

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA JÚLIO DE MESQUITA FILHO
INSTITUTO DE QUÍMICA DE ARARAQUARA**

Lucas de Moraes Salles Midon

**Interface didática sobre o método McCabe-Thiele para colunas de destilação no
Excel/VBA**

ARARAQUARA

2022

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA JÚLIO DE MESQUITA FILHO
INSTITUTO DE QUÍMICA DE ARARAQUARA**

Lucas de Moraes Salles Midon

**Interface didática sobre o método McCabe-Thiele para colunas de destilação no
Excel/VBA**

**Trabalho de conclusão de curso de
Engenharia Química do Instituto de
Química – UNESP Araraquara**

**Orientador: Prof. Dr. Gustavo Nakamura
Alves Vieira**

ARARAQUARA

2022

M629i Midon, Lucas de Moraes Salles
Interface didática sobre o método McCabe-Thiele para colunas de destilação
no Excel/VBA / Lucas de Moraes Salles Midon. -- Araraquara, 2022
55 f. : il.

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Engenharia Química) -
Universidade Estadual Paulista (Unesp), Instituto de Química, Araraquara
Orientador: Gustavo Nakamura Alves Vieira

1. Excel (Programa de computador). 2. Destilação. 3. Visual Basic
(Linguagem de programação de computador). 4. Engenharia química. 5.
Misturas (Química). I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca do Instituto de Química,
Araraquara. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

LUCAS DE MORAES SALLES MIDON

**Interface didática sobre o método McCabe-Thiele para colunas de destilação no
Excel/VBA**

**Trabalho de conclusão de curso de
Engenharia Química do Instituto de
Química – UNESP Araraquara**

Araraquara, 03 de dezembro de 2022

BANCA EXAMINADORA

Lorena Oliveira Pires

Profa. Dra. Lorena Oliveira Pires

Instituto de Química – UNESP, Araraquara

Leandro Martins

Prof. Dr. Leandro Martins

Instituto de Química – UNESP, Araraquara

Gustavo Nakamura Alves Vieira

Prof. Dr. Gustavo Nakamura Alves Vieira

Instituto de Química – UNESP, Araraquara

**Gustavo Nakamura Alves
Vieira**

Assinado de forma digital por Gustavo
Nakamura Alves Vieira
Dados: 2022.02.04 13:10:30 -03'00'

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho ao Antônio José, meu querido avô, que teve a oportunidade de ver um de seus netos ingressar em Engenharia Química, numa universidade pública, mas não conseguiu estar presente para vê-lo sair.

Também dedico ao Clóvis, meu tio avô, que também não me viu encerrar este ciclo mas acreditou que isto era possível.

AGRADECIMENTOS

Aos amigos e amigas que tive a oportunidade de conhecer durante os anos de universidade e pude compartilhar bons momentos, principalmente em momentos de lazer e de trabalho voluntário em projetos de extensão.

Aos professores que motivaram e acreditaram que um dia este momento chegaria.

Ao meu orientador que me deu a liberdade de desenvolver um projeto desafiador e me acompanhou nesta jornada, agradeço por todo aprendizado!

Aos amigos e amigas que estiveram presentes na pandemia e foram essenciais para que este período tenha sido mais leve e com muito entretenimento.

À minha namorada que me inspirou e me acompanhou nesta jornada científico-acadêmica e nos momentos finais da graduação, além de compartilhar com o apoio de sua família.

À minha república que me acolheu como uma segunda família e deixou lembranças que eu jamais vou esquecer.

À minha família que torceu à distância para a conclusão dessa etapa da vida.

E por fim, mas não menos importante, à minha mãe, meu pai e minha irmã que foram pilares essenciais durante este ciclo, apoiando de diversas maneiras. Estamos nos graduando em Engenharia Química!

EPÍGRAFE

“Valeu a pena? Tudo vale a pena se a alma não é pequena. Quem quer passar além do Bojador tem que passar além da dor. Deus ao mar o perigo e o abismo deu, mas nele é que espelhou o céu.”

Fernando Pessoa*

* Mensagem. Fernando Pessoa. Lisboa: Parceria António Maria Pereira, 1934 (Lisboa: Ática, 10ª ed. 1972).

RESUMO

A destilação é uma operação unitária que realiza separações no equilíbrio líquido-vapor. A mistura é alimentada no equipamento e flui através de estágios que otimizam a transferência de massa entre as fases para a obtenção de produtos de topo e fundo. Segundo McCabe, esta é fundamentada na diferença de volatilidade e depende da composição e temperatura da mistura. O trabalho foi desenvolvido para a mistura binária de benzeno-tolueno, considerando um processo contínuo e estacionário. Com isto, utilizou-se as equações relacionadas ao equilíbrio líquido-vapor, ao modelo *Non-Random Two-Liquid* (NRTL) e ao método McCabe-Thiele a fim de determinar o número ideal de estágios. O projeto teve sua motivação na automatização da resolução de um estudo de caso utilizando um software acessível, Microsoft Excel, e sua linguagem de programação, *Visual Basic for Applications* (VBA), sendo possível a utilização desta interface para fins didáticos relacionados às operações unitárias. A construção do diagrama Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV) desenvolveu-se com o uso do modelo NRTL por meio da equação de Antoine e o suplemento Solver, do Excel. Com o gráfico construído, calcularam-se os balanços de massa necessários para a construção das retas de operação e, com o auxílio do Solver, dos estágios de equilíbrio da coluna. Para isto, foram realizadas automatizações com códigos e o desenvolvimento da interface no VBA além das simulações com variação dos parâmetros a serem inseridos a fim de obter análises sobre a metodologia. Concluiu-se que a interface cumpriu sua funcionalidade ao simular diferentes cenários de uma coluna de destilação em um curto intervalo de tempo, e possibilitou uma maior compreensão do conteúdo.

Palavras-chave: Excel (Programa de computador), Destilação, Visual Basic (Linguagem de programação de computador), Engenharia Química, Misturas (Química).

ABSTRACT

Distillation is a unit operation that conducts liquid-vapour separations. The mixture is fed to the equipment and flows through stages, which optimize mass transfer among phases to obtain top and bottom products. In accordance with McCabe, this is reasoned on volatility difference and depends on mixture composition and temperature. This work focused on the continuous and stationary distillation process for binary mixtures. In this context, liquid-vapour equations were used and the McCabe-Thiele method was developed in a spreadsheet, in order to calculate the optimal number of stages. This work was motivated by the automation of this exercise solving using an affordable software, MS Excel, and its programming language, VBA, so that the interface can be used for explanatory purposes of Unit Operations III teaching. For the establishment of ELV diagram, the NRTL method with Antoine's equation and the Solver supplement, of Excel, are requisite. For obtaining the graphic interface, the necessary mass balances for the operating line establishment were obtained, and with the aid of the Solver, the column equilibrium stages also. In this field, automations with codes and the development of the interface on VBA were done, aside from simulations of the input data, in order to obtain methodology analysis.

It is therefore concluded that the interface accomplished its role by the simulation of different sets of a distillation column in a short period of time, allowing a better comprehension of the subject.

Keywords: Excel (Computer file), Distillation, Visual Basic, Chemical engineering, Mixtures.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Exemplo de diagrama ELV (XY).	22
Figura 2.2 – Balanço de material relacionado a prato n.	25
Figura 2.3 – Exemplo de retas de trabalho.	26
Figura 2.4 – Estágios de operação.	27
Figura 3.1 – Parâmetros NRTL e Antoine para a mistura benzeno-tolueno, pressão do sistema e constante dos gases ideais para o cálculo dos equilíbrios de fases.	30
Figura 3.2 – Esquema utilizado para o método NRTL e a equação de Antoine na planilha.	30
Figura 3.3 – Tela para utilização do Solver.	31
Figura 4.1 – Tela inicial do programa.	34
Figura 4.2 – Tela de inserção dos parâmetros de Antoine e NRTL.	35
Figura 4.3 – Tela de inserção do balanço de massa e das condições terminais e de alimentação.	36
Figura 4.4 – Tela contendo o resultado final.	36
Figura 4.5 – Tela de resultados quando a vazão de alimentação é de 100 kgmol.h ⁻¹ .	38
Figura 4.6 – Tela de resultados quando a vazão de alimentação é de 50 kgmol.h ⁻¹ .	39
Figura 4.7 – Tela de resultados quando a vazão de alimentação é de 150 kgmol.h ⁻¹ .	39
Figura 4.8 – Tela de resultados para uma razão de refluxo igual a 4.	40
Figura 4.9 – Tela de resultados para uma razão de refluxo igual a 3.	40
Figura 4.10 – Tela de resultados para uma razão de refluxo igual a 2.	40
Figura 4.11 – Tela de resultados com temperatura de alimentação igual a 327,6 K.	41
Figura 4.12 – Tela de resultados com temperatura de alimentação igual a 350 K.	42
Figura 4.13 – Tela de resultados com temperatura de alimentação igual a 400 K.	42
Figura 4.14 – Tela de resultados quando a composição de fundo x_w é 0,05.	43
Figura 4.15 – Tela de resultados quando a composição de fundo x_w é 0,15.	43
Figura 4.16 – Tela de resultados quando a composição de alimentação x_f é 0,4.	44
Figura 4.17 – Tela de resultados quando a composição de fundo x_w é 0,56.	44
Figura 4.18 – Tela de resultados para uma composição de topo x_d igual 0,8.	45
Figura 4.19 – Tela de resultados para uma composição de topo x_d igual 0,99.	46

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
2.1	Destilação	21
2.2	Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV)	22
2.3	Método McCabe-Thiele	24
2.4	Ferramentas educacionais	28
2.5	Ferramentas computacionais	28
3	MATERIAIS E MÉTODOS	29
3.1	Diagrama Equilíbrio Líquido-Vapor	29
3.2	Método McCabe-Thiele	31
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	33
4.1	Rotinas implementadas no Excel	33
4.1.1	Módulos	33
4.1.2	Formulários	34
4.2	Estudo de caso: Benzeno e Tolueno	37
4.2.1	Vazão de alimentação	38
4.2.2	Razão de refluxo	39
4.2.3	Condição de alimentação	41
4.2.4	Condições terminais	43
5	CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	47
6	REFERÊNCIAS	49
	APÊNDICE A – EXEMPLIFICAÇÃO DE CÓDIGOS	51
A.1	Reset	51
A.2	Balanco de massa	52
A.3	Método McCabe-Thiele	52
A.4	Tela inicial	53
A.5	Inserção de dados para construção do diagrama ELV	54

1 INTRODUÇÃO

Colunas de destilação são equipamentos que realizam separações de misturas que estão no estado líquido-vapor. Geralmente estas são divididas em duas regiões, o esgotamento e a retificação, e nelas ocorre o equilíbrio líquido-vapor da mistura binária. O composto passa por estágios de equilíbrio que possuem a função de otimizar a transferência de massa entre as fases. Com este método é possível determinar qual é o estágio ótimo de alimentação e a quantidade ideal de estágios para uma coluna com determinadas condições (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

O projeto foi realizado no Microsoft Excel, cuja escolha se deu por ser um software mais acessível e também por possuir as ferramentas necessárias para a realização dos cálculos algébricos, a implementação dos métodos e automatizar as ações utilizando o VBA, uma linguagem de programação procedural (GOMES, 2019).

A motivação deste trabalho foi a resolução manual de exercícios pelo método McCabe-Thiele, algo complexo e que pode se estender por um longo período de tempo, já que envolve a representação do diagrama Equilíbrio Líquido-Vapor de uma dada mistura. Posteriormente, o método gráfico é aplicado com o auxílio de um cálculo prévio do balanço de massa para determinar as retas de trabalho que são ajustadas pelas condições terminais da coluna. Após isto, são calculadas as relações de equilíbrio para que os estágios de equilíbrio sejam traçados no gráfico. Na parte gráfica, a dificuldade era traçar de maneira precisa cada estágio de acordo com as frações molares calculadas (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

Com a pretensão de otimizar essa adversidade, a interface foi desenvolvida e a sua principal vantagem é a obtenção dos resultados em poucos segundos além de ter maior precisão uma vez que o gráfico é realizado de forma computacional, não possuindo erros de paralaxe.

