

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DOS COEFICIENTES DE
TRANSFERÊNCIA DE MASSA E CALOR EM UMA
COLUNA COM PRATOS PERFURADOS**

UNICAMP
Cíntia Soares BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

Orientadora: Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel
Co-Orientador: Prof. Dr. António André Chivanga Barros

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas – São Paulo
Dezembro – 2000



84727008

UNIDADE CC
 N.º CHAMADA: T/ UNICAMP
So 11a
 V. Ex.
 TOMBO BC/ 44918
 PROC. 16-392/01
 C ☐ D ☒
 PREÇO R\$ 11,00
 DATA 26/06/01
 N.º CPD

CM00157826-B

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
 BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

Soares, Cíntia

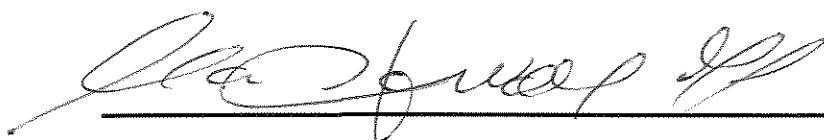
Sollá Avaliação experimental dos coeficientes de
 transferência de massa e calor em uma coluna com pratos
 perfurados / Cíntia Soares.--Campinas, SP: [s.n.],
 2000.

Orientadores: Maria Regina Wolf Maciel e António
 André Chivanga Barros.

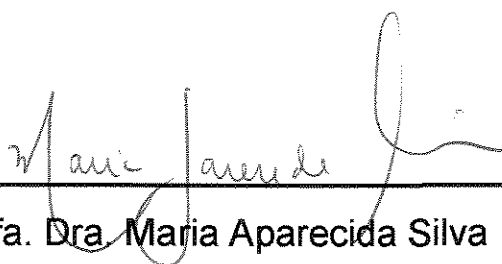
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Azeótropo. 3. Equilíbrio líquido-
 vapor. 4. Termodinâmica de sistemas em não-equilíbrio.
 5. Massa – Transferência. 6. Calor – Transmissão. I.
 Maciel, Maria Regina Wolf. II. Barros, António André
 Chivanga. III. Universidade Estadual de Campinas.
 Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

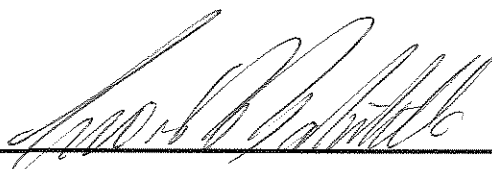
Dissertação de Mestrado defendida por CÍNTIA SOARES e aprovada em 21 de Dezembro de 2000 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel (orientadora)

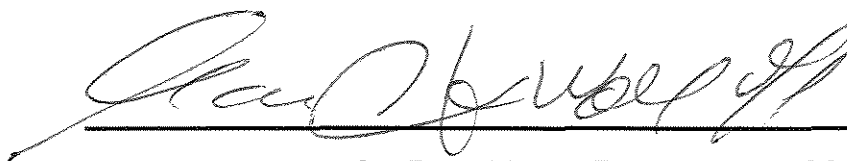


Profa. Dra. Maria Aparecida Silva



Dr. César Benedito Batistella

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de
Mestrado em Engenharia Química.



Profa. Dra. Maria Regina Wolf Maciel

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, como testemunho da
minha imensa gratidão pela compreensão,
carinho e amor.

Dedico este trabalho.

AGRADECIMENTOS

Agradecer alguém em especial seria uma forma de desprezar todos aqueles que me ajudaram a chegar até aqui. Entretanto, faço um agradecimento àqueles que participaram desta fase de minha vida acadêmica:

A Maria Regina Wolf Maciel, pela orientação, incentivo e coragem em mim depositados e a Antônio André Chivanga Barros, pela co-orientação, pelos valiosos ensinamentos e apoio.

À Universidade Regional de Blumenau e aos professores, bolsistas, monitores e secretárias do Departamento de Engenharia Química que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.

Aos colegas da pós-graduação da UNICAMP e da FURB (André, Farah e Rita) pelos momentos de descontração e pelas trocas de idéias.

A Ailton Cardoso do Núcleo de Química do IPT – FURB, por ter contribuído com as análises cromatográficas e pelo apoio e discussão de trabalhos e resultados.

Meus agradecimentos também ao Departamento de Engenharia Industrial Elétrica (FURB) pelo auxílio prestado.

À Sônia de Fátima Santos, Hannes Fischer e Edinara A. Boss por estarem sempre dispostos a ajudar.

A FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo apoio financeiro.

RESUMO

Devido à sua abrangência com os fenômenos de transferência de massa, calor e quantidade de movimento, capacidade e características operacionais, relações termodinâmicas e o amplo envolvimento com outros equipamentos industriais, o estudo dos processos de separação por destilação torna-se muito complexo, apesar de sua extensiva utilização nas indústrias químicas e petroquímicas. Por isto, trabalhos de grande relevância científica são ainda desenvolvidos para melhor entender os fenômenos relacionados e que permitem melhorar a sua operacionalidade. Assim, este trabalho teve como objetivo a avaliação experimental de uma coluna de destilação com pratos perfurados, permitindo averiguar o comportamento das eficiências de Murphree, O'Connell e da correlação de Barros & Wolf, além da avaliação dos perfis dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo do equipamento. Os dados experimentais obtidos foram utilizados para a validação dos modelos de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio e da correlação de eficiência desenvolvida por Barros & Wolf. Para a realização deste trabalho, uma coluna de destilação, em aço inoxidável, contendo 8 pratos perfurados com vertedor e um sistema para controle da potência foram projetados e construídos. A coluna contém 8 pontos para a coleta de amostras de líquido e termopares acoplados em cada prato para a leitura de temperatura. Para cada experimento foram variadas as composições do etanol na alimentação e a potência fornecida ao refeedor para avaliar a influência da carga térmica sobre o comportamento das frações molares e da temperatura em uma coluna operada a refluxo total. Nos ensaios, trabalhou-se com o sistema etanol-água por ser de fácil determinação analítica e por existirem dados de equilíbrio precisos e alguns valores de eficiência. Após o alcance do estado estacionário, determinado a partir de leituras periódicas de temperatura ao longo do equipamento, foram feitas coletas de amostras de líquido em cada estágio da coluna, as quais foram analisadas empregando a técnica de cromatografia à gás. Com os dados da temperatura, composição do etanol e da água em cada estágio e da potência fornecida ao refeedor, foram calculadas as eficiências de Murphree e de O'Connell. Com a utilização de programas computacionais envolvendo a modelagem de estágios de equilíbrio (com a correlação de Barros & Wolf) e de não equilíbrio, desenvolvidos no Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação da UNICAMP, foram realizadas simulações nas condições de operação dos experimentos, cujos dados obtidos foram utilizados para comparação com dados experimentais de forma a corroborar tais modelos. Os resultados obtidos mostraram que as modelagens de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio reproduzem, com grande fidelidade, as condições reais do processo e representam o comportamento real dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo da coluna de destilação. Os resultados obtidos mostraram-se compatíveis com os dados da literatura.

Palavras-chave: destilação, eficiência, transferência de massa e calor, não equilíbrio.

ABSTRACT

Due to the relation with the mass, heat and momentum transfer phenomena, capacity and operational characteristics, thermodynamic properties and the wide relationship with other industrial equipment, the study of the separation processes by distillation becomes very complex, in spite of its extensive use in the chemical and petrochemical industries. For this reason, researches of great scientific relevance are still being developed for better understanding the related phenomena and for allowing the improvement of the operation. Thus, this work presents as objective the experimental study of a distillation column with sieve plates to evaluate the behaviour of the Murphree efficiency, O'Connell and Barros & Wolf correlations and the mass and heat transfer coefficients along the equipment. The experimental data were obtained used for the validation of the equilibrium and nonequilibrium stage models and of the new efficiency correlation developed by Barros & Wolf. For these purposes, a stainless steel distillation column with eight sieve plates with downcomer and a system for the power measuring were designed and built. The column contains eight spaced temperature/sample points. For each experiment, the ethanol feed composition and the heat duty were changed to evaluate the influence of the heat duty on the behaviour of the mole fractions and on the temperature profiles in the column operating at total reflux. After established the steady state, the liquid samples and the temperature were taken in each stage of the column, and the samples were analysed using the gas chromatography technique. Using the temperature and ethanol and water compositions in each stage and the heat duty supplied to the reboiler, Murphree and O'Connell efficiency were calculated. The programs involving the equilibrium stage model (with Barros & Wolf correlation) and the nonequilibrium stage model developed in the Laboratory of Separation Process Development (UNICAMP) were used in the simulations at the same conditions of the experiments. The data obtained with simulations were compared with experimental data to corroborate such models. The obtained results showed that the equilibrium stage model and the nonequilibrium stage model reproduce, with great fidelity, the real conditions of the process and they can be used to represent the real behaviour of the mass and heat transfer coefficients along the distillation column.

Keywords: distillation, efficiency, mass and heat transfers, nonequilibrium stage model

SUMÁRIO

RESUMO.....	vi
ABSTRACT.....	vii
LISTA DE TABELAS.....	xiii
LISTA DE FIGURAS.....	xiv
NOMENCLATURA.....	xx
CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO.....	01
CAPÍTULO II – OBJETIVOS E JUSTIFICATIVA.....	06
II.1 Objetivo Geral.....	06
II.2 Objetivos Específicos.....	06
II.3 Justificativa.....	07
CAPÍTULO III – FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	09
III.1 Modelagem de Estágios de Equilíbrio e de Não Equilíbrio.....	13
III.1.1 Modelagem de estágios de equilíbrio.....	15
III.1.1.1 Definições de eficiência.....	15
III.1.1.1.1 Eficiência global da coluna.....	15
III.1.1.1.2 Eficiência de prato.....	16
III.1.1.1.3 Eficiência de prato no ponto.....	17
III.1.1.1.4 Relação entre eficiências.....	17
III.1.1.1.5 Eficiência de vaporização.....	20
III.1.1.1.6 Outras definições de eficiência.....	21
III.1.1.2 Métodos empíricos para a determinação da eficiência.....	22
CONCLUSÃO.....	30
CAPÍTULO IV – MODELAGEM DE ESTÁGIOS DE NÃO EQUILÍBRIO.....	32
IV.1 Equações Envolvidas.....	34
IV.2 Variáveis e Funções da Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio.....	39
IV.3 Relações de Transporte.....	39
IV.3.1 Fluxo de transferência de massa.....	39
IV.3.2 Fluxo de transferência de calor.....	49

IV.4 Propriedades Físicas e Termodinâmicas.....	54
IV.5 Solução das Equações do Modelo.....	56
CONCLUSÃO.....	57
CAPÍTULO V – TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM COLUNAS DE PRATO...	59
V.1 Transferência de Massa em Pratos.....	60
V.2 Transferência de Massa entre Fases.....	62
V.3 Coeficientes Globais de Transferência de Massa.....	64
V.4 Teoria do Filme.....	70
V.5 Teoria da Penetração e da Superfície Renovada.....	71
V.6 Correlações para o Cálculo dos Coeficientes de Transferência de Massa e Calor.....	74
V.7 Transferência Simultânea de Massa e Calor.....	86
CONCLUSÃO.....	88
CAPÍTULO VI – CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE MURPHREE E DE O'CONNELL.....	89
VI.1 Método para o Cálculo da Eficiência de Murphree.....	89
VI.1.1 Conversão das frações mássicas em frações molares.....	89
VI.1.2 Operação em refluxo total.....	90
VI.2 Método de Cálculo das Frações do Equilíbrio de Fases.....	93
VI.2.1 Coeficiente de fugacidade.....	94
VI.2.2 Coeficiente de atividade.....	96
VI.3 Relação de Equilíbrio.....	100
VI.4 Curva de Equilíbrio para o Sistema Etanol/Água.....	100
VI.5 Método para o Cálculo da Eficiência de O'Connell.....	101
VI.5.1 Determinação da volatilidade relativa.....	102
VI.5.2 Determinação da viscosidade da mistura na fase líquida.....	102
CONCLUSÃO.....	105
CAPÍTULO VII – DESENVOLVIMENTO EXPERIMENTAL.....	106
VII.1 Descrição do Equipamento.....	106
VII.1.1 Características do equipamento principal.....	107
VII.1.1.1 Refervedor.....	107
VII.1.1.2 Estrutura da coluna.....	108

VII.1.1.3 Sistema de refluxo.....	109
VII.1.1.4 Condensador.....	109
VII.1.1.5 Estrutura interna da coluna.....	110
VII.1.1.5.1 Cálculo da velocidade do vapor.....	112
VII.1.1.5.2 Cálculo do diâmetro do prato.....	112
VII.1.1.5.3 Vertedor.....	113
VII.1.1.5.4 Cálculo da vazão de afogamento.....	113
VII.1.1.5.5 Altura do vertedor de saída do prato.....	115
VII.1.1.5.6 Cálculo do número de furos no prato.....	115
VII.1.1.5.7 Distribuição dos furos no prato.....	118
VII.1.2 Estrutura completa da coluna.....	119
VII.2 Procedimento Experimental.....	119
VII.2.1 Material utilizado.....	121
VII.2.2 Determinação da composição das amostras.....	121
CAPÍTULO VIII – ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS.....	125
VIII.1 Avaliação do Funcionamento dos Acessórios.....	125
VIII.2 Determinação do Estado Estacionário da Coluna de Destilação.....	128
VIII.2.1 Coluna sem isolamento térmico.....	128
VIII.2.2 Coluna com isolamento térmico.....	129
VIII.3 Perfis de Concentração e Temperatura Característicos da Coluna de Destilação.....	131
VIII.3.1 Análise dos perfis de concentração.....	132
VIII.3.2 Análise dos perfis de temperatura.....	135
VIII.4 Influência da Carga Térmica sobre o Comportamento da Coluna de Destilação.....	136
VIII.5 Avaliação da Eficiência de Murphree.....	140
VIII.6 Avaliação da Eficiência de O'Connell.....	144
CONCLUSÃO.....	148
CAPÍTULO IX – COMPARAÇÃO ENTRE DADOS SIMULADOS E EXPERIMENTAIS.....	150
IX.1 Comparação entre Dados da Modelagem de Estágios de Equilíbrio e Dados Experimentais.....	150

IX.1.1 Avaliação dos dados do ensaio 5.....	151
IX.1.2 Avaliação dos dados do ensaio 6.....	153
IX.1.3 Avaliação dos dados do ensaio 8.....	155
IX.1.4 Avaliação dos dados do ensaio 11.....	157
IX.1.5 Avaliação dos dados do ensaio 12.....	159
IX.2 Avaliação Estatística dos Dados Simulados Utilizando a Modelagem de Estágios de Equilíbrio e os Dados Experimentais.....	162
IX.2.1 Avaliação estatística do ensaio 5.....	163
IX.2.2 Avaliação estatística do ensaio 6.....	164
IX.2.3 Avaliação estatística do ensaio 8.....	165
IX.2.4 Avaliação estatística do ensaio 11.....	166
IX.2.5 Avaliação estatística do ensaio 12.....	167
IX.3 Comparação entre Dados da Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio e Dados Experimentais.....	170
IX.3.1 Avaliação dos dados do ensaio 5.....	170
IX.3.2 Avaliação dos dados do ensaio 6.....	172
IX.3.3 Avaliação dos dados do ensaio 8.....	174
IX.3.4 Avaliação dos dados do ensaio 11.....	176
IX.3.5 Avaliação dos dados do ensaio 12.....	178
IX.4 Avaliação Estatística dos Dados Simulados Utilizando a Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio e os Dados Experimentais.....	181
IX.4.1 Avaliação estatística do ensaio 5.....	182
IX.4.2 Avaliação estatística do ensaio 6.....	183
IX.4.3 Avaliação estatística do ensaio 8.....	184
IX.4.4 Avaliação estatística do ensaio 11.....	185
IX.4.5 Avaliação estatística do ensaio 12.....	186
CONCLUSÃO.....	189
CAPÍTULO X – AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE BARROS & WOLF.....	193
X.1 Análise da Eficiência de Barros & Wolf	193
X.1.1 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 5.....	193
X.1.2 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 6.....	195
X.1.3 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 8.....	196

X.1.4 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 11.....	197
X.1.5 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 12.....	198
CONCLUSÃO.....	199
CAPÍTULO XI – AVALIAÇÃO DOS COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA E CALOR.....	202
XI.1 Coeficientes Binários de Transferência de Massa.....	202
XI.2 Coeficientes de Transferência de Calor.....	215
CONCLUSÃO.....	225
CAPÍTULO XII – CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	226
XII.1 Conclusões.....	226
XII.2 Sugestões para Trabalhos Futuros.....	230
CAPÍTULO XIII – REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	xxviii
Anexo 01 Vista Frontal da Coluna de Destilação (Sem Isolamento).....	xxxvii
Anexo 02 Vista dos Visores Dispostos ao Longo da Coluna de Destilação.....	xxxviii
Anexo 03 Vista da Coluna de Destilação e Acessórios (Coluna Isolada).....	xxxix
Anexo 04 Vista da Coluna de Destilação Isolada e das Fases em Contato.....	xl
Anexo 05 Fases em Contato sobre o Prato Visualizadas a Partir dos Visores..	xli
Apêndice A – Tabela dos Dados Experimentais.....	xlII

