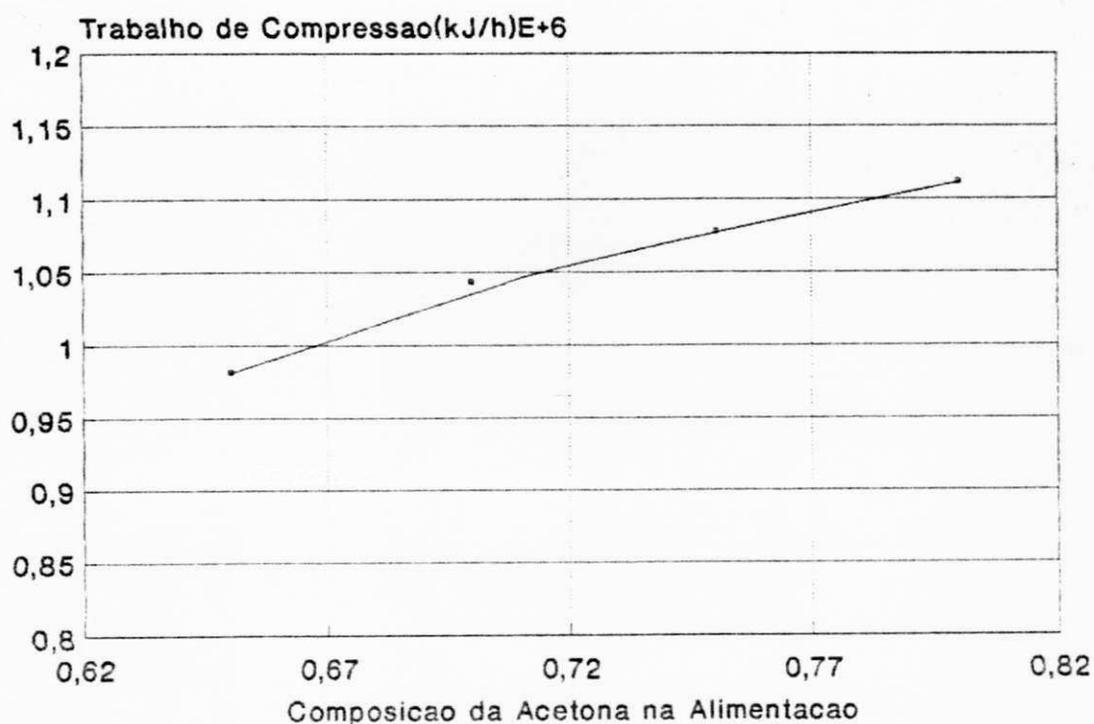


Figura 4.5 - Influência da Concentração da Acetona na Alimentação Sobre o Trabalho de Compressão.

4.2.3 - Compressão do vapor

As simulações foram realizadas variando a compressão do vapor. A Figura 4.6 mostra o comportamento da carga térmica em função da compressão do vapor, onde verifica-se que a carga térmica é inversamente proporcional a compressão do vapor. Este comportamento deve-se ao fato de que quanto maior a pressão de descarga do compressor, maior será a fração vaporizada e conseqüentemente menor será a vazão interna do líquido na torre, acarretando uma menor carga térmica, para vaporização do líquido.

Tabela 4.4 - Resultados das simulações para a razão de compressão do vapor.

Pressão (atm)	Razão de Refluxo	Carga Térmica kg/h	Trabalho de Compressão
2	3.24	0.8515×10^7	0.07675×10^7
2.5	3.23	0.8305×10^7	0.10343×10^7
3	3.23	0.8083×10^7	0.12499×10^7
3.5	3.23	0.7655×10^7	0.144053×10^7

4.3 - Economia de Energia

Em geral, uma instalação de compressão mecânica de vapor não é outra coisa senão uma bomba de calor em circuito fechado.

A adição do compressor para pressurizar o vapor de topo da coluna convencional, é uma modificação que exige um grande investimento inicial, mas resulta em uma grande redução do consumo energético da instalação. Porém a implantação deste sistema, poderá ser invisível financeiramente, pois o compressor é acionado por energia elétrica e esta é geralmente mais cara que a energia térmica.

A eficiência deste trabalho é comprovada quando comparamos a destilação com recompressão mecânica do vapor com a destilação convencional. Estes resultados são mostrados na Tabela 4.5, onde procuramos estabelecer as condições mais adequadas de operação com o objetivo de reduzir o consumo energético do modelo estudado.

Tabela 4.5 - Compressão entre a carga térmica do sistema convencional e o trabalho de compressão do sistema MVR.

Número de Estágio	Carga Térmica K Joules/h	Trabalho de Compressão K J/h	Economia
20	1.285×10^7	0.20214×10^7	84,27%
25	0.9186×10^7	0.10512×10^7	88,55%
30	0.8089×10^7	0.10426×10^7	87,11%
35	0.7608×10^7	0.10351×10^7	86,39%
40	0.7317×10^7	0.099166×10^7	86,45%
Composição da Alimentação			
0.65	0.7632×10^7	0.098092×10^7	84,14%
0.70	0.8089×10^7	0.10426×10^7	87,11%
0.75	0.8619×10^7	0.1077×10^7	87,50%
0.80	0.9100×10^7	0.11113×10^7	87,78%