Por conseguinte, a interface poderá ser utilizada para fins didáticos a fim de oferecer variados cenários à medida que há alguma alteração de parâmetro. A estrutura deste documento terá início na definição da operação unitária, do método utilizado e uma breve descrição da importância do uso de interfaces computacionais para otimizar a resolução de problemas. Após isso é explicado como os métodos foram implementados no Excel e automatizados no VBA sendo possível alterar alguns parâmetros para a análise comportamental da coluna. Ao final se tem a conclusão e o apêndice com alguns códigos exemplificados.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Destilação

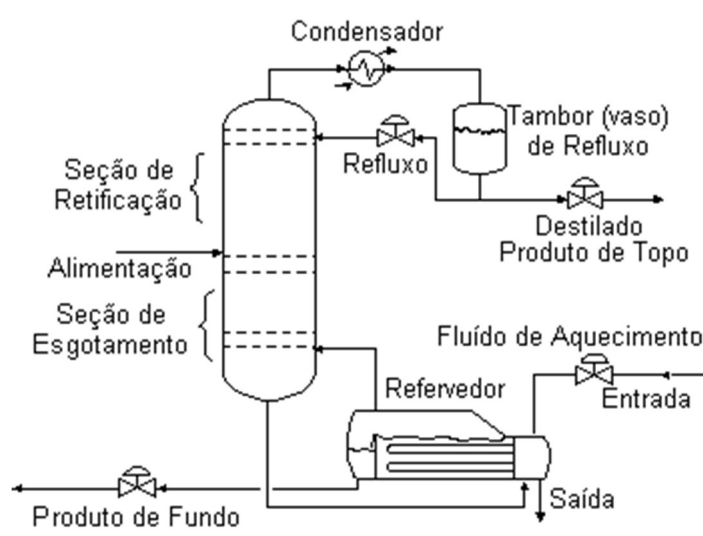
Segundo McCabe et al. (2004), a destilação é uma operação unitária de separação líquido-vapor depende da composição, temperatura e diferença de volatilidade dos componentes da mistura. Esta, pode conter dois componentes (binária) ou mais (multicomponente). Quando alimentada à coluna de destilação, em estado líquido, ela realiza um fluxo descendente até o refeedor em que é submetida a temperatura de bolha da mistura, entrando em estado de vaporização e realizando um fluxo ascendente na coluna.

O objetivo da destilação é separar os componentes obtendo purezas diferentes nas misturas dos produtos de topo e de fundo sendo mais rica no componente mais volátil e no menos volátil, respectivamente.

A coluna é constituída por estágios, que podem ser pratos ou recheios que tem a função de otimizar a transferência de massa no equilíbrio, por um condensador, o qual possui o papel de resfriar o vapor de topo para a obtenção do produto e de um refeedor, que faz com que a coluna tenha o aumento de temperatura para alcançar o equilíbrio entre os componentes da mistura (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

A descrição da operação unitária está contida na Figura 2.1 em que se pode observar as zonas de retificação e esgotamento, os equipamentos periféricos e os fluxos de entrada e saída da coluna.

Figura 2.1 – Componentes da coluna de destilação.



Fonte: POLI USP (2022).

Neste trabalho o enfoque será em misturas binárias, sendo um processo contínuo e estacionário, em que se considera os parâmetros de temperatura e pressão constantes.

2.2 Equilíbrio Líquido-Vapor (ELV)

Este tipo de equilíbrio acontece nos pratos da coluna e utilizam como referência inicial a composição molar da mistura alimentada. Durante o funcionamento, as frações molares variam enquanto passam pelos estágios respeitando a seguinte relação:

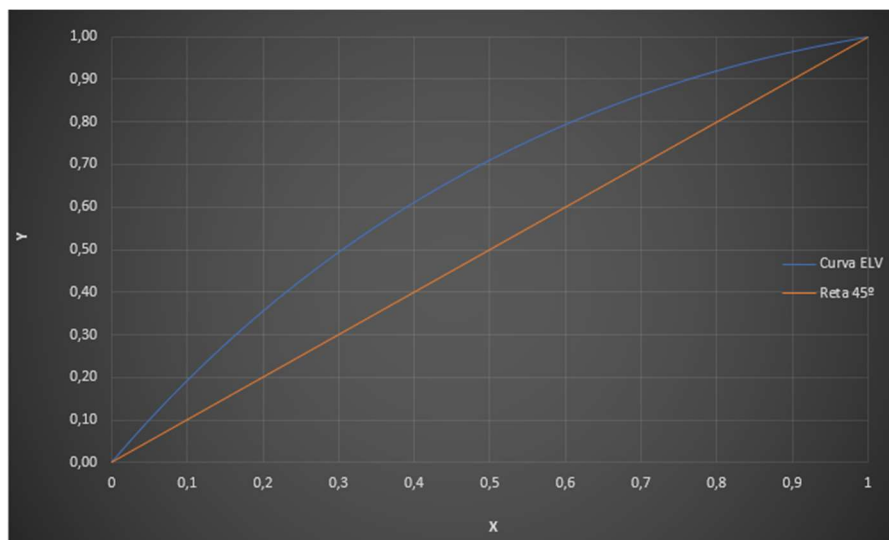
$$x_1 + x_2 = 1 \quad (1)$$

Sendo x a composição do líquido referente aos componentes 1 e 2 da mistura binária.

Para uma análise mais precisa é utilizado o diagrama de equilíbrio líquido-vapor que consiste numa curva de equilíbrio da mistura a ser analisada e pela reta com angulação de 45° construída a partir da replicação dos dados de fração molar do líquido para o componente mais volátil. Quando há a intersecção da curva de equilíbrio com esta reta podemos afirmar que houve a formação de um azeótropo, caracterizado pelo encontro do ponto de ebulição dos componentes da mistura (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

A Figura 2.2 contém o diagrama ELV considerando benzeno e tolueno como a mistura binária utilizada.

Figura 2.2 – Exemplo de diagrama ELV (XY).



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

O diagrama apresentado na Figura 2.2 pode ser construído utilizando métodos diferentes, neste caso, foi necessária a utilização da equação de Antoine, em (2), do modelo

termodinâmico NRTL e, conseqüentemente, a obtenção de seus parâmetros por meio da literatura (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007).

$$\log P_{sat,i} = A_i - \frac{B_i}{C_i + T} \quad (2)$$

A equação acima é utilizada para o cálculo da pressão de vapor $P_{sat,i}$ para ambos componentes. A temperatura T será a variável do método para a construção do diagrama e os parâmetros A_i , B_i e C_i são constantes de cada substância, as unidades dos parâmetros foram relacionadas com a origem dos dados (ANDRADE, 1997).

O método NRTL, considerando sistemas binários, é definido por (3) e (4), em que se faz necessário o cálculo do coeficiente de atividade (γ) utilizando a composição molar (x) para os componentes 1 e 2 (ANDRADE, 1997).

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\tau_{21} \left(\frac{G_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} \right)^2 + \frac{G_{12} \tau_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \quad (3)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\tau_{12} \left(\frac{G_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}} \right)^2 + \frac{G_{21} \tau_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \quad (4)$$

Para isto, calcula-se o parâmetro binário de interação do modelo NRTL (τ) dado os parâmetros de ajuste do modelo (B_{12} e B_{21}), a constante geral dos gases ideais (R) e a temperatura (T).

$$\tau_{12} = \frac{b_{12}}{RT} \quad (5)$$

$$\tau_{21} = \frac{b_{21}}{RT} \quad (6)$$

E também os valores de G_{12} e G_{21} , que dependem dos parâmetros de interação do modelo para um par particular de espécies α , τ_{12} e τ_{21} que podem ser encontrados em Van Ness et al. (2007).

$$G_{12} = e^{(-\alpha\tau_{12})} \quad (7)$$

$$G_{21} = e^{(-\alpha\tau_{21})} \quad (8)$$

A utilização deste método possibilita encontrar os dados do diagrama ELV que são considerados semelhantes aos experimentais, como a temperatura de bolha da mistura (T_b) e as composições molares de vapor (y_i), esta que será calculada em (9) (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2007).

$$y_i = \frac{x_i P_{sat,i} \gamma_i}{P} \quad (9)$$

Resumidamente, cada cálculo de equilíbrio é relacionado com a manipulação das equações algébricas não-lineares compostas pelas equações (1) a (9), mais o fato de que a soma das frações molares na fase gasosa y_i é igual a 1.

2.3 Método McCabe-Thiele

A partir da obtenção do diagrama pode ser utilizado o procedimento gráfico que consiste na análise das variáveis da coluna e de cada estágio de equilíbrio para a determinação do número de estágios ideal e do estágio de alimentação (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

O método McCabe-Thiele possui algumas hipóteses, como a constância das vazões de vapor e líquido nas regiões da coluna, que deixam a sua aplicabilidade mais simplificada e um pouco menos precisa que outros métodos que utilizam, por exemplo, balanços de energia para a resolução deste tipo de problema (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

Como observado na Figura 2.1, a coluna de destilação é separada em zonas que se encontram ao redor do estágio ótimo de alimentação. A zona acima deste prato é chamada de retificação e a de baixo, esgotamento. A partir delas foram obtidos os balanços de massa para a alimentação, a retificação e o esgotamento, traçadas no diagrama obtido anteriormente e fizeram parte da análise gráfica utilizada como metodologia (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

A reta de alimentação é caracterizada pelo estado físico da mistura que entra na torre de destilação, o qual depende das condições térmicas que os componentes são submetidos e do fator q , conforme mostra a equação 10.

$$q = 1 + \frac{c_{pL}(T_b - T_f)}{\lambda} \quad (10)$$

Acima podemos compreender que o fator depende do calor específico da mistura no estado líquido (c_{pL}), em kJ/kgmol.K, da temperatura de bolha (T_b) e de alimentação (T_f), em K, e do calor latente molar da mistura (λ), em kJ/kgmol (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004). Com o valor calculado, a reta pode ser encontrada pela equação 11 e tem por sua definição os estados encontrados na Tabela 1.

$$y = \frac{q}{q-1}x - \frac{1}{q-1}x_f \quad (11)$$

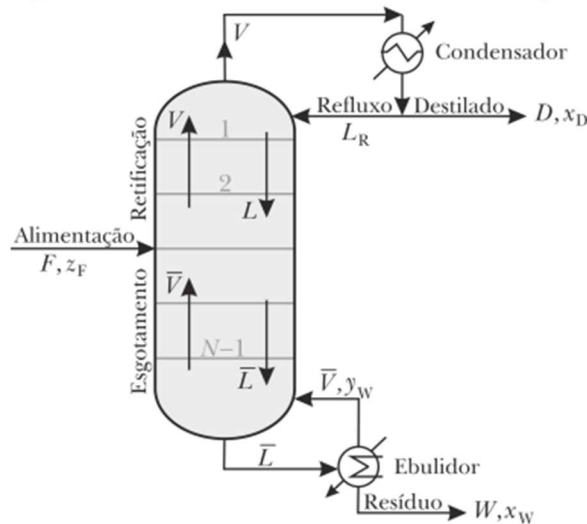
Tabela 1– Estados distintos para a condição de alimentação em relação ao fator q.

Condição de alimentação	q
Líquido sub-resfriado	>1
Líquido no ponto de bolha	1
Líquido vaporizado	0<q<1
Vapor no ponto de orvalho	0
Vapor superaquecido	<0

Fonte: MCCABE, SMITH & HARRIOT (2004, p. 679).

O método é fundamentado por balanços de massa globais e por componentes de colunas de destilação, como pode ser mostrado em relação aos pratos pela Figura 2.3.

Figura 2.3 – Esquema de uma coluna de destilação com estágios de equilíbrio.



Fonte: AZEVEDO & ALVES (2013).