LISTA DE TABELAS

Tabela VIII.1	Agrupamento dos Ensaios.....	137
Tabela IX.1	Desvios Médios entre os Dados Simulados e Experimentais (Modelagem de Estágios de Equilíbrio).....	168
Tabela IX.2	Diferenças Percentuais Médias entre os Dados Simulados e Experimentais (Modelagem de Estágios de Equilíbrio).....	169
Tabela IX.3	Desvios Médios entre os Dados Simulados e Experimentais (Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio).....	187
Tabela IX.4	Diferenças Percentuais Médias entre os Dados Simulados e Experimentais (Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio).....	188

LISTA DE FIGURAS

Figura IV.1	Representação esquemática do modelo de estágios de não equilíbrio.....	33
Figura V.1	Modelo de transferência de massa em um prato.....	60
Figura VI.1	Representação de um estágio.....	91
Figura VI.2	Curva de equilíbrio do sistema etanol/água.....	101
Figura VII.1	Características do refeedor.....	108
Figura VII.2	Sistema de refluxo.....	109
Figura VII.3	Descrição do condensador.....	110
Figura VII.4	Velocidade de inundação em pratos perfurados.....	114
Figura VII.5	Distribuição dos furos nos pratos.....	119
Figura VII.6	Esquema do prato.....	119
Figura VIII.1	Perfil de temperatura na fase líquida (Ensaio 1).....	126
Figura VIII.2	Perfil de temperatura na fase líquida (Ensaio 2).....	127
Figura VIII.3	Perfil de temperatura em função do tempo (coluna sem isolamento – Ensaio 7).....	129
Figura VIII.4	Perfil de temperatura em função do tempo (coluna com isolamento – Ensaio 9).....	130
Figura VIII.5	Perfis de temperatura na fase líquida para coluna sem isolamento térmico (Ensaio 5) e com isolamento térmico (Ensaio 11).....	131
Figura VIII.6	Perfis das frações mássicas na fase líquida (Ensaio 7).....	133
Figura VIII.7	Perfis das frações molares na fase líquida (Ensaio 7).....	133
Figura VIII.8	Variação das composições ao longo da coluna (Ensaio 11).....	135
Figura VIII.9	Perfil de temperatura na fase líquida (Ensaio 7).....	136
Figura VIII.10	Influência da carga térmica sobre o perfil de temperatura (Ensaio 14, 15 e 16).....	139
Figura VIII.11	Perfis de eficiência (Ensaio 6 e 9).....	141
Figura VIII.12	Perfil de eficiência (Ensaio 8 e 11).....	142

Figura VIII.13	Perfis de eficiência (Ensaio 10 e 12).....	143
Figura VIII.14	Perfis de eficiência (Ensaio 4, 5 e 13).....	143
Figura VIII.15	Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 9).....	144
Figura VIII.16	Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 10).....	145
Figura VIII.17	Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 11).....	145
Figura VIII.18	Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 12).....	145
Figura VIII.19	Perfis de eficiência de O'Connell simulados para o prato (Ensaio 11 e 12).....	147
Figura IX.1	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR = 0,230E8 J/h).....	152
Figura IX.2	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR = 0,230E8 J/h).....	153
Figura IX.3	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h).....	154
Figura IX.4	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h).....	155
Figura IX.5	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h).....	156
Figura IX.6	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h).....	156
Figura IX.7	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h).....	158
Figura IX.8	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h).....	158

Figura IX.9	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h).....	159
Figura IX.10	Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h).....	160
Figura IX.11	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4).....	163
Figura IX.12	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4).....	164
Figura IX.13	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4).....	165
Figura IX.14	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4).....	166
Figura IX.15	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4).....	167
Figura IX.16	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR: 0,230E8 J/h).....	171
Figura IX.17	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR: 0,230E8 J/h).....	172
Figura IX.18	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h).....	173
Figura IX.19	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h).....	174
Figura IX.20	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h).....	175
Figura IX.21	Comparação entre dados simulados (modelagem de	

	estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h).....	176
Figura IX.22	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h).....	177
Figura IX.23	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h).....	178
Figura IX.24	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h).....	179
Figura IX.25	Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h).....	180
Figura IX.26	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4).....	182
Figura IX.27	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4).....	183
Figura IX.28	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4).....	184
Figura IX.29	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4).....	185
Figura IX.30	Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4).....	186
Figura X.1	Perfis das eficiências do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 5).....	194
Figura X.2	Perfis das eficiências do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 6).....	196
Figura X.3	Perfis das eficiências do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 8).....	197
Figura X.4	Perfis da eficiência do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 11).....	198

Figura X.5	Perfis da eficiência do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 12).....	199
Figura XI.1	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 5).....	206
Figura XI.2	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 6).....	207
Figura XI.3	Perfis das frações molares na interface e na fase líquida (Ensaio 6).....	208
Figura XI.4	Perfis das frações molares na interface e na fase vapor (Ensaio 6).....	209
Figura XI.5	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 8).....	209
Figura XI.6	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 11).....	210
Figura XI.7	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 12).....	210
Figura XI.8	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 5).....	211
Figura XI.9	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 6).....	212
Figura XI.10	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 8).....	213
Figura XI.11	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 11).....	214
Figura XI.12	Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 12).....	214
Figura XI.13	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 5).....	217
Figura XI.14	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 5).....	217
Figura XI.15	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 6).....	218

Figura XI.16	Perfis de temperatura nas fases líquida e vapor e na interface líquido/vapor (Ensaio 6).....	219
Figura XI.17	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 6).....	220
Figura XI.18	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 8).....	220
Figura XI.19	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 8).....	222
Figura XI.20	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 11).....	222
Figura XI.21	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 11).....	223
Figura XI.22	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 12).....	224
Figura XI.23	Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 12).....	224

NOMENCLATURA

Letras Latinas

A	área da seção transversal da coluna (cm)
a	área interfacial [L^{-1}]
a_h	área interfacial para a transferência de calor por unidade de volume de espuma (m^{-1})
a_m	área interfacial para a transferência de massa por unidade de volume de espuma (m^{-1})
a_{00}	função hidrodinâmica (adimensional)
A_{act}	área ativa do prato [L^2]
A_n	área disponível para o fluxo do vapor [L^2]
A_{open}	área aberta do prato [L^2]
AREA	área de borbulhamento (cm^2)
B	parâmetro empírico da equação (7.8) (adimensional)
BE	função do balanço de energia (adimensional)
BM	função do balanço de massa (adimensional)
C	concentração [M/L^3]
c	concentração total ($kmol/m^3$)
C^*	concentração do componente na fase líquida em equilíbrio com a fase vapor [M/L^3]
C_p	capacidade calorífica a pressão constante ($J/(mol.K)$)
\hat{C}_p	capacidade calorífica a pressão constante ($J/kg/K$)

$\overline{Cp_L}$	capacidade calorífica média do líquido (J/mol.K)
CPm	capacidade calorífica da mistura
ct	condutividade térmica (J/(cm.s.K))
$\overline{Cp_V}$	capacidade calorífica média do vapor, (J/mol.K)
D	coeficiente de difusão binário [L ² .t ⁻¹]
d	diâmetro do prato (cm)
d _B	diâmetro equivalente da bolha (m)
D _E	coeficiente de difusão "eddy"
DE	difusividade efetiva
DFMm	difusividade da mistura (m ² /s)
D _h	diâmetro dos furos [L]
DIF	difusividade binária [L ² /t]
D _L	difusividade da fase líquida [L ² /t]
Dm	densidade da mistura (g/m ³)
D _V	difusividade na fase vapor [L ² /t]
e	taxa de energia pontual (J/(cm ² .s))
Ef	eficiência de Barros & Wolf para mistura
EM	espaçamento médio para o fluxo de líquido (cm)
E _{MV}	eficiência de Murphree no prato para a fase vapor
E _O	eficiência global da coluna
E _{OV}	eficiência de Murphree no ponto
E _V	eficiência de vaporização
F	fluxo molar total (mol/s)
f	fugacidade

F^F	fator F definido como o produto do fluxo volumétrico de vapor e a raiz quadrada da densidade do vapor ($\text{g}^{1/2}/(\text{cm}^{1/2}.\text{s})$)
F_{hm}	fator de velocidade mínima do vapor através dos furos [$\text{M}^{0,5}\text{L}^{0,5}.\text{t}^{-1}$]
FKV	fração de vapor na alimentação
F^L	fluxo de líquido no prato
FLL	fluxo molar do componente na fase líquida (mol/s)
f^o	fugacidade no estado de referência
$FSTR$	fluxo molar do componente na alimentação (mol/s)
FVV	fluxo molar do componente na fase vapor (mol/s)
G	matriz geral
G^A	matriz do fator de fluxo na fase vapor
G^B	matriz dos coeficientes de transferência de massa invertidos ($\text{cm}^2.\text{s})/(\text{mol})$)
G^C	matriz dos fatores termodinâmicos
G^D	matriz de correção de fluxo finito
G^E	matriz do fator de fluxo na fase líquida
G_s	fluxo molar superficial do vapor (moles/s.m ²)
H	entalpia total (J/s)
\bar{H}	entalpia parcial molar (J/mol)
hc	coeficiente de transferência de calor ($\text{J}/(\text{cm}^2.\text{s.K})$)
HF	entalpia total da alimentação (J/s)
h_L	coeficiente de transferência de calor na fase líquida ($\text{J}/(\text{m}^2.\text{s.K})$)
H_{Lo}	altura do líquido sobre o prato [L]
H_{ow}	altura do líquido sobre o vertedor [L]
h_s	altura da espuma sobre o prato (m)

HU	“holdup” do líquido
h_v	coeficiente de transferência de calor na fase vapor ($J/(m^2.s.K)$)
HW	altura da represa [L]
[I]	matriz identidade
K	coeficiente de transferência de massa multicomponente ($mol/(cm^2.s)$)
k_A	coeficiente binário de transferência de massa baseado na área total do prato ($kmol/m^2/s$)
k_b	coeficiente binário de transferência de massa ($mol/(cm^2.s)$)
k_B	coeficiente binário de transferência de massa baseado na área total do prato ($kmol/m^2/s$)
k_c	coeficiente convectivo de transferência de massa [$L.t^{-1}$]
K_{eq}	constante de equilíbrio
K_L	coeficiente de transferência de massa global baseado na força motriz da fase líquida
k_L	coeficientes individuais de transferência de massa na fase líquida [L/t]
k_{La}	coeficiente de transferência de massa combinado na fase líquida ($mol/m^3.s$)
k_m	coeficiente convectivo de transferência de massa [L/t]
K_m	condutividade térmica da mistura ($W/m^{\circ}C$)
K_v	coeficiente de transferência de massa global baseado na força motriz da fase vapor
k_v	coeficientes individuais de transferência de massa na fase vapor [L/t]
k_{vAP}	coeficiente de transferência de massa combinado na fase vapor ($mol/m^3.s$)

K_{vaP}	coeficiente global de transferência de massa combinado para a fase vapor ($\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$)
k_x	coeficientes individuais de transferência de massa na fase líquida
k_y	coeficientes individuais de transferência de massa na fase vapor
L	vazão da fase líquida
Le	número de Lewis
L^F	fluxo volumétrico do líquido por unidade de espaçamento médio (cm^2/s)
LPR	fração da resistência na fase líquida
m	elemento da matriz geral G
m_{dist}	coeficiente de distribuição, expresso em concentração/volume
m_{eq}	inclinação da curva de equilíbrio líquido/vapor
N	fluxo total de transferência de massa entre as fases (mol/s)
n	taxa de transferência de massa pontual ($\text{mol}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$)
nc	número de componentes
N_{eq}	número de estágios de equilíbrio
nn	número de moles
N_{real}	número de estágios reais
$(NTU)_L$	número de unidades de transferência na fase líquida
$(NTU)_{ov}$	número de global de unidades de transferência na fase vapor
$(NTU)_V$	número de unidades de transferência na fase vapor
p	pressão parcial [$F \cdot L^{-2}$]
P	pressão total (atm)
P^*	pressão parcial do componente em equilíbrio com a concentração do componente na fase líquida
Pe	número de Péclet para a transferência de massa

PM	peso molecular (g/mol)
PMm	peso molecular da mistura (g/mol)
q	fluxo condutivo de calor ($J/(cm^2.s)$)
Q	taxa de calor removido (J/s)
q^A	parâmetro de área de Van der Waals
Q_f	vazão de afogamento (m^3/h)
R	constante universal dos gases
r	parâmetro de volume de Van der Waals
RE	função das relações entre os fluxos
RF	função das relações entre os fluxos
S	fluxo na saída lateral (mol/s)
Sc	número de Schmidt para a fase vapor
SO	função do somatório das frações molares na interface
S_{trip}	fator “stripping”
T	temperatura [T]
t_{exp}	tempo de exposição dos bolsões de matéria na interface líquido/vapor [t]
t_L	tempo de residência médio do líquido sobre o prato [t]
U	coeficiente global de transferência de calor ($J/(m^2.s.K)$)
u_G	taxa de fluxo de vapor ($ft^3/s).(ft^2)$)
U_h	velocidade do vapor através dos furos [L/t]
U_{hm}	velocidade mínima de vapor através dos furos [L/t]
U_{nf}	velocidade superficial do vapor na inundação [L/t]
VISm	viscosidade da mistura (g/m.s)
\bar{v}	volume parcial molar

V_o	velocidade do vapor baseada na área aberta do prato (m/s)
Vol	volume total
w_G	velocidade superficial do vapor (m/s)
x	fração molar na fase líquida
\tilde{x}	fração mássica na fase líquida
y	fração molar da fase vapor
y^*	fração molar do vapor em equilíbrio com o líquido
Z_L	distância percorrida pelo líquido sobre o prato (entrada e saída) [L]

Letras Gregas

α	difusividade térmica (L^2/t)
β	fator de correção do fluxo de transferência de calor (adimensional)
δ	espessura da interface [L]
ε	fluxo total de transferência de calor entre as fases (J/s)
ε_L	fração volumétrica do líquido na dispersão (adimensional)
ϕ	coeficiente de fugacidade (adimensional)
γ	coeficiente de atividade (adimensional)
κ_L	condutividade térmica na fase líquida (J/m.s.K)
κ_V	condutividade térmica na fase vapor (J/m.s.K)
λ	razão entre as inclinações das curvas de equilíbrio e de operação (adimensional)
μ	viscosidade [M/L.t]
μ_L	viscosidade da fase líquida (N.s/m ²)
ν_V	velocidade superficial do vapor (m/s)

ρ_m	densidade média da espuma sobre o prato [M/L^3]
ρ	densidade / massa específica [M/L^3]
σ	tensão superficial (N/m)
$\langle v_G \rangle$	velocidade do vapor baseada na área total do prato (m/s)
Ψ	efeito de arraste (adimensional)

SUPERESCRITOS

C	combinatorial
I	interface
L	fase líquida
mist	mistura
R	residual
S	saturação
T	total
V	fase vapor

SUBSCRITOS

i, ii	estágio
j, jj, k, kk	componente

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Devido à sua ampla integração com outras formas e sistemas de processamento, à sua capacidade de transferência de massa decorrente da interação entre as fases nos seus dispositivos internos de contato e às suas características fenomenológicas, a destilação é um dos processos de separação mais preferidos nas indústrias químicas e petroquímicas. Esta operação tem sua origem na antigüidade, tendo o seu desenvolvimento alcançado o ápice a partir da metade do século XX, quando os processos de separação assumiram uma nova dinâmica decorrente da demanda de combustível para a aviação e aos estoques de compostos petroquímicos.

Contrária às previsões dos últimos anos, a destilação ainda continua sendo o processo de separação mais importante nas indústrias químicas e petroquímicas. Considerando-se os diversos aspectos a serem explorados ainda, como o controle do processo, a recuperação de produtos de alto valor agregado e a purificação de misturas quanto à componentes indesejáveis, entre outros, torna a destilação a mais importante das operações unitárias de separação, o que

motiva o desenvolvimento de novos modelos, a realização de síntese e otimização e a incorporação de variáveis de modo a se obter grande precisão. Além disto, as colunas de destilação são responsáveis por um significativo custo nas plantas químicas devido ao elevado consumo de energia relacionado aos fenômenos decorrentes. Por isto, o desenvolvimento de tecnologia efetiva e confiável para a destilação é de crucial importância na redução do consumo de energia, hoje fator da maior importância. Na década passada, desenvolvimentos da tecnologia da destilação inseriram-se nas refinarias de petróleo e em diversos processos químicos, com abrangência principalmente em:

- novos projetos de processos;
- novos dispositivos de contato;
- novas aplicações para os equipamentos já existentes.