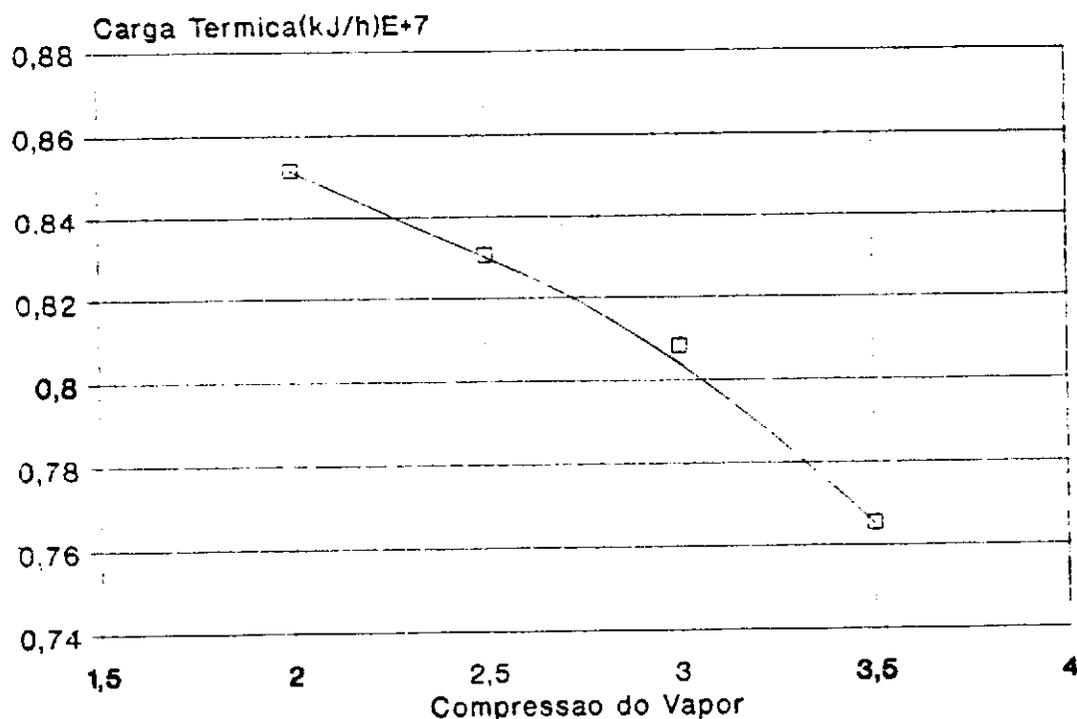


Figura 4.6 - Influência da Compressão do Vapor Sobre a Carga Térmica.

CONCLUSÕES

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos pode-se concluir.

- Quanto ao estudo da coluna convencional:

- Para a redução do consumo energético, a otimização do prato de alimentação é um fator muito importante.

- Com o aumento da composição da Acetona na alimentação, houve um aumento na razão de refluxo e conseqüentemente um aumento na carga térmica.

- A coluna deve ser projetada para uma razão de refluxo de operação entre 2.6 a 3.6, correspondendo a um número de 24 a 33 estágios.

- Quanto ao estudo da Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor:

- A carga térmica é inversamente proporcional ao número de estágios.

- O trabalho de compressão é diretamente proporcional a composição da Acetona na destilação.

- A carga térmica é inversamente proporcional a compressão do vapor.

- Com o aumento da pressão de descarga do compressor, têm-se uma queda de carga térmica.

- A viabilidade de implantação de um sistema de compressão está intimamente ligado ao custo de energia elétrica.

SUGESTÕES

CAPÍTULO VI

SUGESTÕES

Com o objetivo de dar continuidade ao trabalho, sugerimos as seguintes etapas:

- Avaliar a viabilidade econômica, analisando o investimento inicial e a taxa de retorno obtida com o sistema de compressão.

- Fazer um estudo em cima da razão de compressão.

- Realizar os cálculos relativos a hidrodinâmica da coluna, em termos de diâmetro, espaçamento entre os pratos, eficiência, etc.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABRAMS, D.S.; & PRAUSNITZ, J.M. AICHE, J; 21, 116, 1975, apud REID, R. C; PRAUSNUTZ, J;M; & POLING, B.E: The Properties of Gases and Liquids. McGraw-Hill Book Company, 1989.

ANDERSON, T.F. & PRAUSNITZ, J.M. Application of the UNIQUAC Equation to Calculation Multicomponent Phase Equilibria.1. Ind Eng. Chem. Process Des. Dev. Vol 17, Nº 4, 1978.

BARBOSA, P.S., Compressores, PETROBRÁS, CENPES-DIVEN, 2ª edição, 1984.

BROUSSE, E; CLAUDEL, B; & JALLUT, C. Modeling and Optimization of the Steadystate Operation of a Vapor Recompression Distillation Column, Chem.Eng. Sci.40,2073-2078, 1985.

CARTA, R., KOVACID, A., & TOLA, G. Separação da mistura do etil benzeno-xilenos por destilação: Possível aplicação da recompressão do vapor. Chemical Eng. Commum. Vol 19, p.157-165, 1982.

CHEMICAD II, Processos Flowsheet Simulator Chemstations inc.
Engineering Software for the PC, 952, Echo Lane 450,
Houston.

COLLURA, M. A. & LUYBEN, W. L; Energy-Saving Distillation
Designs in Ethanol Production. Ind. Eng. Chem. Res. 27,
p.1686-1696, 1988.

DERR, E. L. and DEAL, C. H., Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.
(Lond.), 3, 40 (1969).