O balanço de massa para o prato n está definido em (12) e o para o componente mais volátil em (13).

$$\bar{V} + L = V + \bar{L} \quad (12)$$

$$\bar{V} y_{N-1} + Lx_2 = Vy_n + \bar{L}x_n \quad (13)$$

Em que V e L são as vazões de vapor e líquido, respectivamente, e os subscritos relacionam-se com os pratos como na Figura 2.3 (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

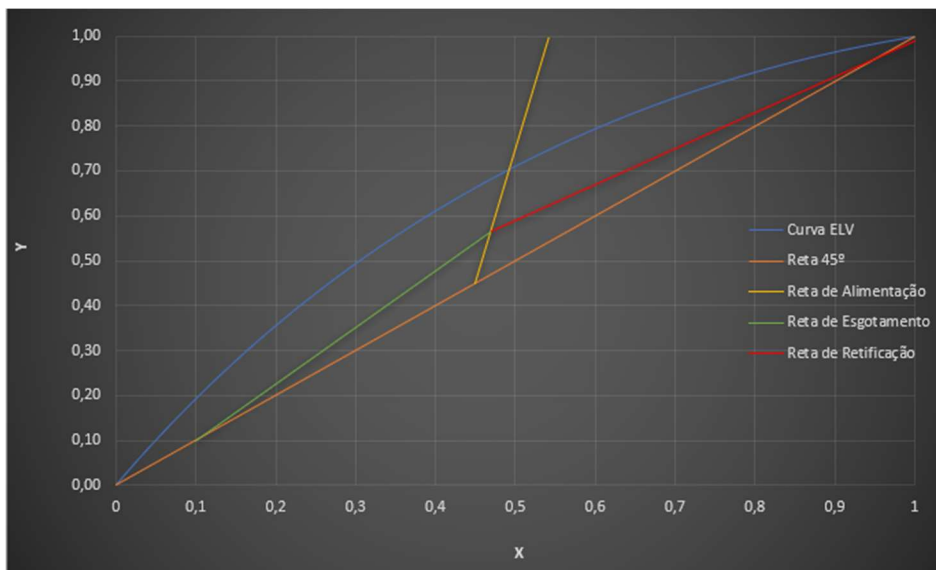
A partir destas equações é possível encontrar a reta de trabalho para a retificação em (14).

$$y = \frac{L}{V}x + \frac{D}{V}x_D \quad (14)$$

Já a reta de esgotamento pode ser encontrada considerando o seu primeiro ponto como (x_w, y_w) e o último sendo a intersecção da reta de alimentação com a retificação, significando a transição das partes da coluna (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

A Figura 2.4 contém o diagrama ELV com as retas de alimentação, esgotamento e retificação traçadas.

Figura 2.4 – Exemplo de retas de trabalho.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Também se fazem necessários os cálculos dos balanços de massa global da coluna, em 15, pelo componente mais volátil, em 16, no condensador, em 17 e 18, e no refeedor, em 19 e 20.

$$F = D + W \quad (15)$$

$$Fx_F = Dx_D + Wx_W \quad (16)$$

$$V = L + D \quad (17)$$

$$R = L \quad (18)$$

$$L' = V' + W \quad (19)$$

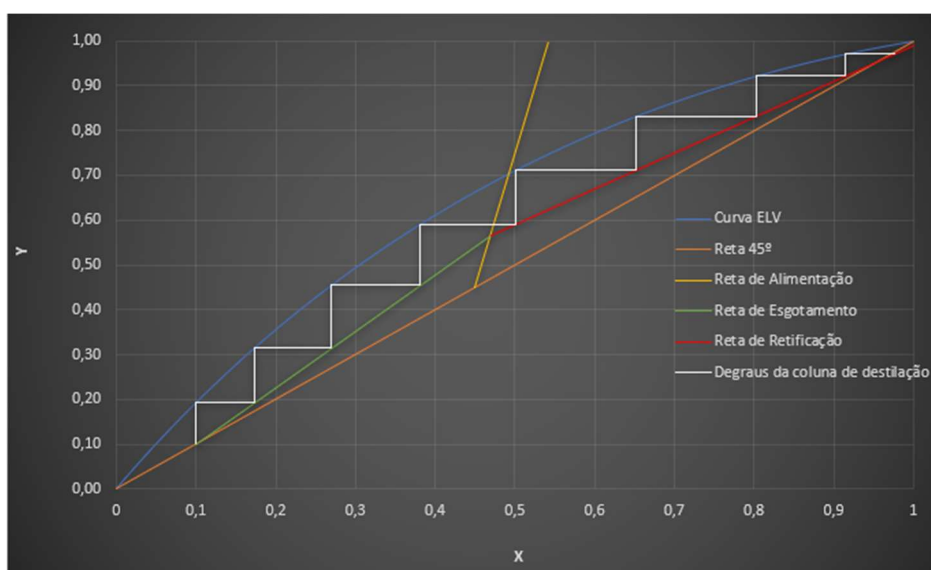
$$L' = L + qF \quad (20)$$

As variáveis de vazão que constituem estas equações podem ser definidas por F (alimentação), D (destilado), W (esgotamento), R (refluxo), L' (líquido no esgotamento), V' (vapor no esgotamento) (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

As variáveis acima possibilitam o cálculo de cada fração molar do líquido e vapor e serão colocados ordenadamente no gráfico. Com o auxílio de condições terminais de fração molar do componente mais volátil, serão utilizadas, respectivamente, relações de equilíbrio e os balanços de massa na zona de esgotamento e, após passar a reta de alimentação, na zona de retificação permitindo o cálculo do número ideal de estágios teóricos, característica essencial para o dimensionamento de uma coluna de destilação. Cada vez que há o encontro com a curva de equilíbrio há um estágio de equilíbrio. O refeedor é considerado como o primeiro estágio (MCCABE; SMITH; HARRIOT, 2004).

A Figura 2.5 contém o diagrama ELV com as retas de trabalho e de alimentação e com o resultado final da aplicação do método, obtendo o número ideal de estágios para esta mistura de benzeno e tolueno.

Figura 2.5 – Estágios de operação.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Além disto, também é possível encontrar qual o estágio ótimo de alimentação, que é referente ao encontro do estágio de equilíbrio com a reta de alimentação, na transição do esgotamento para a retificação.

2.4 Ferramentas educacionais

A metodologia de ensino sobre engenharia química é árdua quando tentamos resolver problemas complexos de forma manual. Nos dias de hoje, se torna necessária a aplicação de ferramentas computacionais para a demonstração de variadas condições de operação de uma coluna de destilação. Caso o método McCabe-Thiele seja aplicado de forma manual seria necessário um longo período de resolução para mostrar as possíveis condições e os respectivos resultados (GOMES, 2019).

2.5 Ferramentas computacionais

Hoje em dia, vivemos o que chamamos de Indústria 4.0, sendo uma nova revolução industrial que tem como base a utilização da tecnologia para otimização dos processos industriais. Sendo necessária a aplicação computacional dos métodos manuais com o intuito de não só diminuir o tempo de resolução de problemas, mas como mostrar de maneira precisa os variados cenários que podemos obter (SENAI, 2021).

Podem ser enumerados os conceitos principais desta revolução, sendo o tratamento de grandes bases de dados (Big Data), a internet das coisas (IoT), a computação em nuvem, as manufaturas digital e aditiva, a robótica e a segurança digital (SENAI, 2021).

Com isto, a motivação deste trabalho foi utilizar um dos softwares mais acessíveis e mais utilizados em ambientes de ensino (MS Excel) para construir uma interface com rotina de programação para a resolução de problemas de coluna de destilação utilizando o método de McCabe-Thiele e sendo possível sua aplicação para fins didáticos (SENAI, 2021).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

O projeto foi realizado, no período de ensino remoto, em um computador pessoal contendo o MS Excel e utilizando planilhas habilitadas para macros. O método de cálculo foi implementado na planilha até a obtenção dos resultados necessários, seguido de atualizações como a programação de macros para a automatização das tarefas que seriam realizadas manualmente.

Inicialmente, gerou-se o diagrama de composições de equilíbrio para o sistema; posteriormente, a planilha realizou, com base nas equações anteriores, os cálculos com os balanços de massa e temperaturas de bolha para cada estágio. O procedimento será descrito nas seções a seguir.

3.1 Diagrama Equilíbrio Líquido-Vapor

Para a descrição do equilíbrio de fases, supôs-se que a fase gasosa se comporte como um gás ideal, mas que a fase líquida se comporte como mistura não-ideal (lei de Raoult modificada), que, resumidamente, é o sistema de equações composto pelas equações (1) a (9), mais o fato de que a soma das frações molares dos componentes na fase vapor é igual a 1. O modelo termodinâmico para descrever o coeficiente de atividade para a construção do diagrama foi o NRTL. Para isto, variaram-se os valores de fração molar dos componentes 1 e 2 de 0 até 1, manipulando a equação (1) da seguinte maneira:

$$x_1 = 1 - x_2 \quad (21)$$

O valor de x_1 iniciou-se em 0 e aumentou 0,01 para cada ponto, totalizando 101 valores de cada fração molar.

O intervalo padrão de temperatura de ebulição, relacionado às substâncias puras de benzeno e tolueno, possui valor inicial de 30,30°C e variou em 0,3 até atingir 60,30°C. Isto se torna necessário para aumentar a precisão de uma posterior utilização do Solver.

Com o objetivo de encontrar os coeficientes de atividade (γ) nas equações (3) e (4), para cada um dos 101 pontos, é essencial a utilização de B_{12} , B_{21} , R e T em (5) e (6) obtendo o parâmetro binário de interação (τ) de cada componente, este é aplicado em (7) e (8) para o cálculo de G.

A Tabela 2 contém os parâmetros necessários para realizar o cálculo do diagrama ELV.

Tabela 2 – Parâmetros NRTL e Antoine para a mistura benzeno-tolueno, pressão do sistema e constante dos gases ideais para o cálculo dos equilíbrios de fases.

Parâmetros do modelo		Unidade
b12.	111,12	cal/mol
b21.	-121,24	cal/mol
alfa	0,30	-
A1.	13,78	-
B1.	2726,81	-
C1.	217,57	-
A2.	13,93	-
B2.	3056,96	-
C2.	217,63	-
P	101,33	kPa
R	1,99	cal/K.mol

Fonte: SMITH, VAN NESS & ABBOTT (2007).

Também foi necessário determinar as pressões de vapor para cada temperatura a partir dos parâmetros de Antoine em (2). Em seguida, usam-se as composições molares do líquido, a pressão de vapor, o coeficiente de atividade das substâncias e a pressão da coluna para encontrar os valores de fração molar de vapor (y) em (9).

A Tabela 3 contém um exemplo de como foi organizado o esquema da aplicação do método NRTL na planilha eletrônica.

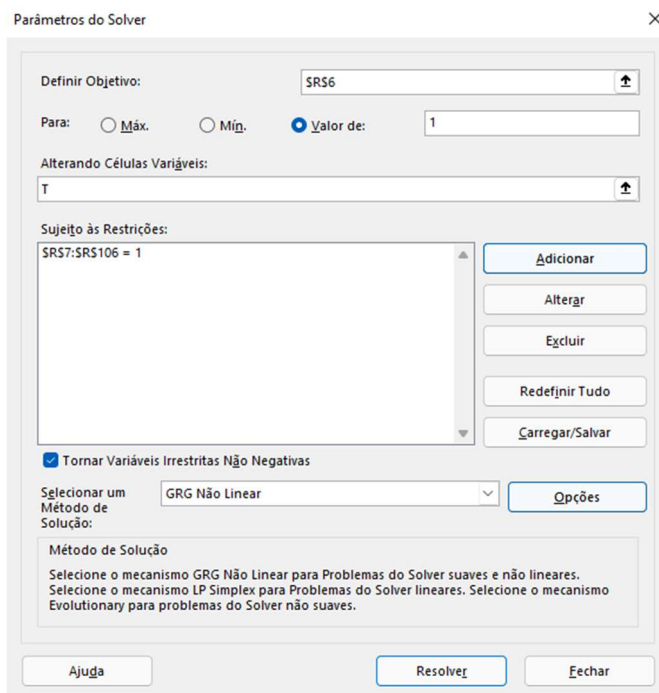
Tabela 3 – Esquema utilizado para o método NRTL e a equação de Antoine na planilha.