A maioria das tentativas para justificar a substituição da destilação por processos alternativos deve-se ao consumo excessivo de energia, com custos acentuados no processo. Assim, os processos de separação alternativos seriam usados quando da inviabilidade no uso da destilação ocasionada por fatores econômicos.

A destilação fundamenta-se na separação dos componentes devido à diferença de volatilidade entre eles. Neste processo é fornecido calor, como agente de separação, para proporcionar a geração de uma nova fase (vapor no refeedor) que interage com o líquido na superfície do prato, permitindo o enriquecimento do componente mais volátil no vapor. Por conseguinte, os componentes mais pesados, ou menos voláteis, permanecem na fase líquida, cuja concentração aumenta em direção à base da coluna. Na prática, operações consecutivas, deste tipo, são realizadas, de modo a se obter uma separação completa, limitada apenas por considerações econômicas, de projeto e pelas características da mistura. Nestas operações, o vapor e o líquido fluem em contracorrente, visando a transferência de massa e calor mediante contato intenso

entre as duas fases presentes. Neste processo, a transferência de massa entre as fases ocorre através da interface (líquido/vapor) formada, proporcionando o aumento da concentração do componente mais volátil na fase vapor e o seu conseqüente esgotamento na fase líquida.

Ao longo dos anos, diversos métodos e modelos matemáticos para o cálculo de colunas de destilação foram propostos e usados para estimar os parâmetros de grande relevância em processos industriais. SOREL (1899) descreveu os cálculos da coluna de destilação supondo o estabelecimento do equilíbrio termodinâmico no estágio. Na década de 20 surgiram os métodos gráficos propostos por PONCHON-SAVARIT (1921) e McCABE-THIELE (1925) que deram um novo impulso na interpretação do comportamento de colunas de destilação. O método de Ponchon-Savarit foi extensivamente substituído por métodos computacionais, mas o de McCabe-Thiele ainda é utilizado nos cursos de engenharia química, pelo fato de ilustrar os conceitos dos processos de separação por estágios envolvidos.

Com o advento dos computadores, foram desenvolvidos novos métodos e modelos cujo objetivo é a solução numérica das equações de Sorel. Computadores mais velozes permitiram o desenvolvimento de modelos de maior complexidade e precisão usando as equações de Sorel baseadas na suposição de equilíbrio termodinâmico entre as correntes de líquido e de vapor que deixam cada estágio. Nas colunas reais, entretanto, os estágios raramente alcançam o equilíbrio. Este desvio pode ser corrigido com a incorporação de modelos de eficiência. Os inconvenientes encontrados quando se utiliza os conceitos de eficiências foram extensivamente discutidos por KRISHNAMURTHY e TAYLOR (1985a) e por SEADER (1989). Para evitar a incorporação dos conceitos de eficiência, dado principalmente às limitações fenomenológicas dos modelos e das correções das eficiências, foi desenvolvido o modelo dos estágios de não equilíbrio por KRISHNAMURTHY e TAYLOR (1985a) e no Brasil por BARROS (1997) e PESCARINI (1996) em trabalhos no Laboratório de Desenvolvimento de

Processos de Separação (LDPS) – FEQ – UNICAMP. Tal modelo não incorpora a eficiência e a suposição do equilíbrio de fases é assumida somente na interface líquido/vapor.

Diversos programas computacionais foram desenvolvidos como o da modelagem de estágios de não equilíbrio (BARROS, 1997) que visa avaliar o comportamento dos processos de separação por destilação através de simulações. A grande relevância deste programa é a sua capacidade de avaliar o comportamento de parâmetros operacionais, geométricos e da mistura, dificilmente identificáveis na modelagem de estágios de equilíbrio. Tais parâmetros são inclusos, explicitamente, no modelo matemático de não equilíbrio e permitem avaliar, com maior precisão, o comportamento da coluna.

A limitação da modelagem de estágios de não equilíbrio, apesar de sua relevância fenomenológica, tem sido a ausência da corroboração com dados experimentais e um estudo detalhado dos coeficientes de transferência de massa e calor nas colunas de destilação que é apresentado neste trabalho. Dado ao elevado tempo computacional envolvido na modelagem de estágios de não equilíbrio (problema não tão sério atualmente), procurou-se estabelecer uma estreita relação com a modelagem de estágios de equilíbrio, estabelecendo-se um estudo pormenorizado do comportamento da eficiência nas colunas de destilação, de forma a permitir a estimativa de valores reais da eficiência, baseando-se na correlação de Barros & Wolf. Os resultados apresentados neste trabalho espelham também a importância do conhecimento da eficiência na avaliação de processos reais.

Assim sendo, esta dissertação abordará, em doze capítulos, todas estas problemáticas, enfocando a fundamentação teórica, modelagem de estágios de não equilíbrio, conceitos de eficiência, transferência de massa em colunas de prato e todo o desenvolvimento experimental necessário para o estudo dos

coeficientes de transferência de massa e calor e comparação entre dados experimentais e simulados.

CAPÍTULO II

OBJETIVOS E JUSTIFICATIVA

II.1 Objetivo Geral

O objetivo deste trabalho é avaliar experimentalmente o comportamento de uma coluna de destilação com pratos perfurados de forma a se averiguar as características da eficiência e utilizar os dados obtidos para a validação da modelagem de estágios de não equilíbrio, da correlação da eficiência desenvolvida por Barros & Wolf e para a determinação dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo do equipamento.

II.2 Objetivos Específicos

Constituem os objetivos específicos deste trabalho:

- desenvolvimento do projeto para a construção e montagem da coluna de destilação com pratos perfurados com vertedor de descarga do líquido;

- avaliação experimental das frações dos componentes da mistura etanol/água, da temperatura e da carga térmica fornecida ao refeedor;
- determinação da eficiência utilizando os dados experimentais;
- corroboração do modelo de estágios de equilíbrio com a correlação de eficiência de Barros & Wolf, mediante simulação numérica;
- validação do modelo de estágios de não equilíbrio utilizando os dados experimentais;
- avaliação dos perfis de eficiência de prato e dos componentes e dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo da coluna de destilação para o sistema etanol/água, utilizando as técnicas de simulação numérica.

II.3 Justificativa

A realização deste trabalho tem como relevância científica e tecnológica as avaliações experimentais e de modelos do processo de destilação. Nesta linha de pesquisa foram desenvolvidos trabalhos de modelagem matemática de estágios de não equilíbrio e de equilíbrio, esta última associada com a introdução de novas correlações para o cálculo da eficiência nos processos de separação por destilação.

Como os parâmetros de transferência de massa e calor utilizados na modelagem de estágios de não equilíbrio são de fundamental importância na avaliação de processos industriais, desenvolveu-se um equipamento, em escala de laboratório, para aquisição de dados que permitiram definir o comportamento real de alguns parâmetros comumente avaliados por simulação numérica. A grande relevância, entretanto, consistiu na quantificação de dados experimentais para poder compará-los com dados das duas modelagens apresentadas, o que permitirá, em trabalhos posteriores, desenvolver novas correlações para o cálculo

de eficiência ou avaliar correlações mais precisas utilizadas para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa e calor.

CAPÍTULO III

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

O equipamento mais comum para se realizar a destilação é a coluna com pratos, que consiste de uma seqüência vertical de estágios onde ocorre o contato entre o vapor e o líquido. A alimentação é feita na parte intermediária da coluna, com a possibilidade de múltiplas alimentações ao longo desta.

O líquido percorre a coluna de um prato para o outro através de canais de descida (vertedores) em direção à base da coluna, enquanto que o vapor sobe borbulhando vigorosamente através do líquido. O vapor flui de prato a prato pelo fato da pressão ser menor na parte superior da coluna. Assim, há um aumento da pressão do topo para a base da coluna. O líquido deve fluir contra este gradiente de pressão positiva, uma vez que é mais denso que a fase vapor. Logo, devido à diferença entre as densidades relativas do vapor e do líquido e à diferença de pressão ao longo do equipamento, ocorre naturalmente o fluxo do líquido em direção à base da coluna e o fluxo de vapor em direção ao topo da coluna. O escoamento das fases no prato é cruzado quando este contém vertedores de descida do líquido, mas também há colunas com pratos sem canais de descida e, neste caso, as fases escoam em contracorrente pela coluna. O vapor passa

através das perfurações ou campânulas existentes nos pratos e entra em contato com o líquido fluindo sobre o mesmo.

Além do casco, a coluna de destilação possui um refeedor e um condensador localizados na base e no topo da coluna, respectivamente. A maior pressão é oriunda do refeedor, cuja função é produzir o vapor que sobe pela coluna. O líquido retirado do refeedor é conhecido como produto pesado, de cauda ou de fundo. O condensador condensa os vapores que chegam ao topo da coluna. O condensado segue para um acumulador, onde parte retorna para o topo da coluna como refluxo e o restante é retirado como produto de topo. O refluxo é responsável pela corrente de líquido acima da alimentação.

O projeto completo de uma coluna de pratos envolve diversas etapas. RUSH e STIRBA (1957), BIDDULPH (1977), CHAN e FAIR (1984) e DRIBIKA e BIDDULPH (1986) consideraram, nos seus estudos, que uma das etapas básicas do projeto de uma coluna de destilação apresenta um elevado grau de incerteza, isto devido a obtenção do número de pratos reais a partir de pratos ideais, o que requer o conhecimento da eficiência. Assim, o modelo até agora aplicado tem sido o do cálculo dos parâmetros da coluna de destilação a partir de modelos ideais.

De um modo geral, depois da definição da mistura a ser separada e do método de separação desejado, o problema do equilíbrio de fases deve ser tratado. Além disto, deve-se determinar o número de estágios necessários para a separação especificada ou o procedimento de cálculo do número de estágios teóricos. Em sequência, o número de estágios de equilíbrio é convertido em número de pratos reais através da eficiência. RUSH e STIRBA (1957) consideraram que a redução do grau de incertezas no projeto de uma coluna de destilação requer o conhecimento mais real possível da eficiência de destilação.

É fundamental avaliar os cálculos que envolvem os demais equipamentos presentes na coluna (controladores, bombas, trocadores de calor, entre outros equipamentos ditos auxiliares) de forma que a coluna opere eficientemente.

A determinação do número de pratos ou estágios necessários para a separação especificada é o primeiro passo no projeto de uma coluna de destilação. Em 1893, SOREL publicou diversas equações baseando-se no conceito de estágio de equilíbrio para o cálculo do número de estágios teóricos, que posteriormente foram modificadas por LEWIS (1922), mediante simplificações que permitiram a aplicação das equações propostas.

A principal dificuldade encontrada neste método é a determinação da entalpia do vapor produzido nos diferentes pratos. Devido à complexidade para sua resolução, as equações de Sorel não foram muito utilizadas até 1921. Além disto, tais equações e a dificuldade de seu uso na solução de sistemas multicomponentes foi reconhecida. Com o objetivo de solucionar tal problema, Lewis modificou o método, introduzindo algumas simplificações. Primeiramente, desprezou as entalpias de mistura e as perdas de calor pela coluna. Segundo o autor, o líquido se aquece à medida que desce pela coluna e o vapor resfria na direção do condensador. O calor necessário para aquecer o líquido deve vir inteiramente do vapor, que é o único meio disponível para este propósito. Como a capacidade calorífica total do líquido num dado ponto da coluna excede a do vapor, a diferença entre as entalpias sensíveis do líquido e do vapor deve ser compensada à custa da entalpia latente de vaporização. Mas, de acordo com a regra de Trouton, a entalpia molar de vaporização diminui de um prato para outro mais acima, pois a temperatura diminui em direção ao topo da coluna. Assim, é possível que a vazão molar de vapor permaneça constante à medida que sobe pela coluna.

Em 1921, as equações de Sorel foram adaptadas a uma solução gráfica para sistemas binários, primeiramente por Ponchon e, então, por Savarit, que empregaram um diagrama entalpia/concentração. Em 1925 uma técnica simples, mas restrita ao método gráfico, foi desenvolvida por McCabe e Thiele. O método de Ponchon-Savarit apresenta uma solução gráfica das equações de Sorel, enquanto que o método de McCabe-Thiele é uma solução gráfica baseada nas simplificações de Lewis. Embora os métodos computacionais tenham procurado substituir o rigoroso método de Ponchon-Savarit, o método de McCabe-Thiele é tão simples e ilustrativo que permanecerá por mais algum tempo.

Apesar dos esforços na tentativa de desenvolver um método seguro para a determinação do número de estágios, observou-se que o número de pratos obtidos por estes métodos era sempre inferior ao necessário para atingir a separação desejada. Com isto, pôde-se afirmar que a hipótese de que o equilíbrio é atingido em todos os pratos é inconsistente. A partir daí, surgiram os conceitos de estágio de equilíbrio em conjunção com a eficiência.

A falta de um método satisfatório para o cálculo do número de estágios está na complexidade do problema. Esta complexidade origina-se no fato de ser o transporte de massa entre as fases vapor e líquida, em contato sobre o prato, responsável pelo valor da eficiência. Entram em consideração as resistências ao transporte de massa de ambas as fases que, por sua vez, dependem tanto de fatores geométricos do prato quanto das propriedades físicas das fases e do regime de escoamento sobre o prato.

Com o advento dos computadores, um grande número de métodos foram desenvolvidos para a solução numérica das equações de Sorel. Uma excelente revisão sobre este assunto foi realizada por SEADER (1985). Computadores mais poderosos permitiram o desenvolvimento de modelos com maior complexidade e acuracidade (HIGLER et al., 1999).

Através dos anos, a modelagem envolvida no cálculo do número de estágios tem apresentado progresso com o advento dos computadores e do desenvolvimento de simuladores comerciais. Alcançou-se o ponto onde, para a maioria dos problemas envolvendo o processo de destilação, os simuladores já estão disponíveis. Há, obviamente, grandes variações nos tipos de problemas a serem tratados por estes simuladores: desde aqueles envolvendo sistemas binários, com uma única alimentação e operando no estado estacionário, até sistemas multicomponentes. Os casos mais desafiadores são aqueles envolvendo estado transiente, múltiplas alimentações e saídas laterais.

Notáveis avanços nas diversas áreas envolvendo colunas de destilação têm sido realizados e alguns programas incorporam fatores como o “holdup”, a geometria e propriedades do sistema e o fluxo das fases para promover maior aproximação com as condições reais de operação do equipamento. Programas especiais foram desenvolvidos para levar em conta reações químicas que ocorrem em uma ou em ambas as fases em um estágio real.

Resumidamente, os cálculos de estágio a estágio alcançaram um ponto de alto desenvolvimento e as maiores mudanças estão concentradas em áreas envolvendo destilação reativa e dinâmica de colunas. Simuladores comerciais disponíveis apresentam um extensivo arquivo de dados de propriedades físicas. (FAIR, 1988).

III.1 Modelagem de Estágios de Equilíbrio e de Não Equilíbrio

Para se trabalhar com a modelagem de estágios de equilíbrio, geralmente utilizada nas simulações de colunas de destilação de sistemas multicomponentes, é necessária a introdução do conceito de eficiência para corrigir os desvios decorrentes do fato de que os estágios, na prática, raramente proporcionam o equilíbrio entre as fases que os deixam (PESCARINI, 1996).

Para descrever um estágio de equilíbrio, precisa-se somente de dados referentes ao equilíbrio líquido/vapor e balanços de massa e energia. O modelo de estágios de não equilíbrio, por sua vez, proporciona uma descrição mais completa do equipamento. Entretanto, requer mais dados. Além dos dados do equilíbrio de fases e dos balanços de massa e energia, é necessário o conhecimento de todas as propriedades que descrevem o processo de transferência de massa e calor no equipamento, tais como: densidade, viscosidade, tensão superficial, área interfacial, difusividade, condutividade térmica, coeficientes de transferência de massa e calor, entre outros.

O segundo ponto em que os dois modelos diferem grandemente está relacionado com a descrição do equipamento. Na modelagem de estágios de equilíbrio precisa-se fornecer somente o número de estágios e a localização da(s) alimentação(ões). Em contrapartida, na modelagem de estágios de não equilíbrio há necessidade de uma descrição mais completa (WESSELINGH, 1997), como:

- número de pratos nas seções de esgotamento e retificação;
- diâmetro das seções;
- espaçamento entre os pratos;
- configuração da represa;
- diâmetro das perfurações;
- área livre;
- altura da represa;
- área de transferência de massa e calor, entre outros.