FERRÉ, J.A.; CASTELLS, F. & FLORES, J; Optimization of a
Distillation Column with a Direct Vapor Recompression
Heat Pump. Ind. Eng. chem. Process Dev., 24, p.128-132,
1985.

FLORY, P. J., Principles of polymer chemistry, cornell
University Press, Sthaca, N. Y., 1953.

FOUST, A.S., WENZELL, L.A., CLUMP, W.C., MAUS, L. & ANDERSEN,
L.B., Princípios das Operações Unitárias, Guanabara Dois,
2ª ed., Rio de Janeiro, 1982.

FREDENSLUND, A; JONES, R.L; & PRAUSNITZ, J.M. AICHE J; 21, 1086, 1975, apud REID, R.C; PRAUSNITZ, J.M; & POLING, B.E. The Properties of Gases and Liquid. McGraw-Hill Book Company, 1989.

GONZALEZ, G.S. Economia de energia em projetos. Revista Brasileira de Engenharia Química, p. 7-16, julho, 1984.

GUNDERSEN, T; Computer and Chem. Eng; 3, 245, 1982, apud CHEMCAD II.

KERN, D.Q. Processos de Transferência de Calor. Ed. Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1982.

MOSTAFA, H. A. Thermodynamic Availability Analysis of Fractional Distillation with Vapor Recompression, Can. J. Chem. Eng. 59, 487-491.

MUHRER, C. A; COLLURA, M. A. & LUYBEN, W. L. Control of Vapor Recompression Distillation Columns. Ind. Eng. Chem. Res. 29, p.59-71, 1990.

NULL, H. R. Chem. Eng. Prog. 63(7), p.58-64, 1976. apud MUHRER, C.A; COLLURA, M.A. & LUYBEN, W.L..... 1990.

- PERRY, R. H. & CHILTON, C. H., Manual de Engenharia Química, 5ª ed., Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1980.
- PERRY, R.H. & GREEN, D.W., Chemical Engineerings' Handbook, 6ª ed., Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1984.
- QUADRI, G. P. Hydrocarbon Process, 60, p.119-126, 1981. apud MUHRER, C.A., COLLURA, M.A. & LUYBEN, W.L.....1990.
- REID, R.C. PRAUSNITZ, J. M. & POLING, B.E. The Properties of Gases and Liquids. McGraw-Hill Book Company, 1988.
- SMITH, J.M; & VAN NESS, H. C; Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, Ed. Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1980.
- SOAVE, G; Chem. Eng. Sci.; 27,1197, 1972, apud CHEMCAD II, V-22.
- WEINSTEIN, E. Economia de Energia em Destilação. Revista Brasileira de Engenharia Química, 8, p.11-23, Julho, 1985.
- WILSON, G. M. J. Am. Chem. Soc., 86:127 (1964).

A-1 Equação tipo M modificada

A equação 2.7 é obtida combinando as equações (2.2) e (2.1) para eliminar $Y_{i,j}$, $Y_{i,j+1}$,

$$L_{j-1}X_{i,j-1} + V_{j+1}K_{i,j+1} + F_j Z_{i,j} - (L_j + V_j)X_{i,j} - (V_j + W_j)K_{i,j}X_{i,j} = 0 \quad (A-1.1)$$

Rearranjando a equação A-1.1, tem-se:

$$L_{j-1}X_{i,j-1} - [(V_j + W_j)K_{i,j} + (L_j + V_j)]X_{i,j} - V_{j+1}K_{i,j+1}X_{i,j+1} = -F_j Z_{i,j} \quad (A-1.2)$$

definindo A_j, B_j, C_j

$$L_{i,j}X_{i,j-1} - [(V_j + W_j)K_{i,j} + (L_j + V_j)]X_{i,j} - V_{j+1}K_{i,j+1}X_{i,j+1} = -F_j Z_{i,j} \quad (A-1.2)$$

definindo A_j, B_j, C_j e D_j , como:

$$A_j = L_j - 1$$

$$B_j = -[(V_j + W_j)K_{i,j} + (L_j + V_j)] \quad 2 \leq j \leq N \quad (A-1.3)$$

$$C_j = V_{j+1}K_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N \quad (A-1.4)$$

$$D_j = -F_j Z_{i,j} \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad (A-1.5)$$

$$1 \leq j \leq N \quad (A-1.6)$$

onde

$$L_{j-1} = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (A-1.7)$$

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (A-1.8)$$

substituindo estas definições na equação A-1.2

$$A_j X_{i,j-1} + B_j X_{i,j} + C_j X_{i,j+1} = D_j \quad (2.7)$$

Esta equação sendo escrita para n estágios dá um conjunto de equações cujos coeficientes formam uma matriz tridiagonal.