Fração molar		Parâmetros								Fração molar		
x1.	x2.	T	tau12	tau21	G12.	G21.	gama1	gama2	pv1	pv2	y1.	y2.
0	1	110,60	0,5051	-0,5511	0,8580	1,1819	0,889	1,000	238,1171	101,325	0,00	1,0000

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Com a planilha de cálculos montada utiliza-se o Solver, suplemento do Excel utilizado para teste de hipóteses, variando a temperatura com o objetivo de encontrar os valores em que a soma das frações molares de vapor (y_1 e y_2) seja igual a 1, como mostra na Figura 3.1. Após a execução do solver são obtidos todos os valores de y para o intervalo.

Figura 3.1 – Tela para utilização do Solver.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Como o objetivo é traçar o diagrama XY, contido na Figura 2.1, para o componente mais volátil da mistura, foi criada uma série do gráfico com o intervalo dos 101 números para x_1 e y_1 . Além disto, se torna necessária a construção da reta com inclinação de 45° com os valores de x_1 repetidos nos eixos cartesianos. Esta reta é a referência de análise da mistura para saber se há pontos de azeótropos, ou não.

Nesta parte da planilha foram utilizadas ferramentas de formatação como as cores da fonte, preenchimento da célula, alinhamento de texto, utilização de nomes para referenciar os parâmetros utilizados, fórmulas algébricas e o Solver. A automatização foi descrita a partir da Seção 4.1.

3.2 Método McCabe-Thiele

O diagrama encontrado no item anterior é essencial para a resolução deste problema utilizando o método gráfico McCabe-Thiele. Inicialmente são realizadas as manipulações algébricas referente ao Balanço de Massa para encontrar as equações genéricas das retas de operação para a alimentação e retificação, presentes em (11) e (14), respectivamente. Estas, foram manipuladas com o objetivo de encontrar os coeficientes das retas (angular e linear) para obtenção do ponto de intersecção entre as retas da região do esgotamento com a retificação, este que será o ponto final da reta de esgotamento e o ponto inicial equivale a (x_w, y_w) .

O primeiro passo para a obtenção dos valores contidos no intervalo de cada série das retas de operação é a inserção dos parâmetros referentes ao balanço de massa (F e R), às condições terminais da coluna (x_w , x_f e x_d) e à condição de alimentação (C_{pl} , T e λ).

A fim de encontrar os parâmetros W, D, L, V, L' e V' foram desenvolvidas funções para o balanço de massa, as quais serão explicadas posteriormente, que são equivalentes às equações (12) a (17).

Com a intenção de determinar a condição de alimentação, em que T_b é calculado com o auxílio de x_f , também foi desenvolvida uma função que se refere a (7) com o uso dos dados previamente inseridos. Sendo o resultado destas ações, as retas da Figura 2.3.

Para encontrar as relações de equilíbrio e de balanço de massa que especificam os estágios de equilíbrio é necessária a utilização do método NRTL, com o auxílio do Solver, encontrando os valores de fração molar do vapor correspondentes a fração molar do líquido encontrada pela equação de reta, tanto para a região de esgotamento quanto para a retificação de maneira similar à da construção do diagrama ELV. Este procedimento será esclarecido na Seção 4.1.1.3.

Por fim, estes valores são organizados para a obtenção de uma série do gráfico para encontrar o número mínimo de estágios teóricos na coluna, como exemplificado na Figura 2.4.

De maneira análoga ao item anterior, nesta parte da planilha foram utilizadas as mesmas ferramentas e também foi construído um gráfico devidamente formatado para melhor visualização do tratamento dos dados.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Rotinas implementadas no Excel

A automatização da metodologia, que foi realizada para que só seja necessária a inserção dos dados, foi implementada com o uso de códigos na linguagem de programação Visual Basic for Applications (VBA) que foram capazes de repetir alguns procedimentos que serão retratados abaixo, exemplos destas rotinas estão no Apêndice.

4.1.1 Módulos

4.1.1.1 *Reset*

Esta macro foi programada para redefinir a planilha para o seu ponto inicial de utilização. Para isto foram criadas rotinas para: padronizar o intervalo de temperatura utilizado no cálculo da pressão de vapor, iniciando em 30,3 °C e terminando em 60,6 °C; limpar o conteúdo das células com os valores dos parâmetros de Antoine e NRTL (Figura 3.1), de condições terminais, de balanço de massa e dos estágios de equilíbrio; exclusão das séries criadas no gráfico; desproteção da planilha para aplicação do código e proteção ao final do *reset*; otimizações para menor gasto de memória na execução da rotina.

4.1.1.2 *Balanço de massa*

A fim de facilitar a inserção de dados, realizou-se uma rotina para o cálculo das variáveis W , D , q , V , L , V' , L' a partir da criação de funções que teriam que ser calculadas previamente utilizando as equações de (15) a (20).

4.1.1.3 *Método McCabe-Thiele*

Esta rotina foi implementada, principalmente, para automatizar o uso repetitivo do Solver para encontrar os valores de equilíbrio referente as duas regiões da coluna de destilação. Variando a condição de alimentação (q) e as composições terminais (x_w , x_f e x_d) são obtidos diferentes estágios para a mistura binária escolhida.

Este procedimento contém declaração de variáveis, para padronizar a organização dos valores obtidos ao executar o Solver; estruturas condicionais e de repetição, para que o solver seja aplicado até o ponto de intersecção entre a reta de esgotamento e a de retificação, sendo feita a transição para esta última a fim de encontrar os valores de equilíbrio até a condição terminal x_d ; variáveis para realizar a contagem de quantas vezes o Solver foi aplicado na zona de esgotamento resultando no prato ótimo de alimentação e o total de aplicações que determina

o número ideal de estágios teóricos; rotina para organizar os dados com o objetivo de criar e formatar as séries do diagrama.

4.1.2 Formulários

Uma interface amigável ao usuário foi desenvolvida utilizando objetos *UserForm*, que além de possuírem rotinas também fazem com que a planilha tenha uma aparência de aplicativo.

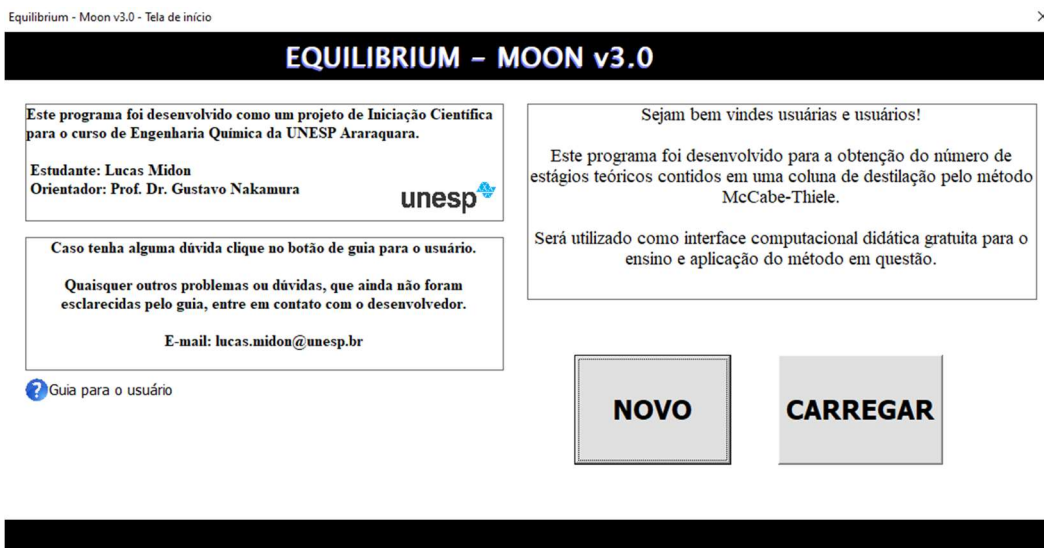
Foram criados 4 formulários com uma aparência padrão com o fundo branco, faixas pretas nas partes superiores e inferiores, acesso ao guia do usuário, título e utilizando a fonte Tahoma. Cada um deles possui um botão de retorno, havendo um procedimento que redefine o que foi executado no formulário anterior.

4.1.2.1 Tela inicial

A tela inicial tem o objetivo de ter uma mensagem de boas-vindas, descrevendo o objetivo do programa, especificando sobre os desenvolvedores e deixando um e-mail para suporte.

Os códigos contidos no botão de comando “Novo” são simples: desproteção da planilha para inicializar o procedimento; otimização do uso de memória ocultando o Excel; alteração de formulários; estruturas condicionais para a ocorrência de erros.

Figura 4.1 – Tela inicial do programa.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

4.1.2.2 Inserção de dados para construção do diagrama ELV

Neste formulário são especificados os métodos NRTL e Antoine para que sejam informados os parâmetros necessários. Para auxílio temos o botão de guia do usuário, legenda relacionada aos dados a serem inseridos e a especificação de uma referência.

Figura 4.2 – Tela de inserção dos parâmetros de Antoine e NRTL.

Equilibrium - Moon v3.0 - Inserção de parâmetros de Antoine e NRTL ×

EQUILIBRIUM – MOON v3.0

Para a construção do diagrama de equilíbrio Líquido-Vapor da mistura binária que será utilizada no projeto de coluna de destilação será necessário que você informe os parâmetros de Antoine e do Método NRTL para a mistura binária desejada.

Estes parâmetros podem ser encontrados na seguinte referência:
SMITH, J.M. & VAN NESS, H.C. - “Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química”, 7ª edição, LTC Editora, 2007.

LEGENDA
Subscritos 1 e 2 são referentes as substâncias que compõe a mistura binária

A, B e C: Constantes termodinâmicas para Equação de Antoine
P: Pressão de vapor [kPa]
R: Constante universal dos gases ideais [cal/K.mol]

alfa: Parâmetro binário de interação do modelo NRTL [cal/mol]
b12 e b21: parâmetros de ajuste do modelo NRTL [cal/mol]

PARÂMETROS DE ANTOINE

A1: <input type="text" value="13.7819"/>	A2: <input type="text" value="13.932"/>
B1: <input type="text" value="2726.81"/>	B2: <input type="text" value="3056.96"/>
C1: <input type="text" value="217.572"/>	C2: <input type="text" value="217.625"/>
P: <input type="text" value="101.325"/>	R: <input type="text" value="1.9891148"/>

PARÂMETROS DE NRTL

alfa: <input type="text" value="0.3033"/>	b12: <input type="text" value="111.1157"/>	b21: <input type="text" value="-121.2437"/>
---	--	---

Guia para o usuário

Banco de dados

INSERIR

Voltar para a tela anterior

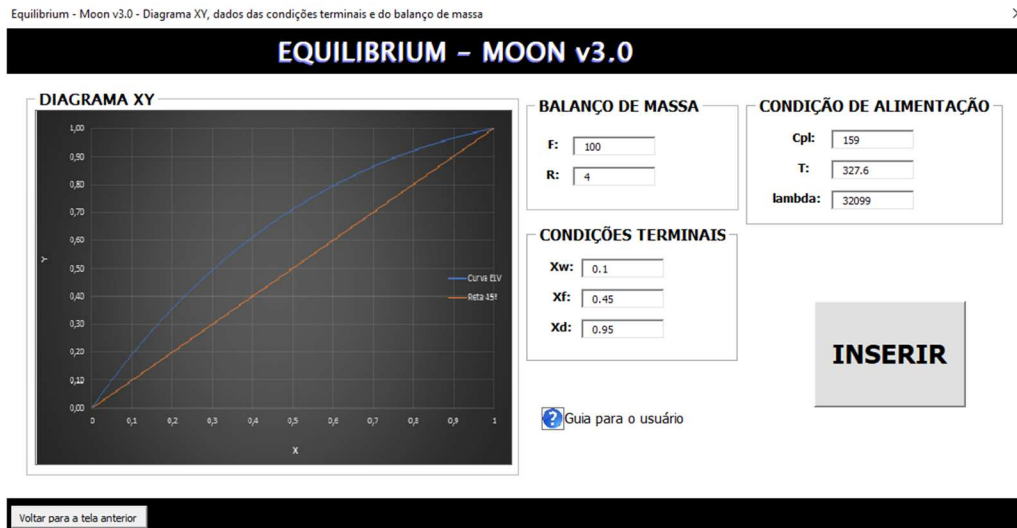
Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

No botão de comando “Inserir” estão os códigos para automatizar a rotina de construção do diagrama ELV, como a organização dos valores inseridos na planilha; a execução do Solver; criação de uma variável que direciona ao caminho do diagrama gerado; a transição de formulários.