A característica básica da modelagem de estágios de não equilíbrio é a determinação dos fluxos de transferência de massa e calor na interface. Como os coeficientes de transferência de massa multicomponentes e os coeficientes de transferência de energia são funções dos coeficientes binários de transferência de

massa e da área interfacial, PESCARINI (1996) concluiu que a exatidão do modelo está diretamente relacionada com a exatidão das correlações utilizadas.

III.1.1 Modelagem de estágios de equilíbrio

A modelagem de estágios de equilíbrio é muito utilizada, pois não necessita de uma descrição completa do equipamento. Supõem-se, neste modelo, que as correntes que deixam o estágio estão em equilíbrio entre si. O balanço material, as equações do equilíbrio de fases, a equação dos somatórios e o balanço de energia para cada estágio são resolvidas usando algoritmos disponíveis, obtendo, desta forma, os fluxos de líquido e vapor, bem como os perfis de temperatura e de composição ao longo da coluna de destilação (KRISHNAMURTHY e TAYLOR, 1985a).

III.1.1.1 Definições de eficiência

III.1.1.1.1 Eficiência global da coluna

Diferentes expressões para o cálculo da eficiência de prato foram propostas ao longo dos anos. O procedimento mais simples é a expressão proposta por W. K. LEWIS em 1922, que relaciona o número de pratos reais (N_{real}) e ideais (N_{eq}) para o cálculo da eficiência global da coluna:

$$E_O = \frac{N_{\text{eq}}}{N_{\text{real}}} \quad (\text{III.1})$$

onde E_O é a eficiência global da coluna, cujo valor varia de 0 a 100%.

O inconveniente deste método é o fato de se tentar representar o complexo processo de equilíbrio em cada estágio através de um simples parâmetro que não contém uma relação direta com os parâmetros de transferência de massa (KING, 1980).

III.1.1.1.2 Eficiência de prato

A eficiência de Murphree para a fase vapor é amplamente usada e está baseada nas considerações sobre a transferência de massa, assumindo que:

- a fase líquida encontra-se completamente misturada;
- a fase vapor flui através do líquido em fluxo pistonado;
- o processo de transferência de massa é controlado pela fase vapor.

O resultado destas suposições resulta na equação (III.2), proposta por Murphree em 1925, que relaciona as diferenças de concentração entre as correntes de vapor que entram e saem do prato e a diferença de concentração entre a corrente de vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato e a corrente de vapor que entra no prato.

$$(E_{MV})_{i,j} = \frac{(y_{i,j} - y_{i-1,j})}{(y_{i,j}^* - y_{i-1,j})} \quad (III.2)$$

onde E_{MV} é a eficiência de Murphree para a fase vapor para o componente j no prato i , y_j é a fração molar real da espécie j na corrente de vapor que abandona o prato e y_j^* é a fração molar da espécie j na fase vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato.

Para uma mistura binária, os valores da eficiência de Murphree para a fase vapor $(E_{MV})_j$ podem ser iguais para os dois componentes. Para misturas multicomponentes é comum assumir que a eficiência de Murphree para a fase vapor $(E_{MV})_j$ seja igual para todos os componentes.

III.1.1.1.3 Eficiência de prato no ponto

Os valores da eficiência de Murphree para a fase vapor podem ser obtidos a partir de dados experimentais ou através de correlações empíricas e semi-empíricas. Estes valores, no entanto, são geralmente apresentados na forma da eficiência de Murphree no ponto, E_{OV} , cuja equação é similar a equação (III.2), mas aplicada somente a um ponto particular no líquido sobre o prato (na eficiência do prato, trata-se do líquido que deixa o prato):

$$E_{OV} = \left(\frac{y_{i,j} - y_{i+1,j}}{y_{i,j}^* - y_{i+1,j}} \right)_{\text{ponto}} \quad (\text{III.3})$$

onde $y_{i,j}^*$ é a composição do componente j na fase vapor em equilíbrio com o mesmo componente na fase líquida que abandona o ponto no prato considerado.

III.1.1.1.4 Relação entre eficiências

LEWIS (1936) desenvolveu várias relações entre a eficiência de Murphree na fase vapor (E_{MV}) e a eficiência de Murphree no ponto (E_{OV}) baseado na diferença dos modos de fluxo do vapor e do líquido. O autor considerou que se o

vapor e o líquido estão completamente misturados sobre o prato, então a equação (III.4) é válida:

$$E_{MV} = E_{OV} \quad (III.4)$$

Os valores da eficiência de Murphree no prato para a fase líquida, entretanto, não são iguais à eficiência de ponto.

Se o líquido se move em fluxo pistonado através do prato e o vapor se move em fluxo pistonado através do líquido, mas não estão completamente misturados, as duas eficiências são relacionadas conforme a equação (III.5).

$$E_{MV} = \frac{1}{\lambda} \cdot (e^{\lambda \cdot E_{OV}} - 1) \quad (III.5)$$

onde $\lambda = m_{eq} \cdot \frac{V}{L}$ e m_{eq} representa a inclinação da curva de equilíbrio líquido/vapor que assume-se ser constante para todo o prato.

Em todos os casos, a eficiência de Murphree na fase vapor é maior que a eficiência de Murphree no ponto quando se usa a equação (III.5) e a razão entre elas (E_{MV}/E_{OV}) é muito sensível ao valor de λ . Para um sistema multicomponentes, a inclinação da curva de equilíbrio não está somente relacionada com os valores da constante de equilíbrio.

As equações (III.4) e (III.5) representam os extremos entre a mistura completa e incompleta. Baseados em dados experimentais, FAIR et al. (1983)

recomendaram um modelo de mistura parcial que envolve o número de Péclet (Pe) para a transferência de massa, conforme mostra a equação (III.6):

$$\frac{E_{MV}}{E_{OV}} = \frac{1 - e^{-(\eta + Pe)}}{(\eta + Pe)\{1 + [(\eta + Pe)/\eta]\}} + \frac{e^{\eta} - 1}{\eta\{1 + [\eta/(\eta + Pe)]\}} \quad (III.6)$$

onde:

$$\eta = \frac{Pe}{2} \left[\left(1 + \frac{4\lambda E_{OV}}{Pe} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (III.7)$$

O número de Péclet é um parâmetro de mistura parcial e é definido pela equação (III.8):

$$Pe = Z_L^2 / D_E t_L \quad (III.8)$$

onde Z_L é o caminho percorrido pelo líquido sobre o prato (entrada e saída), D_E é o coeficiente de difusão “eddy” e t_L é o tempo de residência médio do líquido sobre o prato.

BARKER e SELF (1962) definiram uma correlação adequada para o coeficiente de difusão (D_E) em termos da velocidade do vapor e do “holdup” do líquido sobre o prato.

Na ausência de dados experimentais para o cálculo da eficiência de Murphree no ponto (E_{OV}), FAIR et al. (1983) mostraram que colunas em escala de laboratório, do tipo Oldershaw com pratos perfurados de 1 a 2 polegadas de

diâmetro, podem ser usadas para se determinar os valores da eficiência de Murphree no ponto (E_{OV}), especialmente para sistemas binários. Por outro lado, as correlações de Chan e Fair (SEADER, 1989) baseadas na teoria da transferência de massa para sistemas multicomponentes, podem ser usadas nas equações (III.5) e (III.6) para predizer a eficiência de Murphree no ponto.

III.1.1.1.5 Eficiência de vaporização

A eficiência de vaporização proposta por Holland em 1970 é definida como uma extensão da definição do valor da constante de equilíbrio.

$$(E_V)_{i,j} = \frac{y_{i,j}}{K_{eq,i,j} \cdot x_{i,j}} \quad (III.9)$$

Os valores da eficiência de vaporização (E_V) devem ser calculados a partir de dados experimentais. Assim, MISKIN et al. (1972) usando o sistema (N-hexano/metilciclopentano/benzeno) determinaram a eficiência de vaporização dos componentes. CASTELLS et al. (1974), citado por SEADER (1989), mostraram que valores da eficiência de vaporização (E_V) foram obtidos mais facilmente a partir de dados experimentais, particularmente para colunas que operavam a refluxo variável.

MEDINA et al. (1978) e STANDART (1971), citado por SEADER (1989), obtiveram maior aplicabilidade da eficiência de vaporização quando comparada com a eficiência de Murphree na fase vapor. STANDART (1971) citado por SEADER (1989) mostrou que a eficiência de vaporização não relaciona o fenômeno de difusão para misturas multicomponentes. MEDINA et al. (1979) determinaram os valores de eficiência de vaporização e da eficiência de Murphree

para a fase vapor a partir de dados experimentais para sistemas ternários ideais e não-ideais. Eles observaram que os valores da eficiência de vaporização (E_V) variaram amplamente para cada espécie. Para as espécies mais voláteis, a eficiência de vaporização (E_V) normalmente foi menor que um, enquanto que para as espécies menos voláteis, maior que um; para espécies de volatilidade intermediária, a eficiência de vaporização (E_V) situava-se próximo à unidade. As eficiências de Murphree apresentaram maior precisão, situando-se entre zero e um.

III.1.1.1.6 Outras definições de eficiência

A limitação mais séria da eficiência de Murphree é a suposição de que o líquido que deixa o prato está no seu ponto de bolha. Hausen removeu esta suposição mantendo a forma da eficiência de Murphree para a fase vapor (E_{MV}) dada na equação (III.2), especificando que y_j^* é a fração molar da espécie j que resultaria do cálculo de um “flash”, com a composição de alimentação igual à soma das correntes que entram no prato.

A superioridade da eficiência de Hausen sobre a eficiência de Murphree para a fase vapor foi demonstrada por HO e PRINCE (1970) para sistemas binários e por MEDINA et al. (1979) para sistemas multicomponentes. Foi observado que a eficiência de Hausen varia menos com a composição que a eficiência de Murphree para a fase vapor (E_{MV}) para uma dada espécie. Apesar da aparente melhoria proposta por Hausen, ela tem tido pouca aceitação pois é mais complexa para o cálculo a partir de dados experimentais e de difícil incorporação nos algoritmos para o projeto e simulação quando comparada com a eficiência de Murphree.

Muitos autores consideram as eficiências de COLBURN (1936), de NORD (1946), de HAUSEN (1953), de STANDART (1965) e de HOLLAND (1980), entre outras, que não serão aqui demonstradas, como eficiências de Murphree modificadas, pois todas são definidas como uma relação entre as frações molares.

A eficiência de vaporização definida por Holland não pertence a esta classe de eficiências, uma vez que não é definida por uma relação entre diferenças das frações molares. Esta está representada na equação (III.9), onde K_{eqij} é a constante de equilíbrio do componente j no prato i .

III.1.1.2 Métodos empíricos para a determinação da eficiência

Há um número muito grande de correlações publicadas destinadas à determinação da eficiência. No entanto, a maior parte destas possui aplicação restrita, uma vez que não leva em conta todas as variáveis envolvidas nos processos de transferência de massa e calor. Algumas apresentam um bom fundamento teórico, entretanto, são complexas pois dependem de variáveis dificilmente correlacionáveis, como o diâmetro médio das bolhas de vapor e a perda de carga através da espuma (BARROS, 1997).

A primeira correlação para o cálculo da eficiência foi apresentada por DRICKAMER e BRADFORD (1943). Conforme observado pelos próprios autores, esta correlação tem aplicação limitada uma vez que leva em conta somente a viscosidade da alimentação. Além disto, O'CONNELL (1946) observou que a correlação de Drickamer e Bradford cobria apenas misturas com baixa volatilidade relativa e estendeu sua faixa de aplicação. O'CONNELL (1946) usou na sua correlação o produto da viscosidade pela volatilidade relativa como parâmetros necessários para o cálculo da eficiência.

A correlação de O'CONNELL (1946), por sua vez, foi melhorada por CHU (1951) que incluiu outros fatores na correlação empírica, tais como a relação entre as vazões internas de líquido e vapor na coluna e relações geométricas do borbulhador e do prato.

WINKLE et al. (1957) desenvolveram uma correlação empírica para a eficiência do prato, usada para prever a eficiência de sistemas binários. Esta correlação inclui as variáveis do sistema e os parâmetros do projeto do prato que afetam a eficiência.

A tendência no desenvolvimento destas correlações tem como objetivo levar em conta o maior número possível de variáveis; assim, a correlação de WINKLE et al. (1957), embora leve em consideração um grande número de variáveis, está em desacordo com alguns resultados bem estabelecidos, como por exemplo, a eficiência de prato ser inversamente proporcional à difusividade do líquido; sendo assim, desaconselha-se o seu uso uma vez que pode conduzir a resultados errôneos.

O estudo mais extenso sobre eficiências de pratos perfurados e com borbulhadores disponível na literatura foi o desenvolvido pelo American Institute of Chemical Engineers (AIChE, 1958). Foi o estudo mais pormenorizado dos efeitos das propriedades físicas, geométricas e operacionais sobre a eficiência de pratos. O método desenvolvido para a análise e predição de eficiências envolve as taxas de transferência de massa nas fases líquida e vapor, para se determinar o número de unidades de transferência global da fase vapor $(NTU)_V$. Na análise da transferência de massa é usada a teoria das duas resistências. O número de unidades de transferência é então convertido em uma eficiência de ponto pelo uso do modelo de Murphree (KING, 1980). As mudanças na composição do líquido através do prato são então consideradas através de um modelo de mistura no prato para converter a eficiência de ponto em uma eficiência de Murphree para a

fase vapor para todo o estágio (E_{MV}). Finalmente, os efeitos de arraste são estimados e usados para converter a eficiência de Murphree da fase vapor em uma eficiência aparente, que é usada quando outras correções não são feitas no cálculo da destilação para os efeitos de arraste de líquido.

Para determinar o valor de $(NTU)_V$, AIChE (1958) desenvolveram a seguinte expressão:

$$(NTU)_V = \frac{0,776 + 0,116 \cdot HW - 0,290 \cdot F^F + 0,0217 \cdot L}{(Sc)^{1/2}} \quad (III.10)$$

onde:

Sc	número de Schmidt para a fase vapor
HW	altura da represa (in)
F^F	fator F, definido como o produto do fluxo volumétrico de vapor (ft^3/s).(ft^2 da área de borbulhamento do prato) e a raiz quadrada da densidade do vapor (lb/ft^3)
L	taxa de líquido (gal/min).(ft largura média da coluna)

Calcula-se o “holdup” do líquido sobre o prato (HU) através da expressão:

$$HU = 1,65 + 0,19 \cdot HW + 0,020 \cdot L - 0,65 \cdot F^F \quad (III.11)$$

O tempo de residência médio do líquido sobre o prato, em segundos, é calculado de acordo com a equação (III.12).

$$t_L = \frac{37,4 \cdot HU \cdot Z_L}{L} \quad (\text{III.12})$$

onde Z_L é a distância (ft) percorrida pelo líquido sobre o prato e pode ser tomada como a distância entre o vertedor de entrada e saída de líquido.

Determina-se o valor de $(NTU)_L$ através da seguinte equação:

$$(NTU)_L = \left(1,065 \cdot 10^4 \cdot D_L\right)^{1/2} \cdot (0,26 \cdot F^F + 0,15) \cdot t_L \quad (\text{III.13})$$

onde D_L é a difusividade da fase líquida (ft^2/h).

Combina-se a equação (III.10) e (III.13) para se determinar a eficiência de prato no ponto (E_{OV}), definida pela equação (III.14):

$$\frac{1}{-\ln(1-E_{OV})} = \frac{1}{(NTU)_{OV}} = \frac{1}{(NTU)_V} + \frac{\lambda}{(NTU)_L} \quad (\text{III.14})$$

onde λ é a razão entre as inclinações das curvas de equilíbrio e de operação.

A difusividade efetiva na direção do fluxo de líquido é definida e calculada a partir da equação (III.15):

$$(DE)^{1/2} = 0,0124 + 0,017 \cdot u_G + 0,00250 \cdot L + 0,0150 \quad (\text{III.15})$$

onde:

u_G taxa de fluxo de vapor (ft^3/s).(ft^2)

Para pratos perfurados recomenda-se multiplicar DE por 1,25. Calcula-se o número de Péclet a partir da equação (III.8). Obtém-se a razão $\frac{E_{MV}}{E_{OV}}$ a partir de gráficos ou a partir da equação (III.6); o uso de gráficos requer o conhecimento da eficiência de Murphree no ponto, a razão entre as curvas de operação e de equilíbrio e o número de Péclet. A literatura recomenda não usar valores de $\frac{E_{MV}}{E_{OV}}$ maiores que 1,2 e cita a necessidade de se avaliar o comportamento dos pratos com diâmetros acima de dois metros.