A-2 Algoritmo de Thomas

A-2.1 Cálculo das Composições

No desenvolvimento do algoritmo de Thomas, escreve-se a equação 2.7 para o estágio de topo (estágio 1).

$$X_{i,1} = \frac{D_1 - C_1 X_{i,2}}{B_1} \quad (\text{A} - 2.1)$$

Para o estágio 2, a equação 2.7, torna-se:

$$A_2 X_{i,1} + B_2 X_{i,2} + C_2 X_{i,3} = D_2 \quad (\text{A} - 2.2)$$

combinando as equações (A - 2.1) e (A - 2.2) para eliminar $X_{i,1}$, temos:

$$X_{i,2} = \left(\frac{D_2 - A_2 q_1}{B_2 - A_2 P_1} \right) - \frac{C_2}{B_2 - A_2 P_1} X_{i,3} \quad (\text{A} - 2.3)$$

Em geral, temos:

$$X_{i,j} = \frac{D_j - A_j q_{j-1}}{B_j - A_j P_{j-1}} - \frac{C_j}{B_j - A_j P_{j-1}} X_{i,j+1} \quad (\text{A} - 2.4)$$

definindo P_j e q_j , como:

$$P_j = \frac{C_j}{B_j - A_j P_{j-1}} \quad (\text{A} - 2.5)$$

$$q_j = \frac{D_j - A_j q_{j-1}}{B_j - A_j P_{j-1}} \quad (\text{A} - 2.6)$$

substituindo as equações A - 2.5 e A - 2.6 na equação A - 2.4, obtemos:

$$X_{i,j} = q_j X_{i,j+1} \quad (\text{A} - 2.7)$$

Para o estágio N, $X_{i,j+1} = 0$, então a equação A - 2.7, torna-se:

$$X_{i,N} = q_N \quad (\text{A} - 2.8)$$

O algoritmo de Thomas, para a solução da equação linearizada (equação 2.12), é uma eliminação gaussiana, partindo do estágio 1 e trabalhando até o estágio N para finalmente isolar $X_{i,N}$. Os outros valores de $X_{i,j}$ são obtidos começando com $X_{i,N-1}$ por substituição na equação (A-2.7).

Para a determinação das temperaturas dos estágios, usa-se as mesmas relações.

A-3 - Matriz Didiagonal

A-3.1 Cálculo das Vazões

A Equação 2.6 pode ser escrita, como:

$$L_j = V_{j+1} + \text{soma1} \quad (\text{A} - 3.1)$$

onde

$$\text{soma1} = \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (\text{A} - 3.2)$$

Para o estágio $j-1$, a Equação A-3.1, torna-se:

$$L_{j-1} = V_j + \text{soma2} \quad (\text{A} - 3.3)$$

onde

$$\text{soma2} = \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (\text{A} - 3.4)$$

Combinando as equações A-3.1 e A-3.3 com a Equação 2.5, para eliminar L_j e L_{j-1} . Obtemos depois de um rearranjo:

$$\alpha_j V_j + \beta_j V_{j+1} = \gamma_j \quad (\text{A} - 3.5)$$

onde

$$\alpha_j = H_{Lj-1} - H_{Vj} \quad (\text{A} - 3.6)$$

$$\beta_j = H_{Vj+1} - H_{Lj} \quad (\text{A} - 3.7)$$

$$\gamma_j = [\text{soma1}] (H_{Lj-1} - H_{Lj-1}) + F_j (H_{Lj} - H_{Fj}) + w_j (H_{Vj} - H_{ij}) + Q_j \quad (\text{A} - 3.8)$$

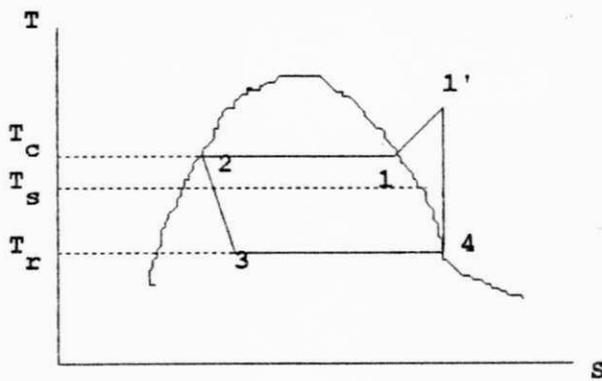
em geral a Equação A-3.5, pode ser escrita:

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad (\text{A} - 3.9)$$

ANEXO DO CAPÍTULO III

A-4 - Representação Gráfica do Ciclo Termodinâmico.

Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor.



$$1 - T = 85.725^{\circ}\text{C}$$

$$1' - T = 100.110^{\circ}\text{C}$$

$$3 - T = 56.113^{\circ}\text{C}$$

APÊNDICE B

Filename : sl.DAT

Date: 10-Jan-95 Time: 8:32 am

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment Stream Numbers

1 TOWR 1 -2 -3

Stream Connections

Stream	Equipment From	To
--------	-------------------	----

COMPONENTS

140 145

THERMODYNAMICS

K-value model :UNIFAC

Enthalpy model :SRK

Tower Summary

Equipment name	
number	1
No. of stages	30
1st feed stage	24
Stg 1/Cond. P atm	1.00000
Cond. del P atm	.000000
Tower del P atm	.384000
Condenser type	total
Condenser mode	6
	Purity
Condenser spec	.995000
Comp position/name	1 Acetone
Reboiler mode	6
	Purity
Reboiler spec.	.500000E-02
Comp position/name	1 Acetone
Damping factor	1.00000
Max. iterations	50
Calculated Duties	
Condenser KJ /hr	-.795857E+07
Reboiler KJ /hr	.808401E+07

FLOW SUMMARIES

Page 3
CHEMCAD 2 - Version 2.2

Stream No.	1	2	3
Temp C	59.5821	56.1037	90.4651
Pres atm	1.00000	1.00000	1.38400
Enth KJ /hr	-458895.	-146275.	-187208.
Vapor mole fraction	.000000	.000000	.000000
Total kgmol/hr	99.9994	70.2018	29.7976
Flowrates in kgmol/hr			
Acetone	69.9995	69.8506	.148967
Isopropanol	29.9998	.351153	29.6486