4.1.2.3 Inserção de dados para aplicação do método McCabe-Thiele

O terceiro formulário contém formatação semelhante aos anteriores e a imagem contendo o diagrama XY obtido previamente.

Figura 4.3 – Tela de inserção do balanço de massa e das condições terminais e de alimentação.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

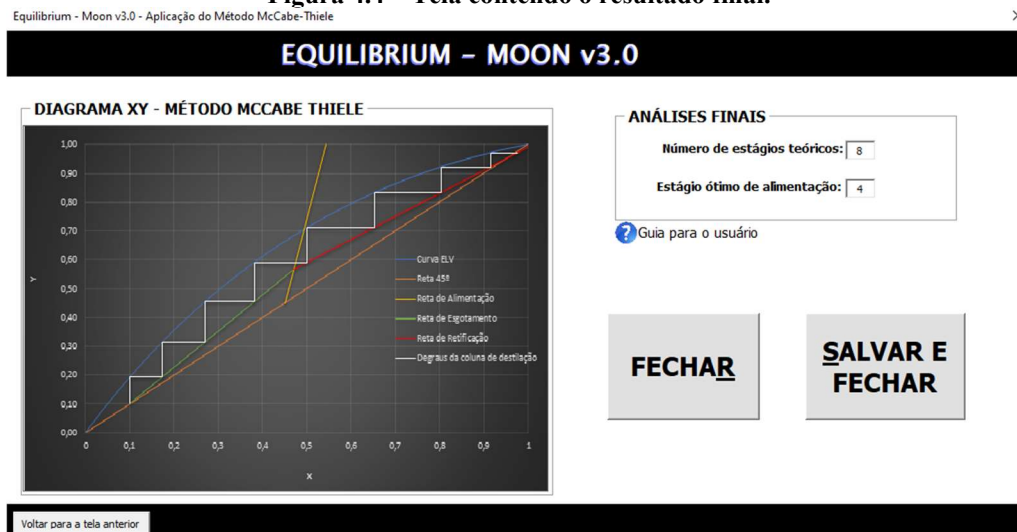
Ao clicar em “Inserir” os dados são colocados em células da planilha que estão vinculadas com outras. Com isto é encontrada a temperatura de bolha utilizando a composição de alimentação x_f no Solver. Este é o momento que os módulos de Balanço de massa e Método McCabe-Thiele, contidos nas Seções 4.1.1.2 e 4.1.1.3, são executados pela instrução Call.

De forma análoga ao item anterior é criada uma nova imagem contendo o gráfico final que será enviada ao próximo formulário.

4.1.2.4 Tela de resultados

O último formulário possui a imagem e as análises finais (estágio ótimo de alimentação e o número de estágios teóricos).

Figura 4.4 – Tela contendo o resultado final.



Fonte: elaborado pelo autor.

Para finalizar pode-se somente utilizar o botão de comando “Fechar” ou também é possível também “Salvar e Fechar”. Para o primeiro, são utilizados códigos para esconder o formulário final e habilitar para que a planilha seja visível e que esteja protegida para utilização do usuário. Já para o segundo botão, é preciso dar um nome para a planilha que acabou de utilizar, esta que será salva na mesma pasta que a planilha inicial está.

4.2 Estudo de caso: Benzeno e Tolueno

O exemplo utilizado para o desenvolvimento do projeto foi o da mistura binária contendo composição molar de 45% de benzeno e 55% de tolueno em que há alimentação de uma mistura 100 kgmol/h com pressão de 101,33 kPa e temperatura de 327,6 K. O objetivo é o destilado ter uma composição de 95% para o componente mais volátil e de 10% para o produto de fundo. A razão de refluxo é de 4:1 contendo a capacidade calorífica da alimentação no valor de 159 kJ/kgmolK e o calor latente de 32099 kJ/kgmol. De início, para construção do diagrama ELV foram inseridos os dados contidos na Tabela 2.

Nas Tabelas 4 a 6 estão os dados necessários para a aplicação do método McCabe-Thiele:

Tabela 4– Vazão de alimentação da coluna, em kgmol/h, e a razão de refluxo.

Balanco de Massa	
F	100
R	4

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Tabela 5– Temperatura de alimentação, em K, calor específico no estado de bolha, em kJ/kmol.K e calor latente molar da mistura, em kJ/kgmol.

Condição de alimentação	
C _{pl}	159
T	327,6
λ	217,572

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Tabela 6– Fração molar do líquido na região de esgotamento, retificação e na alimentação.

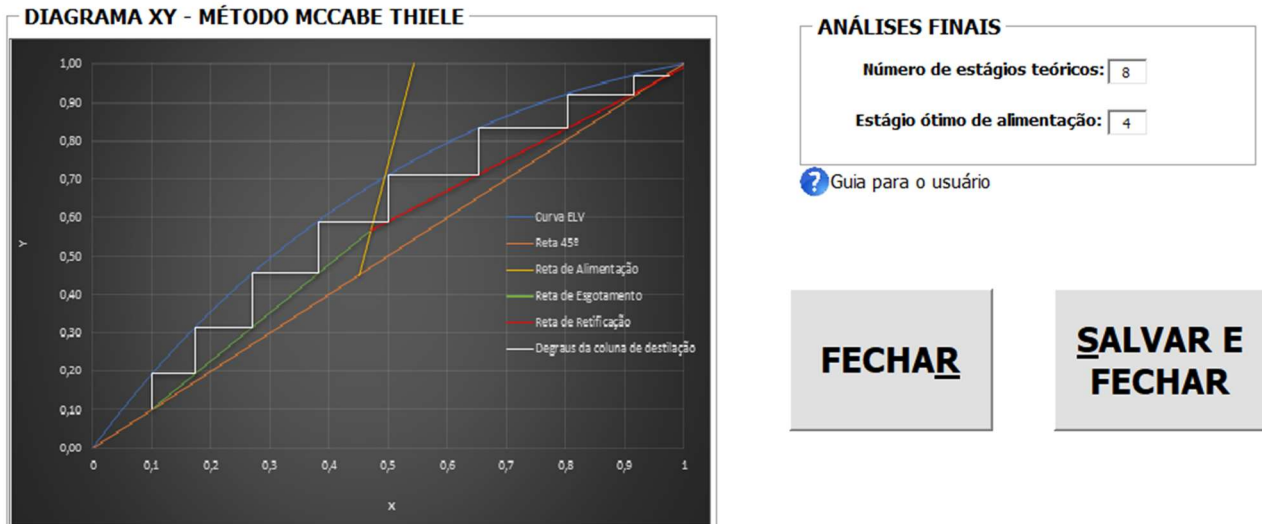
Condições terminais	
X _w	0,1
X _f	0,45
X _d	0,95

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

4.2.1 Vazão de alimentação

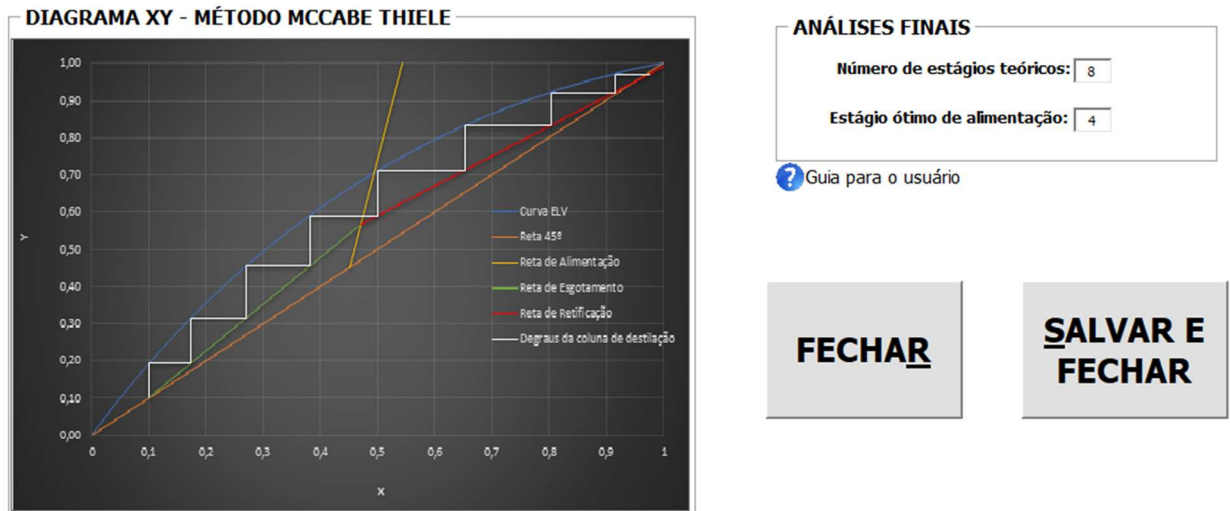
Os cenários encontrados quando a vazão de alimentação é manipulada para 100 kgmol.h^{-1} , 50 kgmol.h^{-1} e 150 kgmol.h^{-1} estão mostrados na Figura 4.5 a 4.7.

Figura 4.5 – Tela de resultados quando a vazão de alimentação é de 100 kgmol.h^{-1} .



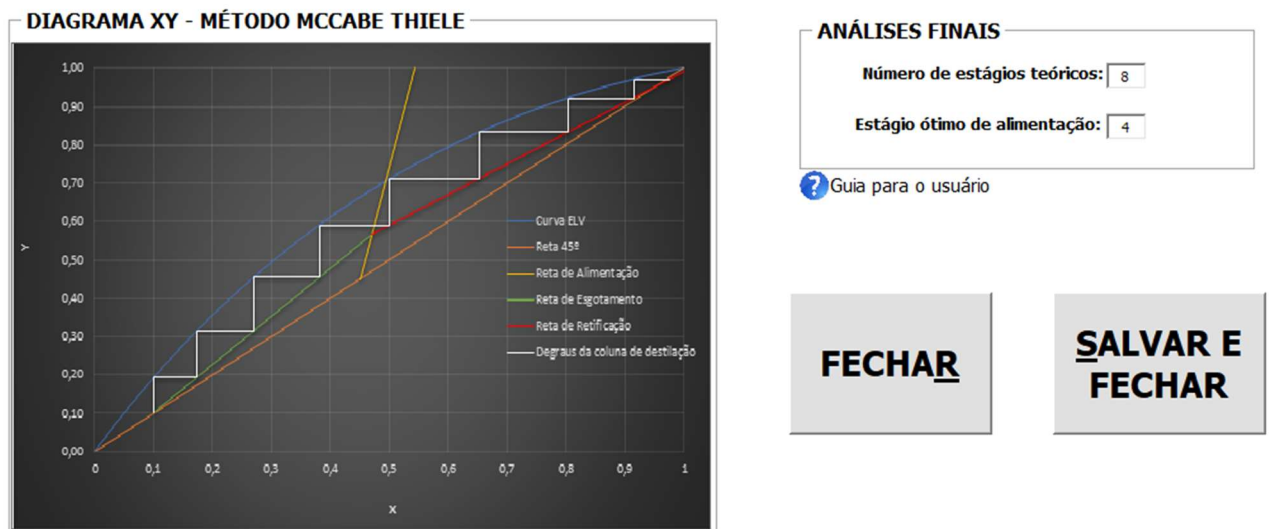
Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.6 – Tela de resultados quando a vazão de alimentação é de 50 kgmol.h⁻¹.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.7 – Tela de resultados quando a vazão de alimentação é de 150 kgmol.h⁻¹.



