

TUTORIAL PARA ENSINO DE ENGENHARIA QUÍMICA USANDO EXCEL

Karen Rosalino, Henrique Bernardelli

Introdução

O processo de Análise do equilíbrio líquido-vapor é o primeiro passo na análise de desenvolvimento de processos industriais químicos que envolvam substâncias na fase líquida e vapor. O objetivo desta análise é estabelecer as condições operacionais requeridas para que tenhamos, tanto o fluxo de material entre as unidades do processo determinadas como também estabelecer as condições em que estas substâncias possam vir a serem separadas em unidades em que a variação da temperatura e/ou pressão provoque a formação de fases distintas concentrando uma ou mais das substâncias envolvidas em uma das fases. Por exemplo, a operação denominada de flash, consiste na separação de uma mistura em duas fases em equilíbrio: uma fase líquida e outra vapor, sendo normalmente utilizado em plantas industriais na preparação da carga de colunas de destilação, absorção ou extração, reatores, etc.

O desenvolvimento deste tutorial propõe a implementação de uma metodologia sistematizada, a partir do uso do Excel como ferramenta computacional didática de apoio. E também que os conceitos discutidos em sala de aula sejam melhor trabalhados, possibilitando a exploração de um maior número de situações, proporcionando melhor fixação do assunto e maior capacidade de ação dos alunos e futuros profissionais.

O programa didático desenvolvido mostrou-se de fácil implementação e manuseio, permitindo a rápida obtenção de resultados. Uma diferença importante da programação em Excel, quando comparada a softwares equivalentes, é a facilidade de interagir com o programa.

Metodologia

O uso do Excel, hoje em dia uma ferramenta computacional de larga utilização nas indústrias químicas no cálculo dos balanços de material e energia, necessários ao controle das variáveis operacionais.

O uso da web permite que programas desenvolvidos em excel sejam acessados por usuários remotamente, utilizando-os como ferramenta de trabalho.

A implementação do sistema tutorial, consiste em estabelecer ao usuário condições que ele possa proceder a análise termodinâmica de equilíbrio líquido vapor, com perguntas que o usuário terá que responder para realizar a análise do processo em estudo quanto aos aspectos de equilíbrio de fases, determinando que cálculos e dados serão necessários para a resolução do cenário estabelecido a ser resolvido.

Resultados e discussão

Nesta primeira fase, foi desenvolvido um programa em Excel com o auxílio da linguagem de programação VBA para a aplicação da análise.

Inicialmente o usuário deve conhecer as substâncias que deseja analisar e as propriedades físicas destas. Para determinar a pressão nos pontos de bolha e de orvalho é necessário conhecer a temperatura e a composição. Esta temperatura tem que estar entre o ponto de ebulição mais baixo e o mais alto entre as substâncias. Para saber esses valores o usuário deve acessar o banco de dados que está disponível acessando o link indicado.

Já para conhecer a temperatura nos pontos de bolha e orvalho o usuário precisa conhecer as pressões de vapor das substâncias, que estão disponíveis no banco de dados. É necessário escolher uma pressão entre as pressões das substâncias. A figura 1 mostra como ficará a planilha de entrada.