DISTILLATION PROFILE

Unit type: TOWR Unit name: Eqp # 1

Stg	Temp C	Pres atm	* Net Flows *		Feeds kgmol/hr	Products kgmol/hr	Duties KJ /hr
			Liquid kgmol/hr	Vapor kgmol/hr			
1	56.1	1.000	191.07			70.202	-.79586E+07
2	56.1	1.000	190.65	261.27			
3	56.6	1.014	190.54	260.85			
4	57.0	1.027	190.42	260.74			
5	57.4	1.041	190.29	260.62			
6	57.8	1.055	190.13	260.49			
7	58.2	1.069	189.95	260.33			
8	58.7	1.082	189.76	260.16			
9	59.1	1.096	189.53	259.96			
10	59.5	1.110	189.28	259.73			
11	59.9	1.123	188.99	259.48			
12	60.3	1.137	188.66	259.19			
13	60.8	1.151	188.27	258.86			
14	61.2	1.165	187.83	258.48			
15	61.7	1.178	187.31	258.03			
16	62.1	1.192	186.70	257.52			
17	62.6	1.206	185.96	256.90			
18	63.1	1.219	185.06	256.16			
19	63.6	1.233	183.94	255.26			
20	64.2	1.247	182.52	254.14			
21	64.9	1.261	180.69	252.72			
22	65.7	1.274	178.30	250.89			
23	66.7	1.288	175.15	248.50			
24	68.0	1.302	272.68	245.36	99.999		
25	70.4	1.315	261.50	242.88			
26	75.1	1.329	247.42	231.70			
27	81.8	1.343	239.53	217.62			
28	86.9	1.357	238.01	209.74			
29	89.4	1.370	238.13	208.21			
30	90.5	1.384		208.33		29.798	.80840E+07

Reflux ratio =2.7217

Str # 1 enters stg # 24 at 59.6 C, 1.00 atm, .000 % vapor

TRAY COMPOSITIONS		Unit # 1	TOWR	
Stage #	1	T = 56.10 deg C	P =	1.0000 atm
		Y	X	K
Acetone		.000000	.994998	.00000
Isopropanol		.000000	.500206E-02	.00000
Total kgmol/hr		.000000	191.068	
Stage #	2	T = 56.13 deg C	P =	1.0000 atm
		Y	X	K
Acetone		.994998	.992481	1.00254
Isopropanol		.500206E-02	.751920E-02	.66524
Total kgmol/hr		261.270	190.645	
Stage #	3	T = 56.55 deg C	P =	1.0137 atm
		Y	X	K
Acetone		.993158	.989729	1.00346
Isopropanol		.684176E-02	.102706E-01	.66615
Total kgmol/hr		260.847	190.542	
Stage #	4	T = 56.98 deg C	P =	1.0274 atm
		Y	X	K
Acetone		.991148	.986726	1.00448
Isopropanol		.885211E-02	.132743E-01	.66686
Total kgmol/hr		260.744	190.423	
Stage #	5	T = 57.40 deg C	P =	1.0411 atm
		Y	X	K
Acetone		.988954	.983448	1.00560
Isopropanol		.110461E-01	.165522E-01	.66735
Total kgmol/hr		260.624	190.286	
Stage #	6	T = 57.82 deg C	P =	1.0549 atm
		Y	X	K
Acetone		.986561	.979870	1.00683
Isopropanol		.134394E-01	.201304E-01	.66762
Total kgmol/hr		260.488	190.131	
Stage #	7	T = 58.24 deg C	P =	1.0686 atm
		Y	X	K
Acetone		.983949	.975959	1.00819
Isopropanol		.160509E-01	.240411E-01	.66764
Total kgmol/hr		260.332	189.955	
Stage #	8	T = 58.66 deg C	P =	1.0823 atm
		Y	X	K
Acetone		.981097	.971676	1.00970
Isopropanol		.189035E-01	.283240E-01	.66740
Total kgmol/hr		260.157	189.756	
Stage #	9	T = 59.08 deg C	P =	1.0960 atm
		Y	X	K
Acetone		.977974	.966972	1.01138
Isopropanol		.220259E-01	.330280E-01	.66688
Total kgmol/hr		259.958	189.531	