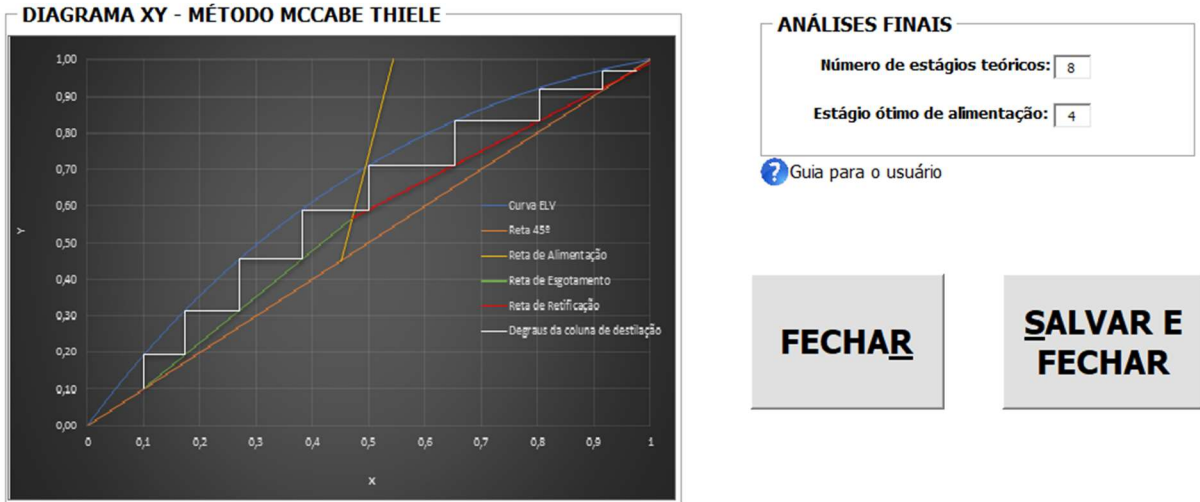
Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Neste caso, não houve variação dos estágios ótimo de alimentação e da coluna, equivalendo a 4 e 8, respectivamente. É possível observar que o método independe da vazão de alimentação porque não é uma variável que influencia nas equações das retas de operação, como pode ser visto nas equações (11) e (14). Podemos ver na Seção 4.2.4. que as condições terminais influenciam diretamente nestas vazões e no cenário.

4.2.2 Razão de refluxo

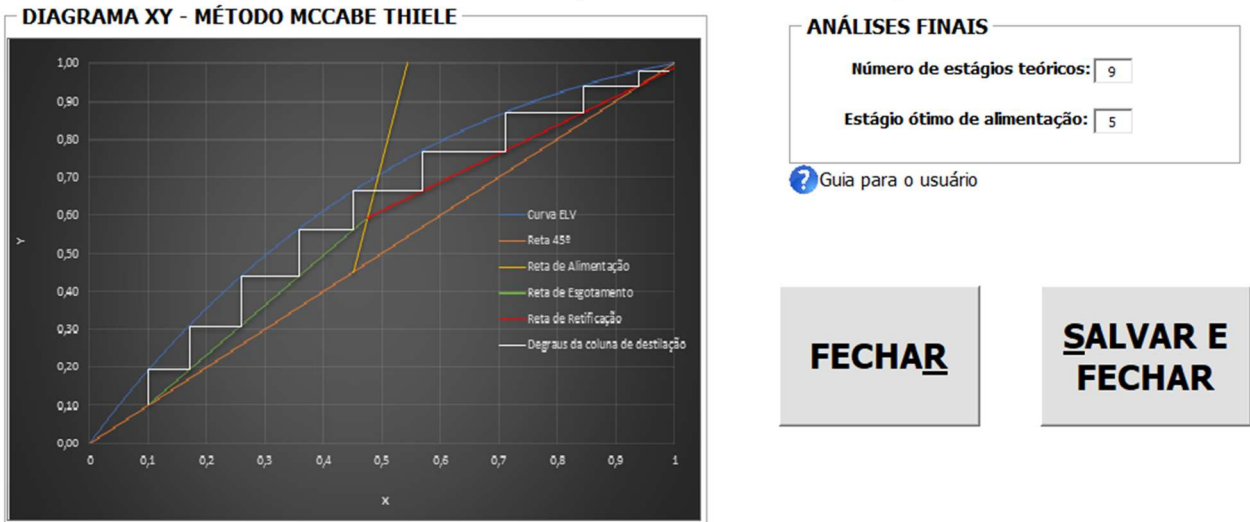
Quando alteramos os valores de razão de refluxo para 4, 3 e 2 obtemos os panoramas contidos da Figura 4.8 a 4.10.

Figura 4.8 – Tela de resultados para uma razão de refluxo igual a 4.



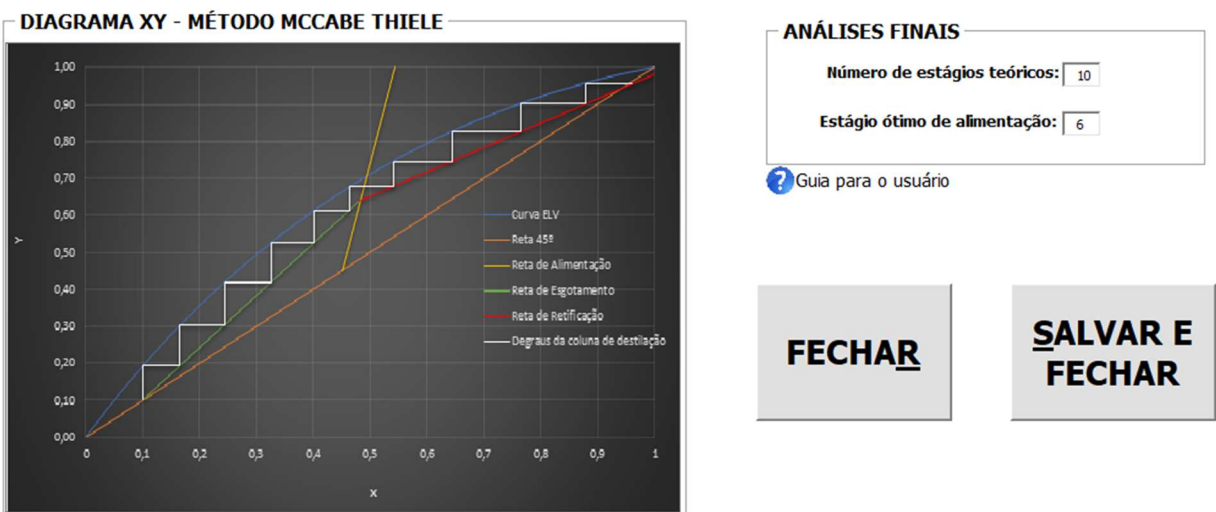
Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.9 – Tela de resultados para uma razão de refluxo igual a 3.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.10 – Tela de resultados para uma razão de refluxo igual a 2.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Como a razão de refluxo relaciona de maneira inversamente proporcional as vazões de destilado e refluxo, quando há maior vazão de refluxo, há menor quantidade de produto de topo. Dada esta definição, podemos ver que os estágios da coluna e da alimentação aumentam conforme a razão de refluxo diminui, havendo maior produção de destilado para uma mesma condição terminal x_d .

Tabela 7 – Estágios ideais da coluna e o prato ótimo de alimentação quando há variação da razão de refluxo.

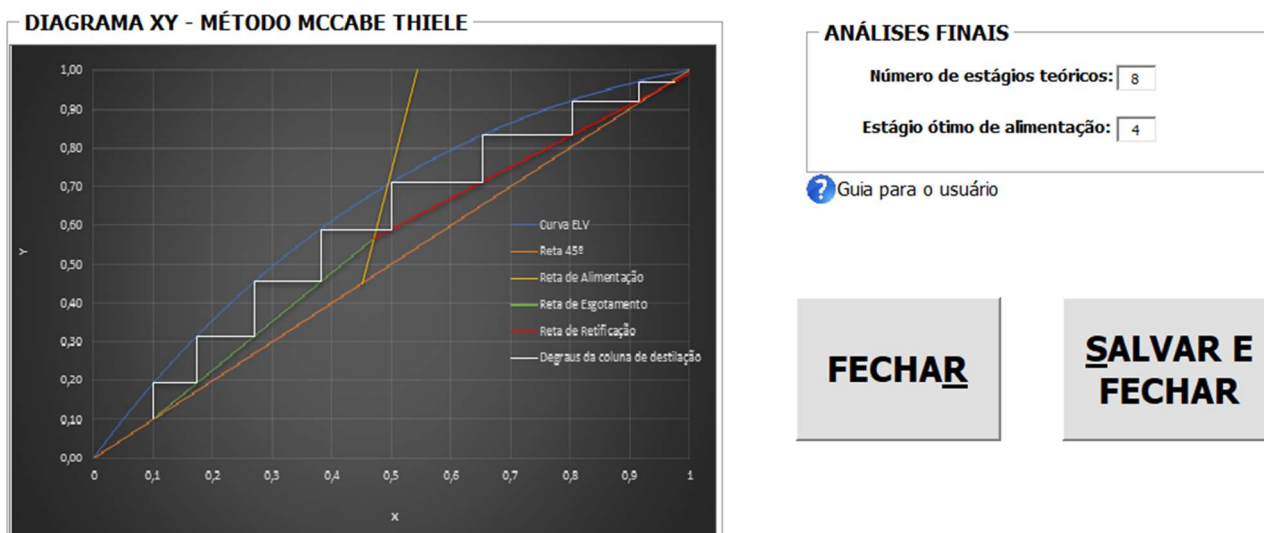
Cenário	Alimentação	Número ideal
1	4	8
2	5	9
3	6	10

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

4.2.3 Condição de alimentação

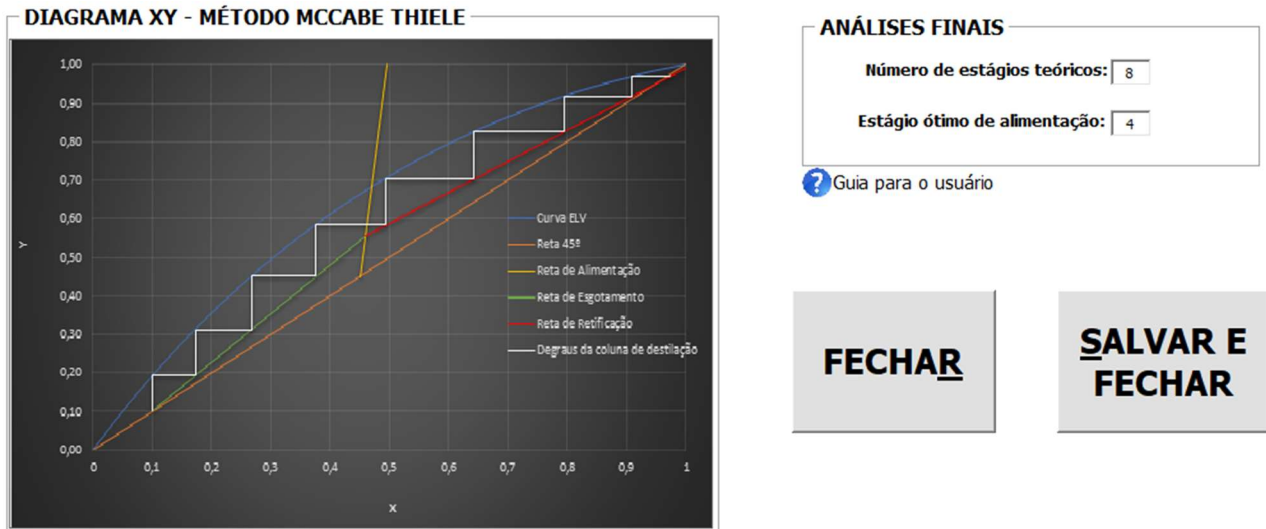
Para alternarmos a condição de alimentação é necessário que a temperatura de alimentação da coluna varie. Da Figura 4.11 até 4.13 estão os cenários para valores de temperatura iguais a 327,6 K, 350 K e 400 K.