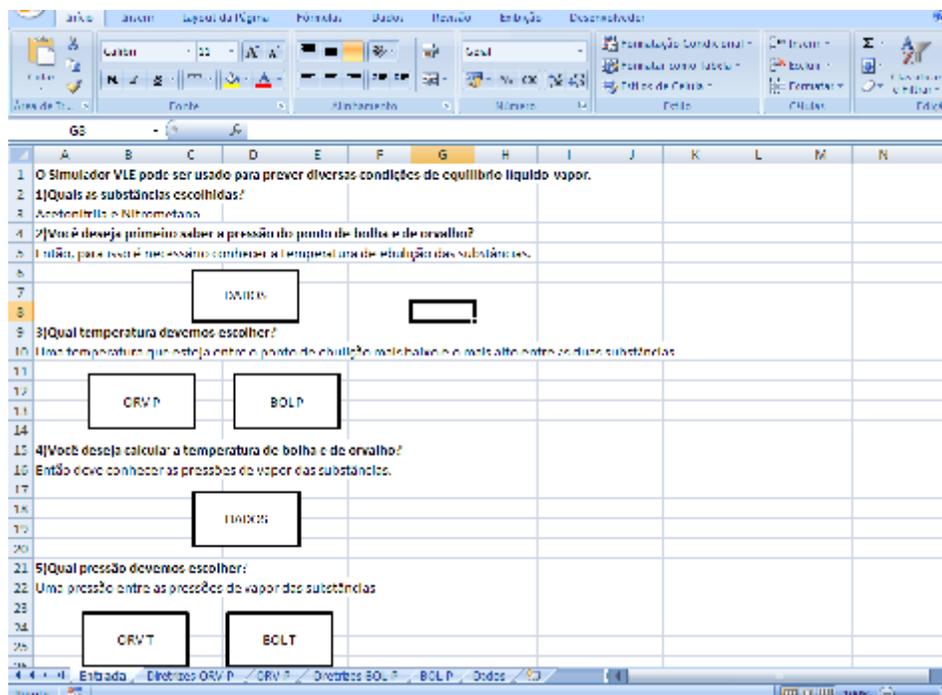


Figura 1

Após escolher o ponto desejado o usuário deve fornecer os dados de entrada. O cálculo é feito com um método iterativo de resolução das equações, logo após é gerado o gráfico.

O cálculo do ponto de bolha, conhecendo x_i (composição na fase líquida) e T , considerando γ_i (fugacidade) e ϕ_i (coeficiente de atividade) igual a 1. Inicia-se calculando P_i^{Sat} (pressão de saturação) através da equação:

$$P_i^{Sat} = A - \frac{B}{T + C} \quad (1)$$

Onde A, B e C são tabelados.

Após encontrar a P^{Sat} , calcule para cada composição P através da equação:

$$P = \sum \frac{x_i \gamma_i P_i^{Sat}}{\phi_i} \quad (2)$$

Após encontrar P, calcula-se y_i através da equação:

$$y_i = \frac{x_i \gamma_i P_i^{Sat}}{\phi_i P} \quad (3)$$

O cálculo do ponto de orvalho, conhecendo y_i (composição na fase vapor) e T, considerando ϕ_i e γ_i igual a 1. Inicia-se calculando P_i^{Sat} através da equação 1. Em seguida calcula-se P através da equação:

$$P = \frac{1}{\sum y_i \phi_i / \gamma_i P_i^{Sat}} \quad (4)$$

Após encontrar P, calcula-se x através da equação:

$$x_i = \frac{y_i \phi_i P}{\gamma_i P_i^{Sat}} \quad (5)$$

Nos cálculos de BOL T e ORV T, a temperatura deve ser encontrada. Apesar de as pressões de vapor dependerem da temperatura. O cálculo pode ser feito pelas razões:

$$P_j^{Sat} = \frac{P}{\sum \left(\frac{x_i \gamma_i}{\phi_i} \right) (P_i^{Sat} / P_j^{Sat})} \quad (6)$$

$$P_j^{Sat} = P \sum \frac{y_i \phi_i}{\gamma_i} \left(\frac{P_j^{Sat}}{P_i^{Sat}} \right) \quad (7)$$

Explicitando T temos:

$$T_i^{Sat} = \frac{B_j}{A_j - \ln P_j^{Sat}} - C_j \quad (8)$$

$$T = \sum x_i T_i^{Sat} \quad (9)$$

No caso de conhecer Y_i :

$$T = \sum y_i T_i^{Sat} \quad (10)$$

Conclusão

Os valores obtidos para as substâncias testadas foram de ótima aproximação comparando com os valores na literatura.

Este programa permite que o usuário visualize rapidamente as alterações feitas nas variáveis envolvidas na análise do equilíbrio, reduzindo o tempo de trabalho.

Referências

SMITH, J. M.; "Introdução à Termodinâmica da engenharia Química", Guanabara Dois, 3^a ed.