Determinar o arraste de líquido (Ψ) a partir de gráficos. Corrigir a eficiência de prato resultante devido a este efeito através da equação de Colburn para se calcular a eficiência aparente:

$$E_a = \frac{E_{MV}}{1 + [\Psi \cdot E_{MV} / (1 - \Psi)]} \quad (\text{III.16})$$

que relaciona a eficiência de Murphree na fase vapor (E_{MV}), a eficiência obtida na ausência do efeito de arraste de líquido, com a eficiência aparente (E_a), a eficiência obtida na presença do efeito de arraste (KING, 1980).

A correlação desenvolvida por AIChE (1958) é a base para o entendimento e interpretação mais profundos deste problema. No entanto, os efeitos de transferência de calor foram ignorados e isto pode induzir a erros nos cálculos da eficiência.

BARROS (1997) fez um estudo detalhado dos conceitos e métodos empíricos para a predição da eficiência, o que inclui as correlações empíricas e semi-empíricas e o vasto número de variáveis que afetam a eficiência de destilação e desenvolveu correlações para predizer a eficiência. Trabalhando com sistemas multicomponentes, BARROS (1997) identificou o comportamento da eficiência dos componentes ao longo da coluna e observou que na região de esgotamento, a coluna é governada pela eficiência dos componentes menos voláteis, ocorrendo o inverso na região de retificação. Este comportamento evidencia a influência das concentrações sobre a eficiência do processo.

Embora o modelo de estágio de equilíbrio, modificado com a incorporação da eficiência de estágio, possa ser adequado em muitos casos de mistura binária, suas deficiências para aplicação em misturas de três ou mais componentes foram reconhecidas.

TOOR (1957), citado por SEADER (1989), mostrou que a transferência de massa em misturas multicomponentes é mais complexa do que em sistemas binários devido à ocorrência de fenômenos como a difusão reversa (difusão de uma espécie contra seu próprio gradiente de concentração), difusão osmótica (difusão de uma espécie apesar de não haver gradiente de concentração) ou a não ocorrência de difusão embora exista uma força motriz.

Cálculos teóricos realizados por TOOR e BURCHARD (1960) demonstraram a possibilidade de valores negativos de E_{MV} em sistemas multicomponentes; em sistemas binários, valores da eficiência de Murphree no ponto (E_{OV}) devem situar-se entre 0 e 1.

Em 1977, usando as formulações matriciais das relações das taxas de transporte interfacial, KRISHNA et al. (1977) estenderam o trabalho teórico de

TOOR E BURCHARD (1960) e mostraram que quando a força motriz (Δy_j) da espécie j é significativamente pequena quando comparada com as forças motrizes das outras espécies, sua taxa de transporte pode ser controlada pelas taxas de transporte das outras espécies. Isto resultou em valores da eficiência de Murphree para a fase vapor (E_{MV}) na faixa de $-\infty$ a $+\infty$. Para provar os cálculos, eles conduziram experimentos em uma coluna de destilação com 0,076 metros de diâmetro com três pratos perfurados que operou a refluxo total no regime “spray” usando o sistema etanol / ter-butanol / água. Os autores verificaram a tendência do ter-butanol assumir eficiências negativas e positivas (os valores experimentais máximos e mínimos obtidos foram +527% e – 2,798%, respectivamente). Além disto, valores diferentes de eficiências para água e etanol foram obtidos.

Mais recentemente, BIDDULPH et al. (1988) determinaram as eficiências para misturas ternárias e quaternárias de água e álcoois em dois tipos de coluna de destilação. Uma coluna Oldershaw, de 0,038 metros de diâmetro, foi usada para determinar as eficiências no ponto, E_{OV} , e uma coluna com três pratos retangulares de 0,089 metros de largura e 1,067 metros de comprimento foi usada para se determinar os valores da eficiência de Murphree para a fase vapor e a eficiência de Murphree no ponto. Os resultados mostraram significativa diferença entre as eficiências de ponto dos diversos componentes.

As limitações presentes nas diversas correlações citadas na literatura para o estudo e determinação da eficiência nas colunas de destilação, estimularam o desenvolvimento de uma correlação mais abrangente e que considera os parâmetros de transferência de calor e massa como fundamentais na sua avaliação. BARROS (1997) constatou que todos os parâmetros na coluna de destilação influem no valor da eficiência: o tipo de alimentação (líquido sub resfriado, vapor super aquecido, mistura líquido-vapor, vapor saturado, líquido saturado), tipo de especificação, composições de alimentação, condições térmicas de alimentação, influenciam nos perfis dos fluxos de líquido e vapor e nas suas

respectivas composições. Os perfis de temperatura sofrem oscilações significativas.

Para o desenvolvimento da nova correlação, BARROS (1997) correlacionou alguns parâmetros através de equações de propriedades físicas (densidade, viscosidade, peso molecular e difusividade) e térmicas (condutividade térmica e capacidade calorífica) e avaliou-os em termos do desempenho na coluna de destilação. Foram variadas especificações e temperatura de alimentação permitindo trabalhar com uma única especificação, capaz de representar todas as perturbações possíveis e generalizar a equação para qualquer caso estudado. A equação (III.17) representa a correlação proposta para o estudo e avaliação da eficiência de pratos na coluna de destilação, dependente das propriedades de mistura, que são funções dos fluxos totais e dos componentes, de temperatura, frações molares, além das propriedades críticas.

$$\eta_{i,j}^L = 38,5309 \cdot \left[\frac{\bar{k}}{\overline{C_p}} \cdot \frac{\bar{\rho}}{\mu} \cdot D_{i,j} \cdot \overline{PM} \right]^{-0,04516} \quad (\text{III.17})$$

onde:

η	eficiência de Barros & Wolf
\bar{k}	condutividade térmica média da mistura (W/cm.K)
$\overline{C_p}$	capacidade calorífica média da mistura (J/mol.K)
$\bar{\rho}$	densidade média da mistura (g/cm ³)
$\bar{\mu}$	viscosidade média da mistura (cP)
D	difusividade mássica (cm ² /s)
\overline{PM}	peso molecular médio da mistura (g/mol)

Para a determinação do perfil da eficiência dos componentes, a mesma correlação foi utilizada, só que desta vez com parâmetros de componentes puros.

CONCLUSÃO

Pode-se concluir que há inúmeras definições de eficiência de estágio, destacando-se as de Murphree, Hausen, Hausen generalizada, vaporização entre outras. Apesar do desenvolvimento de inúmeras correlações, nenhuma levou a melhores resultados do que a desenvolvida por AIChE (1958). Por isso, ela continua sendo amplamente usada. Em destilação envolvendo sistemas binários, os conceitos de eficiência mostraram-se bastante úteis. Os valores encontrados, normalmente, são positivos e geralmente abaixo de 1. Tendem a ser praticamente constantes ao longo da coluna. Em sistemas multicomponentes, podem ocorrer fenômenos que promovam o movimento de um componente contra o seu gradiente de concentração, fazendo com que certos conceitos, como a eficiência de prato, não se apliquem para tais sistemas. Embora o conceito de eficiência tenha sido útil, a maior limitação na sua aplicação é por não ser facilmente relacionada com a construção e o comportamento do equipamento. BARROS (1997) identificou uma série de dificuldades quando do estudo da eficiência, a destacar:

- o elevado número de variáveis operacionais envolvidas e a sua complexa interação, tornando os resultados provenientes de um dado estudo aplicado às condições específicas estudadas, não podendo ser estendidas de modo direto e simples a outros casos;
- as informações e os dados sobre a eficiência, disponíveis na literatura, são relativamente escassos, principalmente quanto aos sistemas multicomponentes;
- as dificuldades para trabalhos experimentais são grandes, uma vez que ao se propor o estudo de uma dada variável, pode ocorrer a interferência de outros

parâmetros que são claramente evidenciados, distorcendo as interpretações dos resultados;

- apesar das diversas publicações sobre o estudo da eficiência, poucos trabalhos têm sido feitos considerando o projeto de colunas industriais.

Extensivas discussões sobre os inconvenientes encontrados quando da utilização dos conceitos de eficiência são dados por KRISHNAMURTHY e TAYLOR (1985a) e por SEADER (1989).

Pode-se, portanto, identificar a dificuldade de se trabalhar com a modelagem de estágios de equilíbrio. As restrições apresentadas levaram ao estudo e desenvolvimento do modelo de estágios reais (não equilíbrio), que se caracteriza por não necessitar de valores para a eficiência. Baseado nestas considerações, os capítulos seguintes apresentam uma descrição completa a respeito da modelagem de estágios de não equilíbrio, incluindo as equações utilizadas no desenvolvimento de tal modelo e a caracterização dos processos de transferência de massa e calor em uma coluna de destilação com pratos perfurados, incluindo equações e correlações para a determinação dos coeficientes de transferência de massa e calor presentes na literatura.

CAPÍTULO IV

MODELAGEM DE ESTÁGIOS DE NÃO EQUILÍBRIO

A modelagem de estágios de não equilíbrio, para a simulação de processos de separação a contracorrente no estado estacionário, é descrita neste capítulo. Este modelo inclui o cálculo das taxas de transferência de massa e calor e pode representar o comportamento real de processos físicos que ocorrem numa coluna de destilação com pratos.

Em 1976, KRISHNA e STANDART apresentaram uma ampla revisão sobre a transferência de massa e energia em sistemas multicomponentes; usaram como base a abordagem do modelo de equilíbrio proposta por BIRD et al. (1960). Avaliaram a possibilidade de aplicar a teoria no projeto prático e na transferência simultânea de massa e calor e observaram que as transferências de massa e calor para sistemas multicomponentes são muito mais complexas que em sistemas binários.

A característica básica do modelo é que as equações dos balanços de massa e energia são descritas separadamente para cada fase e conectadas pelas

equações de conservação de massa e energia e relações de equilíbrio descritas na interface (KRISHNAMURTHY e TAYLOR, 1985a).

A Figura IV.1 descreve as características do modelo de estágios de não equilíbrio e ilustra um único estágio de uma coluna de destilação com escoamento em contracorrente com duas fases (líquido e vapor) que não estão em equilíbrio. O estágio está em equilíbrio mecânico, isto é, a pressão é considerada constante ($P_i^V = P_i^L = P_i^L$). Também representa a ocorrência da transferência de massa e calor através da interface (linha pontilhada). O ponto central é a zona onde as fases líquida e vapor são colocadas em contato de forma a promover a transferência de massa e energia entre as fases.

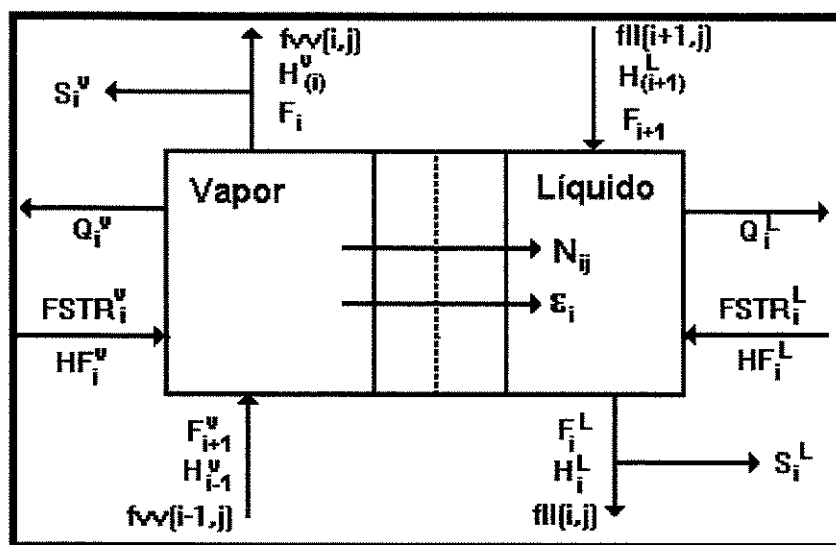


Figura IV.1 – Representação esquemática do modelo de estágios de não equilíbrio

Este modelo considera a não existência de equilíbrio entre as fases líquida e vapor que deixam o estágio. O equilíbrio é apenas considerado na interface que separa as duas fases em contato.

IV.1 Equações Envolvidas

Considerando o estado estacionário, as equações que descrevem o processo de separação são: balanço de massa por componente na fase líquida, balanço de energia na fase líquida, balanço de massa por componente na fase vapor, balanço de energia na fase vapor, balanço de massa por componente na interface, balanço de energia na interface, equações de somatório na interface e relações de equilíbrio por componente na interface (PESCARINI et al., 1996).

Balanço de Massa por Componente na Fase Líquida

$$BM_{i,j}^L = FLL(i,j) \cdot \left(1 + \frac{S_i^L}{F_i^L}\right) - FLL(i+1,j) - FSTR(i,j) \cdot (1 - FKV_i) - N_{i,j}^L = 0 \quad (IV.1)$$

$$FSTR(i,j) = FSTR(i,j)^L + FSTR(i,j)^V \quad (IV.2)$$

$$FSTR(i,j)^L = FSTR(i,j) \cdot (1 - FKV_i) \quad (IV.3)$$

$$FSTR(i,j)^V = FSTR(i,j) \cdot FKV_i \quad (IV.4)$$

onde:

BM	função do balanço de massa (adimensional)
FLL	fluxo molar do componente na fase líquida (mol/s)
S	fluxo na saída lateral (mol/s)
F	fluxo mássico total (mol/s)
FSTR	fluxo molar do componente na alimentação (mol/s)
FKV	fração de vapor na alimentação
L	fase líquida

V	fase vapor
i	estágio
j	componente

Balanço de Massa por Componente na Fase Vapor

$$BM_{i,j}^V = FVW(i,j) \cdot \left(1 + \frac{S_i^V}{F_i^V}\right) - FVW(i-1,j) - FKV_i \cdot FSTR(i,j) + N_{i,j}^V = 0 \quad (IV.5)$$

Onde $N_{i,j}^L$ e $N_{i,j}^V$ são os fluxos mássicos difusionais da espécie j na fase líquida e na fase vapor e FVW o fluxo molar do componente na fase vapor em mol/s.

Balanço de Energia na Fase Vapor

$$BE_i^V = \left(1 + \frac{S_i^V}{F_i^V}\right) \cdot H_i^V - HF_i^V - H_{i-1}^V + Q_i^V + \varepsilon_i^V = 0 \quad (IV.6)$$

Balanço de Energia na Fase Líquida

$$BE_i^L = \left(1 + \frac{S_i^L}{F_i^L}\right) \cdot H_i^L - HF_i^L - H_{i+1}^L + Q_i^L - \varepsilon_i^L = 0 \quad (IV.7)$$

onde:

BE função do balanço de energia (adimensional)

H	entalpia total (J/s)
HF	entalpia total da alimentação (J/s)
Q	taxa de calor removido (J/s)
ε	fluxo total de transferência de calor entre as fases (J/s)

Convencionou-se que as transferências de massa e calor que ocorrem da fase vapor para a fase líquida são positivas (PESCARINI, 1996).

Equações na Interface

A interface é considerada uniforme, não havendo resistência à transferência de massa e energia, isto é, não existe acúmulo de massa e energia; há o equilíbrio termodinâmico (teoria das duas resistências).

Balanços de Massa por Componente na Interface

$$BM_{i,j} = \left(1 + \frac{S_i^V}{F_i^V}\right) \cdot FV_{i,j} + \left(1 + \frac{S_i^L}{F_i^L}\right) \cdot FLL_{i,j} - FV_{i-1,j} - FLL_{i+1,j} - FSTR_{i,j} = 0 \quad (IV.8)$$

$$BM_{i,j} = BM_{i,j}^L + BM_{i,j}^V \quad (IV.9)$$

$$N_{i,j}^L - N_{i,j}^V = 0 \quad (IV.10)$$

$$N_{i,j} = N_{i,j}^L = N_{i,j}^V \quad (IV.11)$$

$$RF_{i,j}^V = N_{i,j} - N_{i,j}^V = 0 \quad \text{onde } j=1 \text{ a } nc-1 \quad (IV.12)$$

K_{eq}	constante de equilíbrio
x	fração molar na fase líquida
y	fração molar na fase vapor
I	interface

$$K_{eq,i,j} = K_{eq,i,j}(x_{i,j}^I, y_{i,j}^I, T_i^I, P_i^I)$$

sendo:

T	temperatura (K)
P	pressão total (atm)

Equações de Soma

$$SO_i^V = \sum_{j=1}^{nc} y_{i,j}^I - 1 = 0 \quad (IV.18)$$

$$SO_i^L = \sum_{j=1}^{nc} x_{i,j}^I - 1 = 0 \quad (IV.19)$$

onde:

SO	função do somatório das frações molares
nc	número de componentes

Todas estas equações são combinadas para gerar a equação de conservação para o estágio como um todo (BARROS, 1997).

IV.2 Variáveis e Funções da Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio

No modelo de estágios de equilíbrio o número de equações e variáveis são $(2nc+1)$ por estágio.