Figura 4.11 – Tela de resultados com temperatura de alimentação igual a 327,6 K.



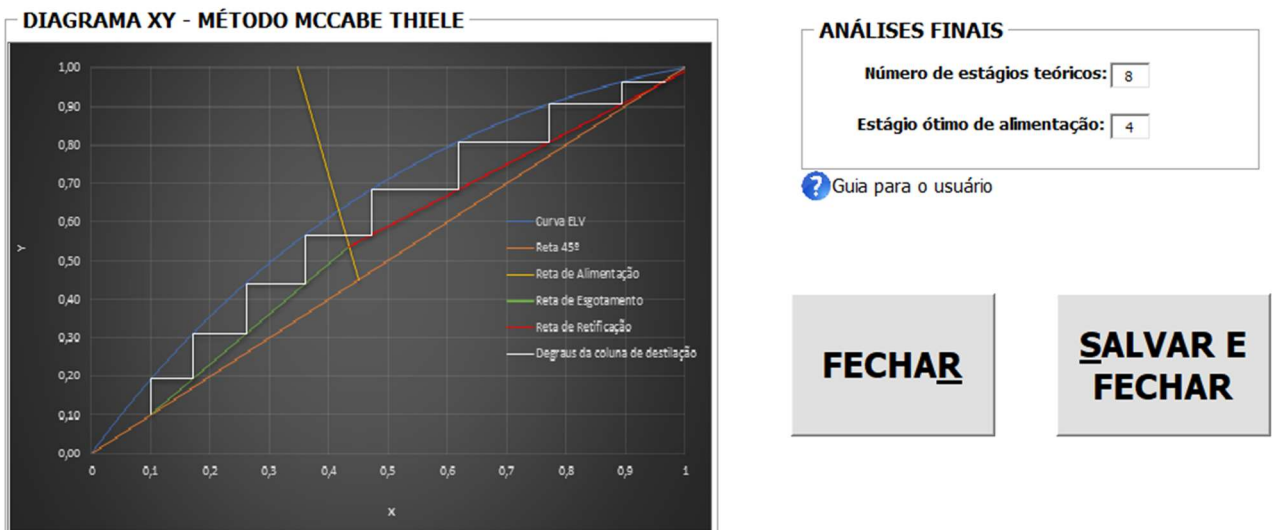
Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.12 – Tela de resultados com temperatura de alimentação igual a 350 K.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.13 – Tela de resultados com temperatura de alimentação igual a 400 K.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

A condição de alimentação resulta do estado físico da mistura alimentada na torre e é descrita pela reta de alimentação, contida nas figuras acima. Com o aumento da temperatura de alimentação, inserida na equação (10), há uma diminuição do fator q e isto altera o coeficiente angular da reta de alimentação, descrita pela equação (11).

Os cenários 1 e 2 correspondem ao estado de líquido sub-resfriado, quando o fator é maior do que 1. Quando há o estado de saturação, para q igual a 1, a reta se torna uma vertical. Já para o último cenário, quando q está entre 0 e 1, há uma transição para o estado de líquido vaporizado.

Tabela 8 – Valores do fator q para diferentes temperaturas de alimentação, em °C.

Tf	q
327,6	1,2
350	1,09
400	0,84

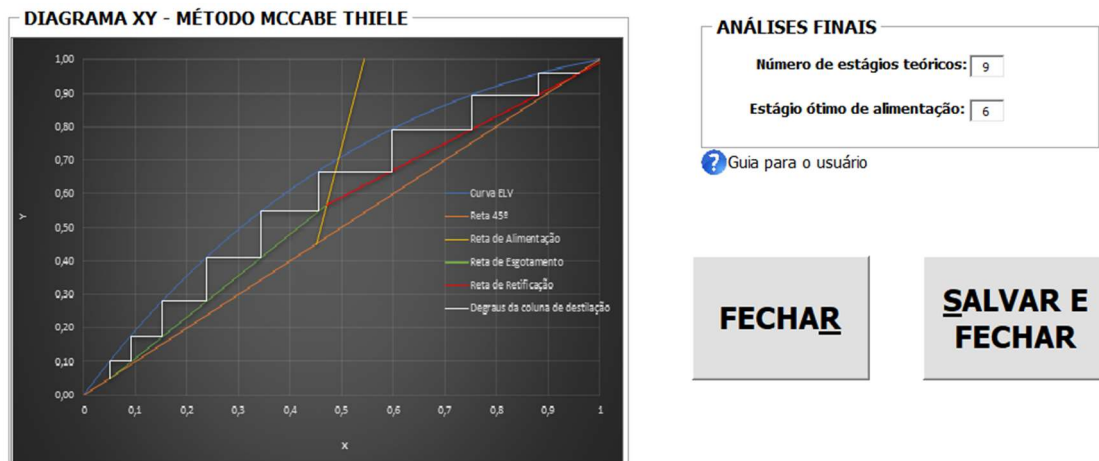
Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

4.2.4 Condições terminais

Para finalizar este estudo de caso foram alterados os valores das composições terminais da coluna.

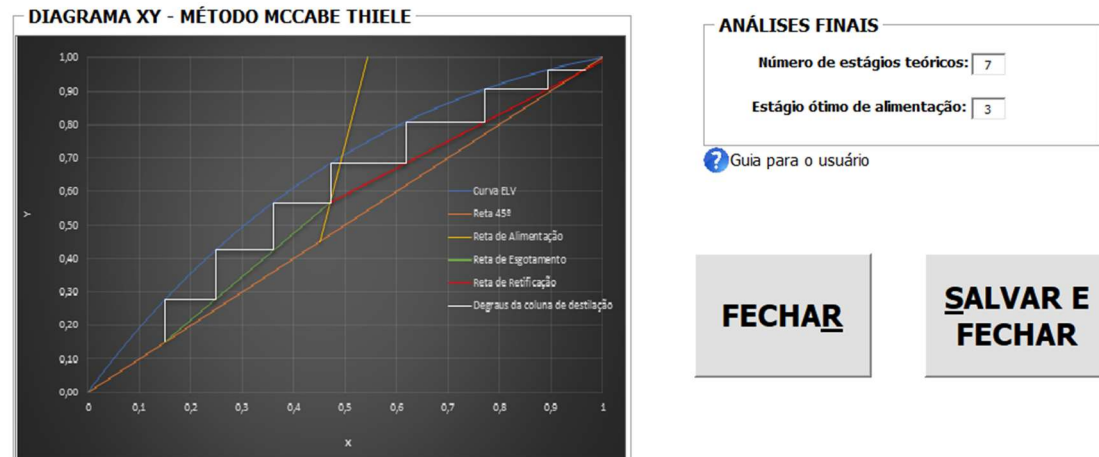
Na Figura 4.11 temos o diagrama para quando a composição do produto de fundo x_w é 0,1. Altera-se este valor para 0,05 e 0,15 resultando na Figura 4.14 e 4.15.

Figura 4.14 – Tela de resultados quando a composição de fundo x_w é 0,05.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.15 – Tela de resultados quando a composição de fundo x_w é 0,15.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

A composição molar do produto de fundo x_w tem relação direta com o ponto inicial da reta de esgotamento, descrito na Seção 2.3. Quando comparamos ao cenário padrão, observamos que a reta de esgotamento tende a ser maior para valores menores de 0,10 e começa a reduzir quando utilizamos valores maiores.

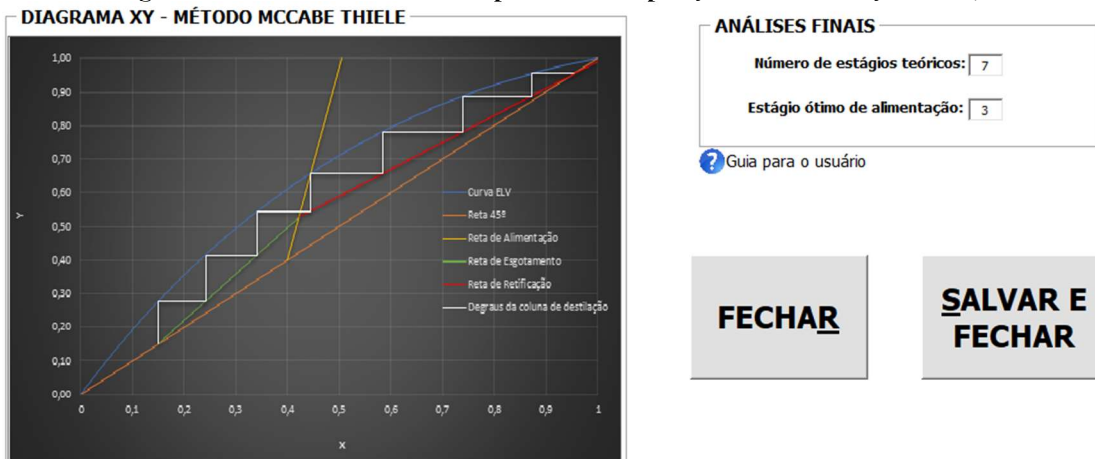
Tabela 9 – Estágios ideais da coluna e o prato ótimo de alimentação quando há variação da fração molar do produto de fundo.

Cenário	Alimentação	Número ideal
1	4	8
2	6	9
3	3	7

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

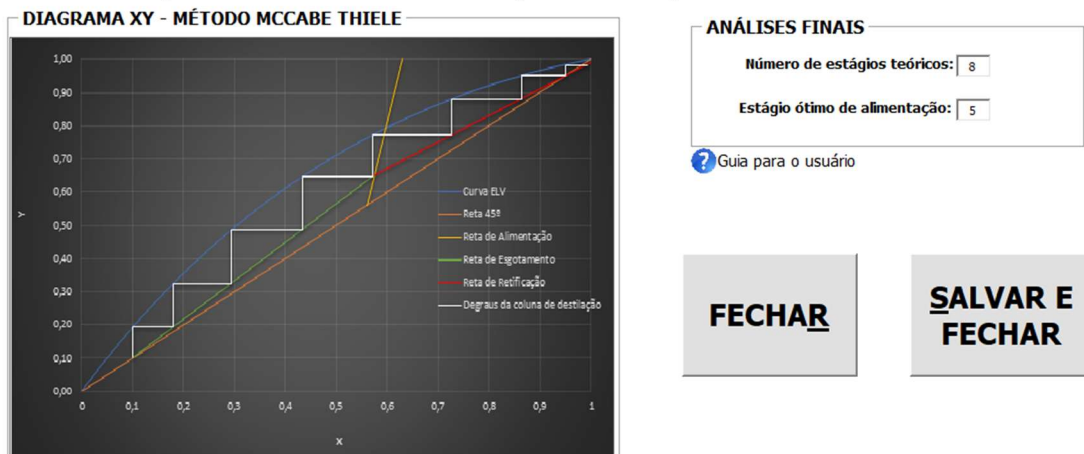
Também temos na Figura 4.11 o cenário representado para uma fração molar do líquido para alimentação x_f igual a 0,45. As Figuras 4.16 e 4.17 estão retratam a mudança de valor para 0,4 e 0,56.

Figura 4.16 – Tela de resultados quando a composição de alimentação x_f é 0,4.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.17 – Tela de resultados quando a composição de fundo x_w é 0,56.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Analisando a fração molar de alimentação x_f , contida na equação (11), e comparando com a Figura 4.11, observa-se o comportamento da reta de alimentação. O ponto inicial se desloca para esquerda quando o valor é menor e para direita quando maior, influenciando diretamente na utilização do método gráfico e nos resultados dos estágios.