TRAY COMPOSITIONS		Unit # 1	TOWR	
Stage # 10	T = 59.50 deg C		P =	1.1097 atm
	Y		X	K
Acetone	.974547		.961785	1.01327
Isopropanol	.254530E-01		.382150E-01	.66605
Total kgmol/hr	259.733		189.277	
Stage # 11	T = 59.92 deg C		P =	1.1234 atm
	Y		X	K
Acetone	.970771		.956037	1.01541
Isopropanol	.292292E-01		.439629E-01	.66486
Total kgmol/hr	259.478		188.987	
Stage # 12	T = 60.34 deg C		P =	1.1371 atm
	Y		X	K
Acetone	.966590		.949628	1.01786
Isopropanol	.334103E-01		.503719E-01	.66327
Total kgmol/hr	259.188		188.656	
Stage # 13	T = 60.77 deg C		P =	1.1509 atm
	Y		X	K
Acetone	.961932		.942428	1.02070
Isopropanol	.380676E-01		.575718E-01	.66122
Total kgmol/hr	258.857		188.274	
Stage # 14	T = 61.21 deg C		P =	1.1646 atm
	Y		X	K
Acetone	.956706		.934266	1.02402
Isopropanol	.432939E-01		.657343E-01	.65862
Total kgmol/hr	258.476		187.832	
Stage # 15	T = 61.66 deg C		P =	1.1783 atm
	Y		X	K
Acetone	.950789		.924911	1.02798
Isopropanol	.492112E-01		.750891E-01	.65537
Total kgmol/hr	258.034		187.313	
Stage # 16	T = 62.12 deg C		P =	1.1920 atm
	Y		X	K
Acetone	.944017		.914050	1.03279
Isopropanol	.559825E-01		.859504E-01	.65134
Total kgmol/hr	257.515		186.699	
Stage # 17	T = 62.59 deg C		P =	1.2057 atm
	Y		X	K
Acetone	.936170		.901245	1.03875
Isopropanol	.638301E-01		.987553E-01	.64635
Total kgmol/hr	256.900		185.960	
Stage # 18	T = 63.10 deg C		P =	1.2194 atm
	Y		X	K
Acetone	.926938		.885875	1.04635
Isopropanol	.730619E-01		.114125	.64019
Total kgmol/hr	256.161		185.057	

TRAY COMPOSITIONS		Unit # 1	TOWR	
Stage # 19	T = 63.64 deg C	P =	1.2331 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.915886	.867042	1.05633	
Isopropanol	.841137E-01	.132958	.63263	
Total kgmol/hr	255.259	183.936		
Stage # 20	T = 64.23 deg C	P =	1.2469 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.902388	.843425	1.06991	
Isopropanol	.976118E-01	.156575	.62342	
Total kgmol/hr	254.137	182.517		
Stage # 21	T = 64.90 deg C	P =	1.2606 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.885530	.813067	1.08912	
Isopropanol	.114470	.186933	.61236	
Total kgmol/hr	252.719	180.691		
Stage # 22	T = 65.70 deg C	P =	1.2743 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.863973	.773094	1.11755	
Isopropanol	.136027	.226906	.59949	
Total kgmol/hr	250.893	178.303		
Stage # 23	T = 66.69 deg C	P =	1.2880 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.835781	.719510	1.16160	
Isopropanol	.164219	.280490	.58547	
Total kgmol/hr	248.505	175.155		
Stage # 24	T = 67.98 deg C	P =	1.3017 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.798333	.647744	1.23248	
Isopropanol	.201667	.352256	.57250	
Total kgmol/hr	245.357	272.681		
Stage # 25	T = 70.36 deg C	P =	1.3154 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.726598	.516536	1.40668	
Isopropanol	.273402	.483464	.56551	
Total kgmol/hr	242.883	261.497		
Stage # 26	T = 75.09 deg C	P =	1.3291 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.582322	.315284	1.84698	
Isopropanol	.417678	.684716	.61000	
Total kgmol/hr	231.700	247.415		
Stage # 27	T = 81.76 deg C	P =	1.3429 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.357770	.139143	2.57124	
Isopropanol	.642230	.860857	.74604	
Total kgmol/hr	217.618	239.534		

TRAY COMPOSITIONS Unit # 1 TOWER

Stage # 28	T = 86.89 deg C	P = 1.3566 atm
	Y	X
Acetone	.158201	.497890E-01
Isopropanol	.841799	.950211
Total kgmol/hr	209.737	238.006

Stage # 29	T = 89.39 deg C	P = 1.3703 atm
	Y	X
Acetone	.561990E-01	.162148E-01
Isopropanol	.943801	.983785
Total kgmol/hr	208.209	238.129

Stage # 30	T = 90.47 deg C	P = 1.3840 atm
	Y	X
Acetone	.178189E-01	.499931E-02
Isopropanol	.982181	.995001
Total kgmol/hr	208.331	29.7976

Filename : caroll1.DAT
Date: 10-Jan-95 Time: 8:12 am

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment	Stream Numbers
1 TOWR	10 1 -3 -4
2 COMP	3 -5
3 HTXR	5 -6
4 HTXR	6 -7
5 DIVI	7 -8 -9
6 VALV	9 -10

Stream Connections

Stream	Equipment
	From To

Recycle Sequence

2	3	4	5	6	1
---	---	---	---	---	---

Cut Streams

3

Accelerated Streams

3

Successive Substitution Method

Recycle calculations have converged

COMPONENTS

140 145

THERMODYNAMICS

K-value model :UNIFAC

Enthalpy model :SRK

Tower Summary

Equipment name	
number	1
No. of stages	30
1st feed stage	1
2nd feed stage	24
Stg 1/Cond. P atm	1.00000
Cond. del P atm	.000000
Tower del P atm	.384000
Condenser mode	0
	No Cond
Condenser spec	
Reboiler mode	5
	kgmol/hr
Reboiler spec.	.174241
Comp position/name	1 Acetone
Damping factor	1.00000
Max. iterations	100
Calculated Duties	
Reboiler KJ /hr	.752201E+07

Divider Summary

Equipment name	
number	5
Mode	1
	kgmol/hr
Flow rate/ratio	65.1511
Flow rate/ratio	.000000

Valve Summary

Equipment name	
number	6
	Pres. out
Pres. spec atm	1.00000

Heat Exchanger Summary

Equipment name		
number	3	4
Delta P str 1 atm	.000000	.000000
Delta P str 2 atm	.000000	.000000
Vapor fraction 1 out	1.00000	.725000E-01
Spec. duty KJ /hr		.772560E+07
Case flag	Design	Design
Calc. duty KJ /hr	-368431.	-.752251E+07
Utility option flag	0	0