As funções são: $(BM_{i,1}....BM_{i,nc}, RE_{i,1}....RE_{i,nc}, BE_i)$

As variáveis são: $(FLL_{i,1}....FLL_{i,nc}, T_i, FWV_{i,1}....FWV_{i,nc})$

A modelagem de estágios de não equilíbrio é descrita por $(5nc+3)$ equações e variáveis por estágio (PESCARINI et al., 1996).

As funções são:

$(BM_{i,1}^L.... BM_{i,nc}^L, BM_{i,1}^V....BM_{i,nc}^V, BE_i^L, RE_{i,1}....RE_{i,nc}, RF_{i,1}^V....RF_{i,nc-1}^V, SO_i^V, RF_{i,1}^L....RF_{i,nc-1}^L, SO_i^L, BE_i^V, BE_i^I)$

As variáveis são:

$(FLL_{i,1}....FLL_{i,nc}, T_i^L, FWV_{i,j}....FWV_{i,nc}, N_{i,1}....N_{i,nc}, y_1^I....y_{nc}^I, x_1^I....x_{nc}^I, T_i^V, T_i^I)$

IV.3 Relações de Transporte

IV.3.1 Fluxo de transferência de massa

A transferência de massa é um processo direcionado pelo gradiente de concentração (mais precisamente, pelo gradiente do potencial químico). Portanto, o fluxo de transferência de massa na fase vapor depende da diferença de composição no seio da fase vapor $(y_{i,j})$ e na interface $(y_{i,j}^I)$. Para a fase líquida, o mesmo raciocínio é válido.

Muitos outros fatores, como temperatura, propriedades físicas dos componentes, geometria do prato, hidrodinâmica da coluna influenciam no cálculo do fluxo de transferência de massa. Geralmente, os efeitos dessas variáveis são incluídos no cálculo dos coeficientes de transferência de massa.

Para calcular o fluxo de transferência de massa ($N_{i,j}$) é necessária a integração das taxas pontuais ($n_{i,j}$). Para simplificar as integrações, assume-se que a interface é uniforme e considera-se o coeficiente de transferência de massa constante no prato i . As composições e temperatura no seio das fases são consideradas constantes no interior de cada prato e iguais às composições e temperatura de saída do prato. A integral é igual à taxa pontual média multiplicada pela área interfacial (a_i) (BARROS, 1997).

$$N_{i,j}^V = \int n_{i,j}^V \cdot da_i = n_{i,j}^V \cdot a_i \quad (IV.20)$$

$$N_{i,j}^L = \int n_{i,j}^L \cdot da_i = n_{i,j}^L \cdot a_i \quad (IV.21)$$

A transferência de massa em misturas multicomponentes na fase vapor é descrita pelas equações de Maxwell-Stefan baseadas no modelo do filme no estado estacionário unidimensional. A transferência de massa multicomponente na fase líquida é representada por uma solução analítica aproximada das equações generalizadas de Maxwell-Stefan (KRISHNAMURTHY e TAYLOR, 1985b):

$$n_{i,j}^V = \sum_{k=1}^{nc-1} K_{i,j,k}^V \cdot (y_{i,k} - y_{i,k}^I) + y_{i,j} \cdot n_i^T \quad (IV.22)$$

Para $j=1$ a $nc-1$

$$n_{i,j}^L = \sum_{k=1}^{nc-1} K_{i,j,k}^L \cdot (x_{i,k}^I - x_{i,k}) + x_{i,j} \cdot n_i^T \quad (IV.23)$$

Para $j=1$ a $nc-1$

$$n_i^T = \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \quad (IV.24)$$

Portanto,

$$n_{i,j}^V = n_{i,j}^V (K_{i,j,k}^V, y_{i,j}^I, y_{i,j}, n_{i,k}, k = 1 \quad \text{a} \quad nc)$$

$$n_{i,j}^L = n_{i,j}^L (K_{i,j,k}^L, x_{i,j}^I, x_{i,j}, n_{i,k}, k = 1 \quad \text{a} \quad nc)$$

onde:

n taxa de transferência de massa pontual ($\text{mol}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$)

k componente

K coeficiente de transferência de massa multicomponente ($\text{mol}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$)

Substituindo-se as equações (IV.22) e (IV.23) nas equações (IV.20) e (IV.21), respectivamente, tem-se:

$$N_{i,j}^V = \sum_{k=1}^{nc-1} K_{i,j,k}^V \cdot a_i \cdot (y_{i,k} - y_{i,k}^I) + y_{i,j} \cdot N_i^T \quad (IV.25)$$

Para $j=1$ a $nc-1$

$$N_{i,j}^L = \sum_{k=1}^{nc-1} K_{i,j,k}^L \cdot a_i \cdot (x_{i,k}^I - x_{i,k}) + x_{i,j} \cdot N_i^T \quad (IV.26)$$

Para $j=1$ a nc

$$N_i^T = \sum_{j=1}^{nc} N_{i,j} \quad (IV.27)$$

Portanto,

$$N_{i,j}^V = N_{i,j}^V \left(K_{i,j,k}^V \cdot a_i, y_{i,j}^I, y_{i,j}, T_i^V, T_i^I, N_{i,k}^V, k=1 \text{ a } nc \right)$$

$$N_{i,j}^L = N_{i,j}^L \left(K_{i,j,k}^L \cdot a_i, x_{i,j}^I, x_{i,j}, T_i^L, T_i^I, N_{i,k}^L, k=1 \text{ a } nc \right)$$

$K_{i,j,k}^V$ e $K_{i,j,k}^L$ são os coeficientes de transferência de massa multicomponente e a_i é a área interfacial para a transferência de massa e energia.

Como foi visto anteriormente, a transferência de massa multicomponente pode ser descrita pelos coeficientes de transferência de massa multicomponente e área interfacial, onde o conhecimento do projeto da coluna, do tipo de prato e das propriedades físicas do sistema é fundamental para a determinação desses valores. O coeficiente de transferência de massa e a área interfacial podem ser calculados separadamente através de correlações apropriadas ou pode-se combinar a área interfacial diretamente com os coeficientes de transferência de massa e calor, pois existem correlações que calculam o produto do coeficiente de transferência de massa pela área interfacial.

Coeficiente de Transferência de Massa Multicomponente na Fase Vapor

A equação (IV.25) para o cálculo do fluxo de transferência de massa multicomponente na fase vapor é escrita na forma matricial:

$$[N^V]_i = [K^V]_i \cdot a_i \cdot [y - y^l]_i + N_i^T \cdot [y]_i \quad (IV.28)$$

$[N^V]_i$ é a matriz dos fluxos mássicos na fase vapor, no prato i , com dimensão $(nc-1, nc-1)$.

$[K^V]_i$ é a matriz dos coeficientes de transferência de massa multicomponente na fase vapor, no prato i , com dimensão $(nc-1, nc-1)$.

$[y]_i$ e $[y-y^l]_i$ são as matrizes das frações com dimensões $(nc-1, 1)$.

Existem diversas maneiras de se determinar $[K^V]_i \cdot a_i$. Neste caso foi utilizado o método de KRISHNA e STANDART (1976) que leva em consideração os efeitos de interação implícitos dos fluxos:

$$[K^V]_i \cdot a_i = [G^B]_i^{-1} \cdot a_i \cdot [G^A]_i \cdot \{\exp [G^A]_i - [I]\}^{-1} \quad (IV.29)$$

$$[G^B]_i / a_i = [G]_i \quad \text{onde } m_{i,j} = y_{i,j} \quad (IV.30)$$

$$[G^A]_i = [G]_i \quad \text{onde } m_{i,j} = N_{i,j} \quad (IV.31)$$

$[G^A]_i$ e $[G^B]_i$ são definidos a partir da matriz geral $[G]$ formada pelos elementos:

$$G_{i,j,j} = \frac{m_{i,j}}{kb_{i,j,nc} \cdot a_i} + \sum_{k=1}^{nc} \frac{m_{i,k}}{kb_{i,j,k} \cdot a_i} \quad k \neq j \quad \text{e} \quad j=1 \text{ a } nc-1 \quad (IV.32)$$

Onde $kb_{i,j,k}$ são os coeficientes binários de transferência de massa.

$$G_{i,j,k} = -m_{i,j} \cdot \left(\frac{1}{kb_{i,j,k}^V \cdot a_i} - \frac{1}{kb_{i,j,k}^V \cdot a_j} \right) \quad k \neq j \quad \text{e} \quad j=1 \text{ a } nc-1 \quad (\text{IV.33})$$

Pelas equações (IV.32) e (IV.33) observa-se que para se calcular os coeficientes de transferência de massa multicomponente é necessário o conhecimento dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor e a área interfacial.

Coeficiente Binário de Transferência de Massa na Fase Vapor

Através do método do AIChE (1958) pode-se determinar o produto dos coeficientes binários de transferência de massa e a área interfacial como função das propriedades físicas e da geometria do prato. Para uma coluna de pratos:

$$kb_{i,j,k}^V \cdot a_i = \frac{(0,776 + 0,04567 \cdot HW - 0,2377 \cdot 10^{-1/2} \cdot F_i^F + 87,319 \cdot 10^{-6} \cdot L_i^F) \cdot F_i^V}{\left(\frac{10^{-2} \cdot \mu_i^{\text{mist},V}}{\rho_i^{\text{mist},V} \cdot DIF_{i,j,k}^V} \right)^{0,5}} \quad (\text{IV.34})$$

sendo:

- kb coeficiente binário de transferência de massa ($\text{mol}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$)
- L^F fluxo volumétrico do líquido por unidade de espaçamento médio (cm^2/s)

Onde F_i^F é o fator F calculado por:

$$F_i^F = \frac{F_i^V \cdot PM_i^{mist,V} \cdot \sqrt{\rho_i^{mist,V}}}{\rho^{mist,V} \cdot AREA} \quad (IV.35)$$

onde:

PM peso molecular (g/gmol)

ρ densidade (g/cm³)

mist mistura

$$L_i^F = \frac{F_i^L \cdot PM_i^{mist,L}}{\rho_i^{mist,L} \cdot EM} \quad (IV.36)$$

$PM_i^{mist,V}$ é calculado pela equação (IV.37):

$$PM_i^{mist,V} = \sum_{j=1}^{nc} y_{i,j} \cdot PM_j \quad (IV.37a)$$

$$PM_i^{mist,L} = \sum_{j=1}^{nc} x_{i,j} \cdot PM_j \quad (IV.37b)$$

onde HW é a altura da represa, EM é o espaçamento médio para o fluxo do líquido e AREA é a área de borbulhamento.

Estas correlações foram apresentadas através das seguintes equações (PESCARINI, 1996):

Equação usada no cálculo da área da seção transversal da coluna: $A = \frac{\pi \cdot d^2}{4}$

Altura da represa: $HW = 0,05d$

Distância percorrida pelo líquido na superfície do prato: $Z_L = 0,75d$

Espaçamento médio para o fluxo do líquido: $EM = 0,70d$

Área de borbulhamento: $AREA = 0,75 \cdot \frac{\pi \cdot d^2}{4}$

Nestes casos, “d” é o diâmetro do prato.

Coeficiente de Transferência de Massa Multicomponente na Fase Líquida

A equação que descreve o fluxo de transferência de massa multicomponente na fase líquida escrita na forma matricial é:

$$[N^L]_i = [K^L]_i \cdot a_i \cdot [x^l - x]_i + N_i^T \cdot [x]_i \quad (IV.38)$$

$[N^L]_i$ é a matriz dos fluxos mássicos na fase líquida, no prato i , com dimensão $(nc-1,1)$.

$[K^L]_i$ é a matriz dos coeficientes de transferência de massa multicomponente na fase líquida, no prato i , com dimensão $(nc-1,1)$.

$[x]_i$ e $[x^l - x]_i$ e são matrizes com dimensões $(nc-1,1)$.

Para o cálculo de $[K^L]_i \cdot a_i$ é utilizado o método proposto por KRISHNA e STANDART (1976):

$$[K^L]_i \cdot a_i = [G^B]^{-1} \cdot a_i \cdot [G^C] \cdot [G^D] \quad (IV.39)$$

$$[G^D]_i = [G^E] \cdot \{\exp[G^E]\} \cdot \{\exp[G^E] - [I]\}^{-1} \quad (IV.40)$$

$$[G^E] = [G^C]^{-1} \cdot [G^A] \quad (IV.41)$$

$$[G^B]_i / a_i = [G]_i \quad \text{onde } m_{i,j} = x_{i,j} \quad (IV.42)$$

$$[G^A]_i = [G]_i \quad \text{onde } m_{i,j} = N_{i,j} \quad (IV.43)$$

Os elementos $[G]_i$ são dados por:

$$G_{i,j,k} = \frac{m_{i,j}}{kb_{i,j,nc}^L \cdot a_i} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{nc} \frac{m_{i,k}}{kb_{i,j,k}^L \cdot a_i} \quad (IV.44)$$

$$k \neq j \quad \text{e} \quad j = 1 \text{ a } nc-1$$

$$G_{i,j,k} = -m_{i,j} \cdot \left(\frac{1}{kb_{i,j,k}^L \cdot a_i} - \frac{1}{kb_{i,j,nc}^L} \right) \quad (IV.45)$$

$k \neq j$ e $j = 1$ a $nc-1$, onde $kb_{i,j,k}$ são os coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida.

$[G^C]$ é a matriz dos fatores termodinâmicos com elementos dados por:

$$G_{i,j,k}^C = \frac{x_{i,j}}{x_{i,k}} \cdot \frac{\partial \ln \gamma_{i,j}}{\partial \ln x_{i,k}} \quad (IV.46)$$

$$j = 1 \text{ a } nc-1 \quad \text{e} \quad k = 1 \text{ a } nc-1$$

A derivada do coeficiente de atividade é determinada numericamente.

Similarmente à fase vapor, para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa multicomponente para a fase líquida, é necessário o conhecimento dos coeficientes binários de transferência de massa.

Coeficiente Binário de Transferência de Massa na Fase Líquida

Empregando-se o método do AIChE (1958) para colunas com pratos pode-se determinar os coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida a partir da equação (IV.47).

$$k_{b,i,j,k}^L \cdot a_i = \left(4,124 \cdot 10^4 \cdot DIF_{i,j,k}^L\right)^{0,5} \cdot \left(0,21313 \cdot 10^{-1/2} \cdot F_i^F + 0,15\right) \cdot t_{L,i} \cdot F_i^L \quad (IV.47)$$

Onde $DIF_{i,j,k}$ é a difusividade binária e F^L é o fluxo de líquido no prato.

O tempo de contato médio do líquido t_L é dado pela equação (IV.48):

$$t_L = 1,2002 \cdot HU_i \cdot \frac{Z_L}{L_i^F} \quad (IV.48)$$

Onde HU_i é o “holdup” do líquido no prato e é dado pela equação (IV.49):

$$HU_i = 0,0254 \cdot \left(1,65 + 7,403 \cdot HW + 80,478 \cdot L_i^F - 0,5328 \cdot F_i^F\right) \quad (IV.49)$$

IV.3.2 Fluxo de transferência de calor

Da mesma forma que no cálculo do fluxo de transferência de massa, o fluxo de transferência de energia (ε_i) é igual à integração das taxas pontuais (e_i):

$$\varepsilon_i^V = \int e_i^V \cdot da_i = e_i^V \cdot a_i \quad (\text{IV.50})$$

$$\varepsilon_i^L = \int e_i \cdot da_i = e_i^L \cdot a_i \quad (\text{IV.51})$$

A taxa pontual de fluxo de transferência de calor é constituída pelos fluxos condutivo e convectivo devido ao transporte de entalpia na interface (BARROS et al., 1996).

Fase Vapor

$$e_i^V = q_i^V + \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \cdot \bar{H}_{i,j}^V \quad (\text{IV.52})$$

sendo \bar{H} a entalpia parcial molar (J/kmol).

O fluxo condutivo (q_i^V) é dependente do gradiente de temperatura no fluido, definido pela equação (IV.53):

$$q_i^V = hc_i^V \cdot (T_i^V - T_i^I) \quad (\text{IV.53})$$

onde:

hc coeficiente de transferência de calor (J/cm².s.K)

Introduzindo as equações (IV.52) e (IV.53) na equação (IV.50):

$$\varepsilon_i^V = hc_i^V \cdot a_i \cdot (T_i^V - T_i^I) + \sum_{j=1}^{nc} N_{i,j} \cdot \bar{H}_{i,j}^V \quad (IV.54)$$

Na fase vapor é considerada a correção de Ackerman (β) (IV.56) para fluxos mássicos altos (SHERWOOD et al., 1975).

$$\varepsilon_i^V = hc_i^V \cdot a_i \cdot \left(\frac{\beta_i^V}{e^{\beta_i^V} - 1} \right) \cdot (T_i^V - T_i^I) + \sum_{j=1}^{nc} N_{i,j} \cdot \bar{H}_{i,j}^V \quad (IV.55)$$

$$\beta_i^V = \sum_{j=1}^{nc} \frac{N_{i,j} \cdot Cp_{i,j}^V}{hc_i^V \cdot a_i} \quad (IV.56)$$

onde:

C_p capacidade calorífica a pressão constante (J/kmol.K)

A consideração da constante de Ackerman é importante, uma vez que a presença de transferência de massa pode aumentar ou diminuir o fluxo de calor condutivo, dependendo da direção da transferência de massa (PESCARINI, 1996).