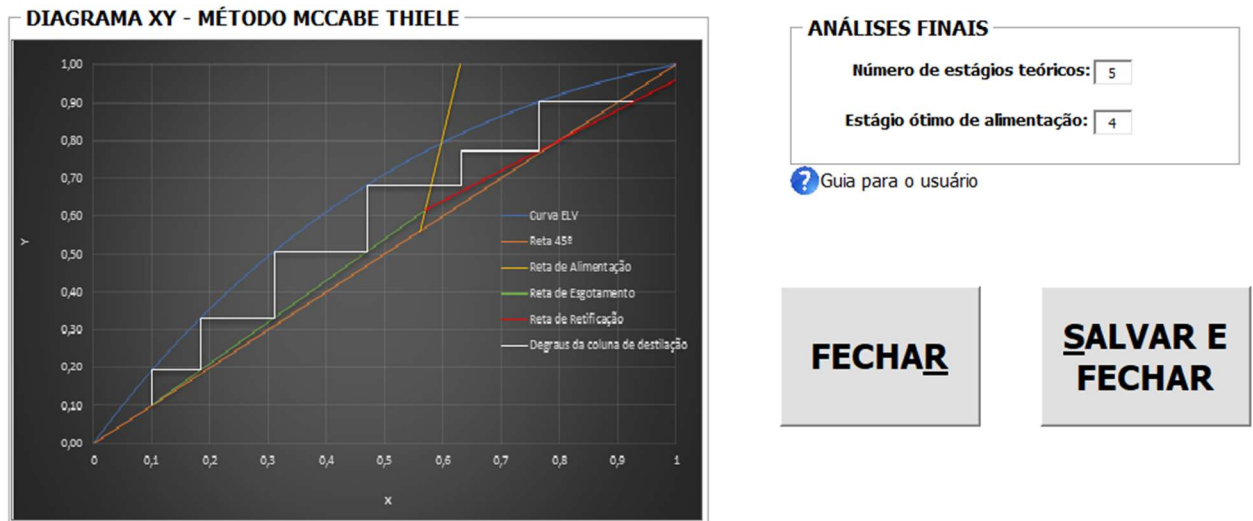
Tabela 10 – Estágios ideais da coluna e o prato ótimo de alimentação quando há variação da fração molar de alimentação.

Cenário	Alimentação	Número ideal
1	4	8
2	3	7
3	5	8

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

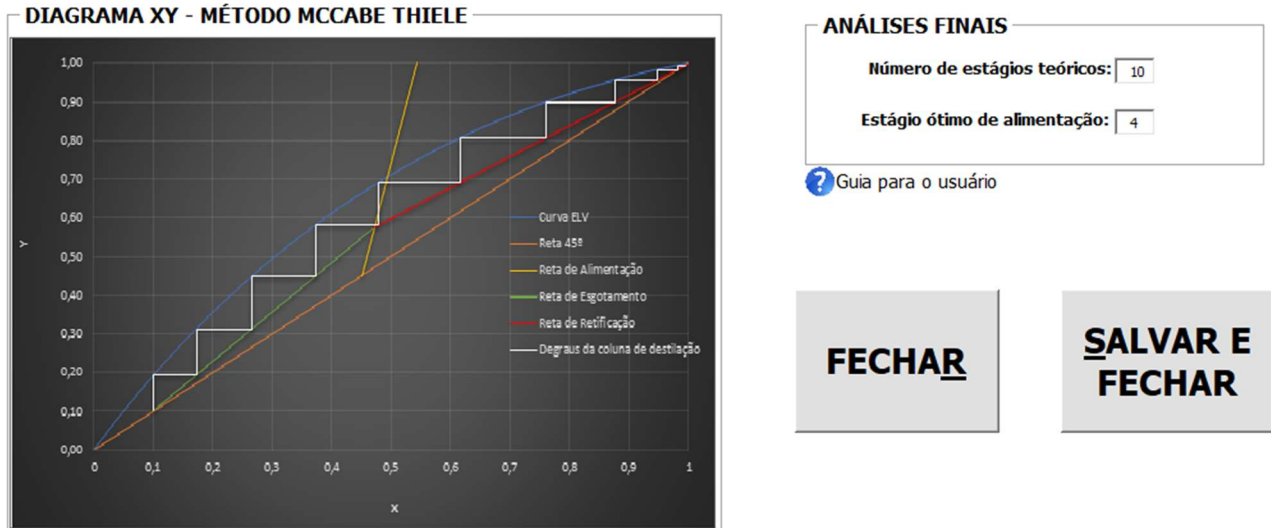
De maneira análoga, a Figura 4.11 contém o cenário utilizado como padrão com a composição de produto de topo x_d igual a 0,95. As Figuras 4.18 e 4.19 contém a variação destes valores para 0,8 e 0,99.

Figura 4.18 – Tela de resultados para uma composição de topo x_d igual 0,8.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Figura 4.19 – Tela de resultados para uma composição de topo x_d igual 0,99.



Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

Por fim, a composição molar do destilado x_d possui relação com a reta de retificação, expressa pela equação (14), em que há uma proporcionalidade quanto a variável e o ponto final da reta, possuindo mais estágios de equilíbrio durante esta região quanto maior for necessária a pureza do produto de topo. Não havendo alteração em relação ao estágio ótimo de alimentação.

Tabela 11 – Estágios ideais da coluna e o prato ótimo de alimentação quando há variação da composição molar do destilado.

Cenário	Alimentação	Número ideal
1	4	8
2	4	5
3	4	10

Fonte: elaborado pelo autor, 2021.

5 CONCLUSÃO E SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Dessa maneira, é possível inferir que a interface cumpre o seu papel ao simular diferentes cenários de uma coluna de destilação em um curto intervalo de tempo (~1 min). Caso seja utilizada como auxílio no ensino da matéria Operações Unitárias, disponibilizará mais tempo para os alunos e alunas realizarem análises possibilitando uma maior compreensão do conteúdo.

Este trabalho foi desenvolvido em cerca de um ano e ainda pode ser aperfeiçoado. Caso sejam desenvolvidos novos projetos relacionados com este tema, seguem as seguintes recomendações:

- Testar novas misturas para serem inseridas num banco de dados;
- Testar o programa para misturas azeotrópicas;
- Criar um banco de dados utilizando o SQL ou Microsoft Access;
- Disponibilização da planilha em um servidor público;
- Criar a interface mais intuitiva em outra linguagem de programação.

6 REFERÊNCIAS

ANDRADE, Maria Helana Caño. **Modelagem termodinâmico do equilíbrio líquido-vapor e simulação de colunas de destilação trifásicas**. Orientador: Saul Gonçalves d'Ávila. 1997. Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, 1997.

AZEVEDO, E. G.; ALVES, A. M. **Destilação por Andares: Misturas Binárias**. Engenharia de Processos de Separação. 3. ed. Lisboa: IST Press, 2017, p. 99-220.

CURSO ONLINE SENAI. **Senai**, 2021. Desvendando a indústria 4.0. Disponível em: <https://online.sp.senai.br/curso/86817/483/desvendando-a-industria-40>. Acesso em 15 de setembro de 2021.

GHEDINI, L.B. (2017). **Desenvolvimento de Aplicativo em VBA para Dimensionamento e Verificação de Vigas Mistas de Aço e Concreto de Alma Cheia**. Monografia de Projeto Final, Publicação G.PF-001/90, Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 80 p.

GOMES, Natália Teixeira. **Utilização da ferramenta Excel como auxílio pedagógico no projeto de colunas de destilação**. Orientador: Prof. Dr. Ivanildo José da Silva Junior. 2018. 71 f. Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Curso de Engenharia Química, Fortaleza, 2019.

MCCABE, W. L.; SMITH, J. C. HARRIOT, P. **Unit Operations of Chemical Engineering**. 7. ed. Nova Iorque: Mc Graw Hill, 2004.

MICROSOFT EXCEL. **Microsoft**, 2021. Auxílio e aprendizado do Excel. Disponível em: <https://support.microsoft.com/pt-br/excel>. Acesso em 10 de agosto de 2021.

SITE POLI USP. **USP**, 2021. Componentes de colunas de destilação. Disponível em: http://sites.poli.usp.br/p/luiz.terron/destilacao/2_paginas_equipamentos/2_1_distilacao_colunas_componentes.htm. Acesso em 27 de janeiro de 2022.

SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C.; ABBOTT, M.M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. 7. Ed. Rio de Janeiro: Editora LTC, 2007.

APÊNDICE A – EXEMPLIFICAÇÃO DE CÓDIGOS

A.1 Reset

Padronização da temperatura

```
Range("G6").Select  
ActiveCell.FormulaR1C1 = "30.3"  
Range("G7").Select  
ActiveCell.FormulaR1C1 = "30.6"  
Range("G6:G7").Select  
Selection.AutoFill Destination:=Range("G6:G106")
```

Limpar conteúdo de células

```
Range("W4:W19").Select  
Selection.ClearContents
```

Exclusão de series do gráfico

```
Dim i As Integer  
For i = 3 To 16  
ActiveChart.FullSeriesCollection(i).Delete  
Next
```

Desproteção e proteção da planilha

```
Planilha1.Unprotect  
Planilha1.Protect
```

A.2 Balanço de massa

Criação de funções

```
Dim W As Double
```

```
W = Wesgot(F, Xd, Xf, Xw)
```

```
Range("W13").Value = W
```

```
Function Wesgot(ByVal F, ByVal Xd, ByVal Xf, ByVal Xw)
```

```
As Double
```

```
Wesgot = F * (Xf - Xd) / (Xw - Xd)
```

```
End Function
```

A.3 Método McCabe-Thiele

Declaração de variáveis

```
Dim xRTS As Integer, linhax As Integer, linhay As Integer, Nteoria As Integer
```

```
Nteoria = 0
```

```
xRTS = 4
```

```
linhax = 4
```

```
linhay = 5
```

Estruturas condicionais e de repetição

```
If Cells(xRTS, 16) < Range("W20") Then
```

```
Cells(linhax, 16).Select
```

```
Selection.Copy
```

```
Cells(5, 1).Select
```

```
Selection.PasteSpecial Paste:=xlPasteValues,
```

```
Operation:=xlNone, SkipBlanks _
```

```
:=False, Transpose:=False
```

```
solverReset
```

```
SolverOk SetCell:="$N$5", MaxMinVal:=3, ValueOf:=1,
```

```
ByChange:="$C$5"
```

```
Engine:=1, EngineDesc:="GRG Nonlinear"
```

```
SolverSolve (True)
```

```
SolverOk
```

```
Else
```

```

xRTS = xRTS
linhax = linhax
End If

```

Contagem de execuções do Solver

```

Do Until Cells(xRTS, 16) >= Range("W20")
Nteoria = Nteoria + 1
xRTS = xRTS + 1
linhax = linhax + 1
linhay = linhay + 1
Loop

```

Criação e formatação de série

```

Planilha4.ChartObjects("Gráfico 1").Activate
ActiveChart.SeriesCollection.NewSeries
ActiveChart.FullSeriesCollection(3).Name = """"Reta de
Alimentação""""
ActiveChart.FullSeriesCollection(3).XValues =
"=DiagramaXY!$L$9:$L$10"
ActiveChart.FullSeriesCollection(3).Values =
"=DiagramaXY!$M$9:$M$10"
ActiveChart.FullSeriesCollection(3).Select
With Selection.Format.Line
.Visible = msoTrue
.ForeColor.ObjectThemeColor =
msoThemeColorAccent4
.ForeColor.TintAndShade = 0
.ForeColor.Brightness = 0
.Transparency = 0
.Weight = 1
End With

```

A.4 Tela inicial

Otimização do uso de memória

```
Application.ScreenUpdating = False
Application.Visible = False
```

Alteração de formulários

```
UserForm1.Hide
UserForm2.Show
```

Estruturas condicionais para a ocorrência de erros

```
On Error GoTo Here
Here:
Application.Visible = True
```

A.5 Inserção de dados para construção do diagrama ELV

Organização dos valores

```
Planilha1.Range("B5") = b12.Value
Planilha1.Range("B6") = b21.Value
Planilha1.Range("B7") = alfa.Value
```

Execução de um procedimento existente

```
Call Solver
```

Variável para gerar uma imagem

```
Dim caminho As String
caminho = ActiveWorkbook.Path & "\DiagramaXY.bmp"
ExportarGrafico caminho
Dados2.Image1.Picture = LoadPicture(caminho)
Function ExportarGrafico(caminho As String)
Dim MeuGrafico As ChartObject
Planilha4.Activate
Set MeuGrafico = Planilha4.ChartObjects("Diagrama XY")
MeuGrafico.Chart.Export caminho
End Function
```