Compressor Summary

Equipment name	
number	2
Mode	2
	P ratio/eff
Pout or ratio atm	2.50000
Comp. or Exp. type	Polytropic
Efficiency	.750000
Work	
Actual Kw	272.313
Theor. Kw	.000000
Cp/Cv	1.11307

FLOW SUMMARIES

Page 5
CHEMCAD 2 - Version 2.2

Stream No.	1	3	4	5
Temp C	60.2849	56.1250	90.4652	100.091
Pres atm	1.00000	1.00000	1.38400	2.50000
Enth KJ /hr	-500091.	.804249E+07	-219043.	.902283E+07
Vapor mole fraction	.000000	1.00000	.000000	1.00000
Total kgmol/hr	99.9994	283.416	34.8635	283.416
Flowrates in kgmol/hr				
Acetone	64.9996	282.072	.174241	282.072
Isopropanol	34.9998	1.34404	34.6892	1.34404
Stream No.	6	7	8	9
Temp C	85.6021	85.4805	85.4805	85.4805
Pres atm	2.50000	2.50000	2.50000	2.50000
Enth KJ /hr	.866339E+07	.103964E+07	238989.	800648.
Vapor mole fraction	1.00000	.725000E-01	.730000E-01	.730000E-01
Total kgmol/hr	283.416	283.416	65.1511	218.266.
Flowrates in kgmol/hr				
Acetone	282.072	282.072	64.8421	217.231
Isopropanol	1.34404	1.34404	.308964	1.03507
Stream No.	10			
Temp C	56.1041			
Pres atm	1.00000			
Enth KJ /hr	801078.			
Vapor mole fraction	.188917			
Total kgmol/hr	218.266			
Flowrates in kgmol/hr				
Acetone	217.231			
Isopropanol	1.03507			

DISTILLATION PROFILE

Unit type: TOWER Unit name: Eqp # 1

Stg	Temp C	Pres atm	* Net Flows *		Feeds kgmol/hr	Products kgmol/hr	Duties KJ /hr
			Liquid kgmol/hr	Vapor kgmol/hr			
1	56.1	1.000	176.68		218.27	283.42	
2	56.5	1.013	176.60	241.82			
3	56.9	1.026	176.50	241.73			
4	57.3	1.040	176.39	241.64			
5	57.8	1.053	176.26	241.52			
6	58.2	1.066	176.11	241.39			
7	58.6	1.079	175.94	241.25			
8	59.0	1.093	175.75	241.08			
9	59.4	1.106	175.53	240.88			
10	59.8	1.119	175.28	240.66			
11	60.2	1.132	174.99	240.41			
12	60.6	1.146	174.66	240.12			
13	61.0	1.159	174.28	239.80			
14	61.5	1.172	173.83	239.41			
15	61.9	1.185	173.31	238.97			
16	62.3	1.199	172.69	238.45			
17	62.8	1.212	171.94	237.83			
18	63.3	1.225	171.02	237.08			
19	63.9	1.238	169.88	236.16			
20	64.5	1.252	168.43	235.02			
21	65.2	1.265	166.55	233.57			
22	66.1	1.278	164.07	231.68			
23	67.2	1.291	160.80	229.21			
24	68.6	1.305	258.76	225.93	99.999		
25	71.1	1.318	248.50	223.89			
26	75.9	1.331	236.30	213.63			
27	82.3	1.344	229.82	201.44			
28	87.1	1.358	228.59	194.95			
29	89.4	1.371	228.71	193.73			
30	90.5	1.384		193.85		34.863	.75220E+07

Str # 10 enters stg # 1 at 56.1 C, 1.00 atm, 18.892 % vapor

Str # 1 enters stg # 24 at 60.3 C, 1.00 atm, .000 % vapor

TRAY COMPOSITIONS		Unit # 1	TOWR	
Stage # 1	T = 56.13 deg C	P = 1.0000 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.995254	.992869	1.00240	
Isopropanol	.474623E-02	.713101E-02	.66558	
Total kgmol/hr	283.401	176.682		
Stage # 2	T = 56.54 deg C	P = 1.0132 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.993508	.990259	1.00328	
Isopropanol	.649224E-02	.974053E-02	.66652	
Total kgmol/hr	241.817	176.599		
Stage # 3	T = 56.94 deg C	P = 1.0265 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.991602	.987414	1.00424	
Isopropanol	.839839E-02	.125862E-01	.66727	
Total kgmol/hr	241.734	176.501		
Stage # 4	T = 57.35 deg C	P = 1.0397 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.989524	.984312	1.00529	
Isopropanol	.104764E-01	.156876E-01	.66782	
Total kgmol/hr	241.637	176.389		
Stage # 5	T = 57.76 deg C	P = 1.0530 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.987260	.980932	1.00645	
Isopropanol	.127404E-01	.190685E-01	.66814	
Total kgmol/hr	241.524	176.259		
Stage # 6	T = 58.16 deg C	P = 1.0662 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.984793	.977242	1.00773	
Isopropanol	.152075E-01	.227577E-01	.66823	
Total kgmol/hr	241.394	176.110		
Stage # 7	T = 58.56 deg C	P = 1.0794 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.982102	.973209	1.00914	
Isopropanol	.178982E-01	.267908E-01	.66807	
Total kgmol/hr	241.245	175.940		
Stage # 8	T = 58.97 deg C	P = 1.0927 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.979162	.968788	1.01071	
Isopropanol	.208382E-01	.312118E-01	.66764	
Total kgmol/hr	241.075	175.747		
Stage # 9	T = 59.37 deg C	P = 1.1059 atm		
	Y	X	K	
Acetone	.975941	.963924	1.01247	
Isopropanol	.240590E-01	.360758E-01	.66690	
Total kgmol/hr	240.882	175.527		