Fase Líquida

$$e_i^L = q_i^L + \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \cdot \bar{H}_{i,j}^L \quad (IV.57)$$

$$q_i^L = hc_i^L \cdot (T_i^I - T_i^L) \quad (IV.58)$$

Na fase líquida, a correção de Ackerman para fluxos mássicos altos é ignorada (KRISHNAMURTHY and TAYLOR, 1985b), pois é um valor próximo de 1 e, geralmente, a resistência à transferência de energia na fase líquida é muito menor que na fase vapor (PESCARINI, 1996). Introduzindo-se as equações (IV.57) e (IV.58) na equação (IV.51), tem-se:

$$\varepsilon_i^L = hc_i^L \cdot a_i \cdot (T_i^I - T_i^L) + \sum_{j=1}^{nc} N_{i,j} \cdot \bar{H}_{i,j}^L \quad (IV.59)$$

Portanto,

$$\varepsilon_i^L = \varepsilon_i^L \left(hc_i^L \cdot a_i, x_{i,j}, T_i^L, T_i^I, N_{i,k}, k = 1 \quad a \quad nc \right)$$

$$\varepsilon_i^V = \varepsilon_i^V \left(hc_i^V \cdot a_i, y_{i,j}, T_i^V, T_i^I, N_{i,k}, k = 1 \quad a \quad nc \right)$$

hc_i^V e hc_i^L são os coeficientes convectivos de transferência de calor no estágio i nas fases líquida e vapor obtidos mediante a analogia de Chilton-Colburn que relaciona os coeficientes binários médios de transferência de massa com o coeficiente de transferência de calor (BIRD et al., 1960):

$$hc_i^V = \left(kb_{i,j,k}^V \right)^{\text{médio}} \cdot Cp_i^{\text{mist},V} \cdot \left(Le_i^V \right)^{2/3} \quad (IV.60)$$

Introduzindo-se a área interfacial (a_i) na equação (IV.60), tem-se:

$$hc_i^V \cdot a_i = \left(kb_{i,j,k}^V \right)^{\text{médio}} \cdot C_{P_i}^{\text{mist},V} \cdot \left(Le_i^V \right)^{2/3} \quad (\text{IV.61})$$

Onde Le_i é o número de Lewis, determinado por:

$$Le_i^V = \frac{ct_i^{\text{mist},V} \cdot PM_i^{\text{mist},V}}{\rho_i^{\text{mist},V} \cdot C_{P_i}^{\text{mist},V} \cdot \left(DIF_{i,j,k}^V \right)^{\text{médio}}} \quad (\text{IV.62})$$

onde ct_i^{mist} é a condutividade térmica da mistura no estágio i e ρ_i^{mist} é a densidade da mistura no mesmo estágio.

$$\left(kb_{i,j,k}^V \cdot a_i \right)^{\text{médio}} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} kb_{i,j,k} \cdot a_i \cdot y_{i,j} \cdot y_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} y_{i,j} \cdot y_{i,k}} \quad (\text{IV.63})$$

onde $k \neq j$

$$\left(DIF_{i,j,k}^V \right)^{\text{médio}} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} DIF_{i,j,k} \cdot y_{i,j} \cdot y_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} y_{i,j} \cdot y_{i,k}} \quad (\text{IV.64})$$

onde $k \neq j$.

Coeficiente de Transferência de Energia na Fase Líquida

Na fase líquida, o cálculo do coeficiente de transferência de calor é feito utilizando a analogia da penetração, uma vez que esta é de grande aplicação para

a fase líquida em sistemas líquido/vapor (BIRD et al., 1960 e SHERWOOD et al., 1975).

$$hc_i^L = \left(kb_{i,j,k}^L \right)^{\text{médio}} \cdot Cp_i^{\text{mist,L}} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_i}{\left(DIF_{i,j,k}^L \right)^{\text{médio}}}} \quad (\text{IV.65})$$

Introduzindo a área interfacial, similarmente à fase vapor, tem-se:

$$hc_i^L \cdot a_i = \left(kb_{i,j,k}^L \cdot a_i \right)^{\text{médio}} \cdot Cp_i^{\text{mist,L}} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_i}{\left(DIF_{i,j,k}^L \right)^{\text{médio}}}} \quad (\text{IV.66})$$

onde α_i é a difusividade térmica definida como:

$$\alpha_i = \frac{ct_i^{\text{mist,L}} \cdot PM_i^{\text{mist,L}}}{\rho_i^{\text{mist,L}} \cdot Cp_i^{\text{mist,L}}} \quad (\text{IV.67})$$

onde ρ_i^{mist} é a densidade de mistura no estágio e ct_i^{mist} é a condutividade térmica da mistura no prato correspondente.

$$\left(kb_{i,j,k}^L \cdot a_i \right)^{\text{médio}} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} kb_{i,j,k}^L \cdot a_i \cdot x_{i,j} \cdot x_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} x_{i,j} \cdot x_{i,k}} \quad (\text{IV.68})$$

$$\left(DIF_{i,j,k}^L \right)^{\text{médio}} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} DIF_{i,j,k}^L \cdot x_{i,j} \cdot x_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} x_{i,j} \cdot x_{i,k}} \quad (\text{IV.69})$$

$PM_i^{\text{mist,L}}$ é calculado pela equação (IV.37b).

IV.4 Propriedades Físicas e Termodinâmicas

Conforme descrito no Capítulo II, o modelo de estágios de não equilíbrio requer mais dados quando comparado ao modelo de estágios de equilíbrio. Sendo assim, é necessário o conhecimento de todas as propriedades que descrevem a transferência de massa e calor ao longo do equipamento. O programa desenvolvido por BARROS (1997) inclui modelos para o cálculo das propriedades físicas e termodinâmicas, a citar:

- Densidade da fase vapor
 - Densidade do componente puro na fase vapor
 - Cálculo do fator de compressibilidade para o componente puro
 - Densidade da mistura na fase vapor
 - Cálculo do fator de compressibilidade da mistura
- Densidade da fase líquida
 - Densidade do componente puro na fase líquida
 - Densidade da mistura na fase líquida
- Viscosidade da fase vapor
 - Viscosidade do componente puro na fase vapor
 - Viscosidade da mistura na fase vapor

- Viscosidade na fase líquida
 - Viscosidade do componente puro na fase líquida
 - Viscosidade da mistura na fase líquida
- Difusividade na fase vapor
 - Difusividade na fase líquida
 - Difusividade à diluição infinita na fase líquida
 - Influência da composição na difusividade da fase líquida
- Capacidade calorífica da fase vapor
 - Capacidade calorífica do componente puro na fase vapor
 - Capacidade calorífica da mistura na fase vapor
- Capacidade calorífica da fase líquida
 - Capacidade calorífica do componente puro na fase líquida
 - Capacidade calorífica da mistura na fase líquida
- Condutividade térmica da fase vapor
 - Condutividade térmica do componente puro na fase vapor
 - Condutividade térmica da mistura na fase vapor
- Condutividade térmica da fase líquida
 - Condutividade térmica do componente puro na fase líquida
 - Condutividade térmica da mistura na fase líquida
- Constante de equilíbrio
- Pressão de vapor
- Coeficiente de fugacidade
- Coeficiente de atividade
- Entalpia da fase vapor

- Entalpia do componente puro na fase vapor
- Entalpia da mistura na fase vapor
- Entalpia da fase líquida
 - Entalpia do componente puro na fase líquida
 - Entalpia de vaporização
 - Entalpia da mistura na fase líquida
 - Entalpia excedente

As equações referentes a cada uma das propriedades físicas e termodinâmicas são encontradas em detalhes em PESCARINI (1996) e BARROS (1997).

IV.5 Solução das Equações do Modelo

As equações no estágio de equilíbrio podem ser resolvidas por dois métodos (PESCARINI, 1996):

- Método de convergência seqüencial: as equações são resolvidas em seqüência;
- Método de convergência simultânea: as equações são resolvidas simultaneamente.

Os métodos para resolver as equações do modelo de equilíbrio podem ser utilizados para resolver as equações do modelo de estágios de não equilíbrio. Como já mencionado, existem $(2n_c+1)$ equações no modelo de estágios de equilíbrio e $(5n_c+3)$ no modelo de estágios de não equilíbrio, porém, o método de solução é o mesmo. As equações são resolvidas simultaneamente utilizando o método de convergência de Newton-Raphson.

CONCLUSÃO

Neste capítulo foi descrita a modelagem de estágios de não equilíbrio desenvolvida, inicialmente, por KRISHNAMURTHY e TAYLOR (1985a). Importantes características do modelo são:

- o uso da teoria de Maxwell-Stefan para a descrição da transferência de massa na interface;
- o uso de aproximações adequadas para a descrição dos modelos de fluxo e a possibilidade de incorporação de reações químicas;
- as equações de conservação de massa e energia escritas para cada fase e resolvidas juntamente com as equações de transporte que descrevem os fenômenos de transferência na interface;
- a suposição do equilíbrio termodinâmico interfacial;
- os processos simultâneos de transferência de massa e de calor na interface, modelados pelos coeficientes de transferência;
- o uso das equações de cada fase, separadamente, para demonstrar a resistência à transferência de massa e energia oferecida pelas fases fluidas;
- o emprego das equações e dos métodos de solução largamente independentes dos métodos usados para prever os fluxos de massa e calor, bem como as propriedades físicas e termodinâmicas do sistema;
- a resolução do sistema de equações simultaneamente, usando o método de Newton ou método das diferenças finitas.

De acordo com a literatura, a modelagem de estágios de não equilíbrio oferece vantagens sobre o modelo de estágios de equilíbrio (o qual envolve a eficiência global e de prato) e na solução de problemas típicos de destilação e absorção. Pode, também, ser utilizada para a simulação de colunas existentes, pois não é necessário determinar o número de estágios de equilíbrio, a localização

da alimentação ou das correntes laterais, uma vez que representa o comportamento real do processo. De uma maneira geral, é especialmente útil nos seguintes tipos de processos:

- colunas empacotadas (incluindo recheios estruturados);
- sistemas fortemente não ideais (onde as eficiências são incertas e variam grandemente de estágio a estágio e de componente para componente);
- colunas com perfis que contém uma mudança rápida em uma pequena seção do equipamento (por exemplo, destilação azeotrópica ou absorção gasosa não isotérmica);
- colunas com múltiplas alimentações e/ou saídas laterais;
- qualquer coluna com eficiência desconhecida.

Pelo fato da modelagem de estágios de não equilíbrio requerer o conhecimento dos parâmetros de operação do equipamento (diâmetro da coluna, tipo de prato ou recheio, etc.), pode ser usada no diagnóstico de problemas de projeto e de operação e na identificação de parâmetros do projeto que podem ser alterados para aperfeiçoar o desempenho da coluna.

A modelagem de estágios de não equilíbrio nos dá um entendimento detalhado do que está acontecendo no interior de uma coluna, pois permite observar os efeitos de qualquer parâmetro do projeto, incluindo os efeitos da geometria do equipamento, sendo, portanto, uma importante extensão da análise clássica do modelo de estágios de equilíbrio, além de poder ser aplicada para sistemas multicomponentes.

No capítulo seguinte será feita uma ampla revisão relacionada aos coeficientes de transferência de massa e calor, seguida da descrição de algumas correlações empíricas até então desenvolvidas.

CAPÍTULO V

TRANSFERÊNCIA DE MASSA EM COLUNAS DE PRATO

O processo de transferência de massa em colunas de destilação é muito complexo. Para que haja uma transferência de massa efetiva entre as fases, o contato líquido/vapor deve ocorrer sob regime turbulento, uma vez que este aumenta a taxa de transferência de massa por unidade de área, pois ajuda a dispersar um fluido em outro e aumenta a área interfacial.

Para WALTER et al. (1941), num prato de destilação convencional, o contato entre as fases ocorre através do fluxo cruzado no qual o líquido escoar paralelamente ao prato, no percurso entre os vertedores de entrada e saída, enquanto o vapor o atravessa, sendo distribuído no prato através de perfurações, borbulhadores ou válvulas. A região de contato entre as duas fases é a camada constituída pelo líquido aerado. Na prática, a altura do líquido no prato é, em geral, pequena, quando comparada ao diâmetro da coluna e o líquido está tão agitado pelo borbulhamento do vapor que não existe um gradiente de concentração apreciável na direção vertical. Além disso, pelo fato do líquido estar bem misturado no prato, pode-se simplificar ainda mais a análise da transferência de massa.

O transporte de massa entre as fases, no caso de um prato perfurado, ocorre pela interação entre as bolhas do vapor formadas nos furos e o líquido circunvizinho, entre o líquido e o vapor misturados na massa aerada e entre o líquido borrifado no espaço entre pratos e o vapor ascendente (PERRY et al., 1973).

V.1 Transferência de Massa em Pratos

Considerando uma pequena seção de um prato de destilação (Figura V.1), pode-se dizer que há uma camada de líquido bem misturado, de concentração x , onde um vapor com concentração y_1 flui, deixando-o com uma concentração y_2 .

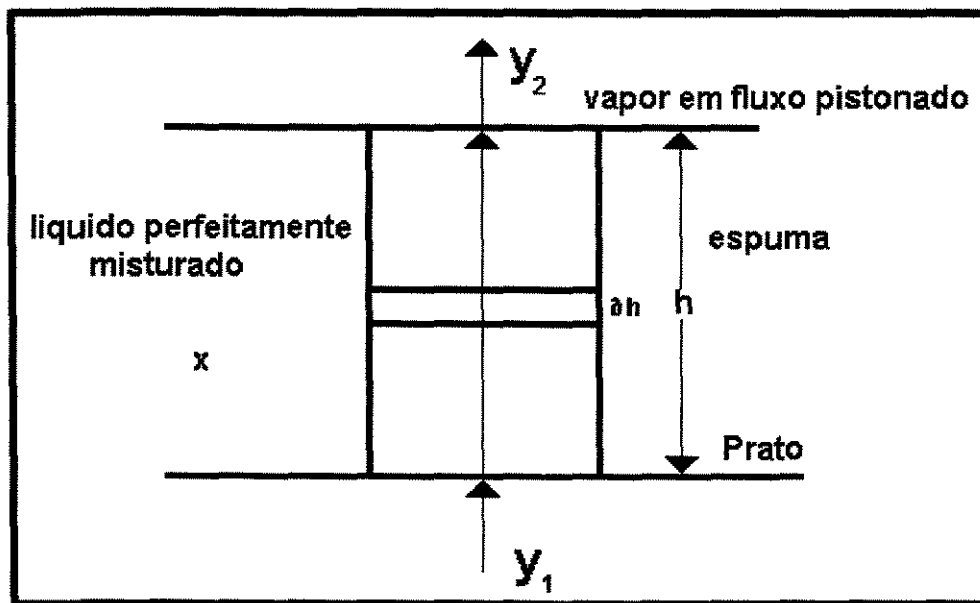


Figura V.1 – Modelo de transferência de massa em um prato

A camada de líquido e vapor resultante sobre o prato tem uma altura h (m) com uma área superficial para a transferência de a (m^2/m^3) de espuma. Assumindo que a seção do prato em consideração tem uma área superficial (a')

(m²) e que o fluxo de vapor (V) é kmol/h, a força motriz para a transferência de massa em qualquer ponto é $y - mx$ e a transferência de massa em um elemento diferencial de controle (δh) é:

$$a'V \frac{\partial y}{\partial h} = K_g a' (y - mx) \quad V \text{ em kmol/h} \quad (\text{V.1})$$

Portanto, a transferência de massa ao longo da camada de líquido e vapor em função da variação da concentração do vapor é dada por:

$$\int_{y_0}^y \frac{dy}{(y - mx)} = \frac{K_v \cdot a}{V} \cdot \int_0^h dh = \text{NUT} \quad (\text{V.2})$$

A equação (V.2) define o número de unidades de transferência (NUT) envolvido na transferência de massa. Integrando a equação (V.2):

$$-\ln \left(\frac{y - mx}{y_0 - mx} \right) = \frac{K_v a h}{V} = \text{NUT} \quad (\text{V.3})$$

ou

$$\left(\frac{y - mx}{y_0 - mx} \right) = e^{-\frac{K_v a h}{V}} \quad (\text{V.4})$$

Como a eficiência de prato no ponto (E_{OV}) é definida como a modificação real na concentração do vapor à medida que ele passa através do prato comparada com a mudança de concentração que atinge o equilíbrio, pode-se identificar na equação (V.4) o termo referente a eficiência de prato no ponto, isto é:

$$E_{OV} = \frac{y_0 - y}{y_0 - mx} \quad (V.5)$$

$$1 - E_{OV} = \frac{y_0 - mx - y_0 + y}{y_0 - mx} = \frac{y - mx}{y_0 - mx} \quad (V.6)$$

A equação (V.4) pode ser expressa em termos da eficiência de prato no ponto:

$$E_{OV} = 1 - e^{-\frac{K_{vah}}{V}} \quad (V.7)$$

V.2 Transferência de Massa entre Fases

Na maioria das operações de transferência de massa, duas fases são colocadas em contato de modo a permitir a transferência dos componentes constituintes. Em cada fase existe uma resistência associada ao movimento do soluto, a qual relaciona-se com o inverso do coeficiente de transferência de massa. Esse coeficiente bem como as diversas formas de expressá-los serão aqui discutidos.