TRAY COMPOSITIONS		Unit # 1	TOWR	
Stage # 10	T = 59.78 deg C		P = 1.1192 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.972400	.958548	1.01445	
Isopropanol	.276001E-01	.414524E-01	.66583	
Total kgmol/hr	240.662	175.276		
Stage # 11	T = 60.19 deg C		P = 1.1324 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.968489	.952570	1.01671	
Isopropanol	.315111E-01	.474301E-01	.66437	
Total kgmol/hr	240.412	174.989		
Stage # 12	T = 60.60 deg C		P = 1.1457 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.964145	.945877	1.01931	
Isopropanol	.358554E-01	.541233E-01	.66248	
Total kgmol/hr	240.125	174.660		
Stage # 13	T = 61.02 deg C		P = 1.1589 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.959285	.938319	1.02234	
Isopropanol	.407147E-01	.616814E-01	.66008	
Total kgmol/hr	239.795	174.279		
Stage # 14	T = 61.45 deg C		P = 1.1721 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.953805	.929698	1.02593	
Isopropanol	.461951E-01	.703016E-01	.65710	
Total kgmol/hr	239.414	173.834		
Stage # 15	T = 61.89 deg C		P = 1.1854 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.947563	.919751	1.03024	
Isopropanol	.524369E-01	.802492E-01	.65343	
Total kgmol/hr	238.970	173.312		
Stage # 16	T = 62.34 deg C		P = 1.1986 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.940372	.908113	1.03552	
Isopropanol	.596281E-01	.918870E-01	.64893	
Total kgmol/hr	238.447	172.690		
Stage # 17	T = 62.82 deg C		P = 1.2119 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.931975	.894280	1.04215	
Isopropanol	.680246E-01	.105720	.64344	
Total kgmol/hr	237.825	171.941		
Stage # 18	T = 63.33 deg C		P = 1.2251 atm	
	Y	X	K	
Acetone	.922018	.877535	1.05069	
Isopropanol	.779815E-01	.122465	.63677	
Total kgmol/hr	237.076	171.023		

TRAY COMPOSITIONS		Unit # 1	TOWR	
Stage # 19	T = 63.88 deg C		P =	1.2383 atm
	Y		X	K
Acetone	.910000	.856839		1.06204
Isopropanol	.900001E-01	.143161		.62866
Total kgmol/hr	236.159	169.881		
Stage # 20	T = 64.49 deg C		P =	1.2516 atm
	Y		X	K
Acetone	.895197	.830655		1.07770
Isopropanol	.104803	.169345		.61887
Total kgmol/hr	235.016	168.430		
Stage # 21	T = 65.20 deg C		P =	1.2648 atm
	Y		X	K
Acetone	.876554	.796702		1.10023
Isopropanol	.123446	.203298		.60722
Total kgmol/hr	233.565	166.550		
Stage # 22	T = 66.06 deg C		P =	1.2781 atm
	Y		X	K
Acetone	.852519	.751641		1.13421
Isopropanol	.147481	.248359		.59382
Total kgmol/hr	231.685	164.072		
Stage # 23	T = 67.15 deg C		P =	1.2913 atm
	Y		X	K
Acetone	.820866	.691023		1.18790
Isopropanol	.179134	.308977		.57976
Total kgmol/hr	229.207	160.799		
Stage # 24	T = 68.59 deg C		P =	1.3046 atm
	Y		X	K
Acetone	.778726	.610676		1.27519
Isopropanol	.221274	.389324		.56835
Total kgmol/hr	225.934	258.755		
Stage # 25	T = 71.07 deg C		P =	1.3178 atm
	Y		X	K
Acetone	.704991	.480781		1.46634
Isopropanol	.295009	.519219		.56818
Total kgmol/hr	223.891	248.498		
Stage # 26	T = 75.86 deg C		P =	1.3310 atm
	Y		X	K
Acetone	.558427	.290278		1.92377
Isopropanol	.441573	.709722		.62218
Total kgmol/hr	213.634	236.302		
Stage # 27	T = 82.26 deg C		P =	1.3443 atm
	Y		X	K
Acetone	.339653	.129262		2.62764
Isopropanol	.660347	.870738		.75838
Total kgmol/hr	201.438	229.818		

TRAY COMPOSITIONS Unit # 1 TOWER

Stage # 28	T = 87.06 deg C	P = 1.3575 atm
	Y	X
Acetone	.151484	.473877E-01
Isopropanol	.848516	.952612
Total kgmol/hr	194.954	228.590
Stage # 29	T = 89.43 deg C	P = 1.3708 atm
	Y	X
Acetone	.550164E-01	.158598E-01
Isopropanol	.944984	.984140
Total kgmol/hr	193.726	228.710
Stage # 30	T = 90.47 deg C	P = 1.3840 atm
	Y	X
Acetone	.178134E-01	.499773E-02
Isopropanol	.982187	.995002
Total kgmol/hr	193.846	34.8640