Entre as duas fases fluidas existe a interface que, por sua vez, é governada pelo equilíbrio termodinâmico. O equilíbrio termodinâmico é fundamental no estudo da transferência de massa entre as fases, já que delimita as regiões de transporte.

A definição de transferência de massa está baseada em argumentos empíricos. A quantidade de massa transferida através da interface, dentro de uma

solução bem misturada, é proporcional à diferença de concentração e da área interfacial. Portanto,

$$\left[\begin{array}{c} \text{Quantidade} \\ \text{de Massa} \\ \text{Transferida} \end{array} \right] = \text{cte.} \cdot [\text{Área Interfacial}] \cdot \left[\begin{array}{c} \text{Diferença} \\ \text{de Concentração} \end{array} \right]$$

Onde a constante de proporcionalidade, representa o coeficiente global de transferência de massa.

Analisando-se o fluxo global de transferência de massa na fase vapor tem-se:

$$N_j^V = k_y \cdot (y_j^V - y_j^I) \quad (\text{V.8})$$

ou em função da pressão parcial:

$$N_j^V = k_V \cdot (P_j^V - P_j^I) \quad (\text{V.9})$$

com $k_V = k_y / P$, em que P é a pressão total do sistema.

Na fase líquida, o fluxo do componente j é descrito em função da fração molar deste ou em termos da sua concentração molar. Desta maneira:

$$N_j^L = k_x \cdot (x_j^I - x_j^L) \quad (\text{V.10})$$

ou em função da concentração do componente:

$$N_j^L = k_L \cdot (C_j^I - C_j^L) \quad (\text{V.11})$$

onde:

$$k_L = k_x \cdot \left(\frac{PM^L}{\rho^L} \right) \quad (\text{V.12})$$

sendo M_L e ρ_L a massa molecular e a densidade da solução líquida, respectivamente.

k_y , k_V , k_x e k_L são denominados coeficientes individuais de transferência de massa. O termo individual é devido ao relacionamento dos coeficientes com a resistência específica de uma fase ao transporte do componente. $1/k_y$ e $1/k_V$ referem-se às resistências individuais ao transporte do componente j na fase vapor, enquanto $1/k_x$ e $1/k_L$ associam-se às resistências individuais ao transporte do componente j na fase líquida.

V.3 Coeficientes Globais de Transferência de Massa

A determinação experimental dos coeficientes individuais de transferência de massa é bastante complexa. A dificuldade de se determinar as concentrações na interface e, conseqüentemente, os coeficientes individuais de transferência de

massa, permitiu o desenvolvimento dos coeficientes globais de transferência de massa baseados na força motriz total.

Considere, inicialmente, a fase vapor. O fluxo de transferência de massa é descrito por:

$$N_j^V = K_V \cdot (P_j^V - P_j^*) \quad (\text{V.13})$$

onde:

$P_{j,V}$	pressão parcial do componente j na fase vapor
P_j^*	pressão parcial do componente j em equilíbrio com a concentração do componente j na fase líquida
K_V	coeficiente de transferência de massa global baseado na força motriz da fase vapor

Para a fase líquida, o fluxo de transferência de massa global é definido como:

$$N_j^V = K_L \cdot (C_j^* - C_j^L) \quad (\text{V.14})$$

onde:

C_j^*	concentração do componente j na fase líquida em equilíbrio com a fase vapor
C_j^L	concentração do componente j na fase líquida

K_L coeficiente de transferência de massa global baseado na força motriz da fase líquida

Analisando o fluxo de transferência de massa somente na fase vapor tem-se:

$$N_j = k_V \cdot (P_j^V - P_j^I) \quad (V.15)$$

Igualando-se as equações (V.9) e (V.13), obtém-se:

$$N_j = k_V \cdot (P_j^V - P_j^I) = K_V \cdot (P_j^V - P_j^*) \quad (V.16)$$

ou

$$\frac{k_V}{K_V} = \frac{P_j^V - P_j^I}{P_j^V - P_j^*} = \frac{\Delta P_{Total}}{\Delta P_{Fase vapor}} = \frac{\Delta P_j^I}{\Delta P_j^V} \quad (V.17)$$

Rearranjando-se a equação (V.17), obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{\text{Resistência na Fase Vapor}}{\text{Resistência Total}} = \frac{1/k_V}{1/K_V} = \frac{\Delta P_j^I}{\Delta P_j^V} \quad (V.18)$$

Analogamente, para a fase líquida:

$$\frac{\text{Resistência na Fase Líquida}}{\text{Resistência Total}} = \frac{\frac{1}{k_L}}{\frac{1}{K_L}} = \frac{\Delta C_j^L}{\Delta C_j^T} \quad (\text{V.19})$$

Supondo-se válida uma relação de equilíbrio linear entre as fases:

$$P_j^I = m_{eq} \cdot C_j^I \quad (\text{V.20})$$

Para soluções diluídas, $m_{eq} = H$ (constante de Henry), tem-se:

$$P_j^V = m_{eq} \cdot C_j^* \quad (\text{V.21})$$

$$P_j^* = m_{eq} \cdot C_j^L \quad (\text{V.22})$$

$$P_j^I = m_{eq} \cdot C_j^I \quad (\text{V.23})$$

Rearranjando-se a equação (V.13) e somando-se e subtraindo-se $P_{A,I}$, obtém-se:

$$\frac{1}{K_V} = \frac{P_j^V - P_j^I}{N_j} + \frac{P_j^I - P_j^*}{N_j} \quad (\text{V.24})$$

Aplicando as equações (V.22) e (V.23) no terceiro termo, tem-se:

$$\frac{1}{K_V} = \frac{P_j^V - P_j^I}{N_j} + \frac{m_{eq} \cdot C_j^L}{N_j} \quad (\text{V.25})$$

ou

$$\frac{1}{K_V} = \frac{P_j^V - P_j^I}{N_j} + \frac{m_{eq} \cdot (C_j^I - C_j^L)}{N_j} \quad (V.26)$$

Substituindo (V.9) e (V.11) na equação (V.26), chega-se a seguinte expressão:

$$\frac{1}{K_V} = \frac{1}{k_V} + \frac{m_{eq}}{k_L} \quad (V.27)$$

Uma expressão similar para o coeficiente global de transferência de massa na fase líquida, K_L , pode ser obtida rearranjando-se a equação (V.14) e somando-se e subtraindo-se a concentração ($C_{A,I}$):

$$\frac{1}{K_L} = \frac{C_j^* - C_j^I}{N_{j,z}} + \frac{C_j^I - C_j^L}{N_{j,z}} \quad (V.28)$$

Aplicando-se (V.21) e (V.23) no segundo termo da equação (V.28), tem-se:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{P_j^V - P_j^I}{m_{eq} \cdot N_j} + \frac{C_j^I - C_j^L}{N_j} \quad (V.29)$$

Substituindo-se (V.9) e (V.11) na equação (V.29), tem-se:

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{m_{eq} \cdot k_V} + \frac{1}{k_L} \quad (V.30)$$

Observando-se as equações (V.27) e (V.30), conclui-se que:

- para um sistema envolvendo um vapor altamente solúvel na fase líquida, a constante m_{eq} é muito pequena. Assim, fazendo $m_{eq} \rightarrow 0$ na equação (V.27), verifica-se que:

$$\frac{1}{K_V} \approx \frac{1}{k_V}$$

Neste caso, diz-se que a resistência da fase vapor controla o processo de transferência de massa.

- para um sistema envolvendo um vapor pouco solúvel na fase líquida, a constante m_{eq} é muito grande, de modo que ao se substituir-se $\frac{1}{m} \rightarrow 0$ na equação (V.30), tem-se:

$$\frac{1}{K_L} \approx \frac{1}{k_L}$$

Aqui, a resistência da fase líquida controla o processo de transferência de massa.

Para casos simples ou idealizados, os coeficientes de transferência de massa podem ser obtidos a partir de teorias simples; em outros casos, podem ser obtidos experimentalmente e são, então, correlacionados através de inúmeras correlações empíricas e semi-empíricas.

V.4 Teoria do Filme

A teoria mais simples, aplicada à transferência de massa interfacial, foi sugerida por Nernst em 1904. Esta teoria considera que toda a transferência de massa está concentrada numa região (filme) denominada camada limite, onde sua espessura é representada por δ e o transporte é por difusão molecular. Tal modelo está baseado na observação de que a concentração do soluto transferido modifica-se com maior intensidade nas vizinhanças da interface e é relativamente uniforme fora da interface. Para um fluido agitado e que escoar próximo à interface, a suposição é que toda a mudança de concentração ocorre acima de uma região fina imediatamente adjacente à interface. Esta região é chamada filme e é tão fina que o estado estacionário é imediatamente estabelecido.

A partir da teoria do filme, é possível obter a relação entre o coeficiente de transferência de massa e a difusividade. Através da análise da difusão no filme estagnado obtém-se a seguinte relação:

$$k_c = \frac{D_{j,k} \cdot P}{\rho_k \cdot \ln \delta} \quad (\text{V.31})$$

onde:

k_c coeficiente convectivo de transferência de massa [$L \cdot T^{-1}$]

$D_{j,k}$ coeficiente de difusão do componente j no componente k [$L^2 \cdot T^{-1}$]

p_k	pressão parcial da espécie k [F.L ⁻²]
$\ln \delta$	média logarítmica da espessura da interface [L]

Analisando a contradifusão equimolecular, a relação entre o coeficiente convectivo de transferência de massa e a difusividade é definida por:

$$k_c = \frac{D_{j,k}}{\delta} \quad (\text{V.32})$$

V.5 Teoria da Penetração e da Superfície Renovada

A teoria da penetração surgiu devido à deficiência da teoria do filme em explicar a transferência de massa entre as fases, principalmente quando envolve a interface líquido/vapor. A diferença básica entre as teorias do filme e da penetração é que a primeira considera um filme estacionário, regido pelo transporte do soluto em regime permanente. Já a segunda admite que o filme é constituído por aglomerados de matéria e o transporte do soluto ocorre em regime transiente. Admite-se a turbulência da solução líquida na teoria da penetração. O movimento dos turbilhões estende-se por toda a fase (desde o interior da fase até a interface vapor). Devido às suas características, tais turbilhões carregam porções de matéria e, portanto, do soluto a partir do interior da fase fluida até a interface, cuja concentração está em equilíbrio com aquela da fase vapor. Os aglomerados de matéria, ao atingirem a interface, permanecem por um determinado tempo de exposição e depois retornam ao seio da fase líquida, sendo substituídos por novas porções ou aglomerados de matéria oriundos da fase líquida, os quais permanecem junto à interface. No tempo em que os aglomerados de matéria ficam na interface, a difusão do soluto contido nestes aglomerados para a interface ocorre em regime transiente, sendo descrita de acordo com o modelo da difusão no líquido descendente.

A teoria da penetração foi retomada por Danckerts em 1951, que propôs a teoria da renovação da superfície, que supõe que os aglomerados de matéria apresentam distribuição do tempo de exposição ao invés de ser o mesmo para todos estes aglomerados.

Segundo a teoria da penetração, o componente que se difunde penetra somente uma pequena distância na fase de interesse, pois rapidamente desaparece ou devido à reação química ou devido ao tempo relativamente curto de contato. Então, não se atinge o estado estacionário. O fluxo na interface líquido/vapor é definido por:

$$N_j^l = \sqrt{\frac{D_{j,k}}{\pi \cdot t_{\text{exp}}}} \cdot (C_{j,s} - C_{j,\infty}) \quad (\text{V.33})$$

E o fluxo convectivo por:

$$N_j = k_c \cdot (C_{j,s} - C_{j,\infty}) \quad (\text{V.34})$$

Comparando-se as equações (V.33) e (V.34), obtém-se:

$$k_c = \sqrt{\frac{D_{j,k}}{\pi \cdot t_{\text{exp}}}} \quad (\text{V.35})$$

O coeficiente convectivo médio de transferência de massa é obtido em virtude do tempo médio de exposição dos aglomerados de matéria na interface, através da equação (V.36):

$$k_m = \frac{1}{t_{\text{exp}}} \cdot \left(\frac{D_{j,k}}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^{t_{\text{exp}}} t^{-1/2} dt \quad (\text{V.36})$$

Substituindo-se a equação (V.35) em (V.36) e procedendo a integração obtém-se:

$$k_m = \sqrt{\frac{4 \cdot D_{j,k}}{\pi \cdot t_{\text{exp}}}} \quad (\text{V.37})$$

A literatura apresenta uma série de correlações para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa e calor. A seguir será descrita uma revisão baseada nos trabalhos experimentais que objetivaram a determinação deste parâmetro.

V.6 Correlações para o Cálculo dos Coeficientes de Transferência de Massa e Calor

Geralmente, a transferência de massa é expressa como produto dos coeficientes de transferência, da área interfacial e da força motriz. No entanto, a avaliação separada dos coeficientes de transferência de massa e da área interfacial é desejável, uma vez que as propriedades do sistema e as condições operacionais têm diferentes efeitos sobre estas variáveis. Por exemplo, os coeficientes de transferência são influenciados pela difusividade e a tensão superficial influencia na formação da área interfacial.

Métodos experimentais para a determinação dos coeficientes de transferência de massa e da área interfacial foram descritos por DANCKWERTS (1970). Usando a resistência da fase vapor ou da fase líquida como controladora do sistema, os coeficientes de transferência de massa são encontrados. SHARMA e GUPTA (1967) avaliaram experimentalmente a área interfacial e os coeficientes de transferência de massa para o sistema ar/água em um prato perfurado com 0,1 metro de diâmetro. Os autores encontraram para os coeficientes de transferência de massa, valores de aproximadamente 0,06 m/s para fase vapor e $3,0 \times 10^{-4}$ m/s para a fase líquida.

O método acima, embora adequado para sistemas aquosos, praticamente não é aplicável para sistemas constituídos por hidrocarbonetos devido à dificuldade de se encontrar reagentes químicos adequados. A alternativa, portanto, é desenvolver relações teóricas para os coeficientes de transferência de massa nas fases líquida e vapor; a complexidade das fases do sistema torna inadequada a análise minuciosa. A solução prática é avaliar os coeficientes de transferência de massa a partir de correlações bem conhecidas, tais como o modelo da penetração para a transferência de massa dentro e fora das bolhas. Aplicando equações apropriadas para as condições de velocidade e tamanhos

estimados de bolhas, os autores determinaram para a fase vapor uma expressão para o coeficiente de transferência de massa inversamente proporcional à densidade do vapor, conforme a equação (V.38):

$$k_V = \frac{0,13}{\rho^V} - \frac{0,065}{(\rho^V)^2} \quad (V.38)$$

A aplicação da equação (V.38) só é possível na faixa de densidade de 1,0 a 80 (kg/m³). O uso da equação (V.38) para o ar como fase vapor, permitiu o cálculo do coeficiente de transferência de massa na fase vapor, cujos valores obtidos foram similares aos valores determinados por SHARMA e GUPTA (1967). Conhecida a resistência na fase líquida, o coeficiente de transferência de massa na fase líquida pode ser determinado a partir da equação (V.39):

$$k_L = \left(\frac{1}{LPR} - 1 \right) \cdot m_{dist} \cdot k_V \quad (V.39)$$

onde:

k_L	coeficiente de transferência de massa na fase vapor (m/s)
k_V	coeficiente de transferência de massa na fase líquida (m/s)
LPR	fração da resistência na fase líquida
m	coeficiente de distribuição, expresso em concentração/volume

$$LPR = \frac{m_{dist}}{\left(\frac{k_L}{k_V} \right) + m_{dist}} = \frac{S_{strip}}{(NTU)_L / (NTU)_V + S_{strip}} \quad (V.40)$$

onde:

$(NTU)_L$ número de unidades de transferência da fase líquida

$(NTU)_V$ número de unidades de transferência da fase vapor

S fator “stripping”

Valores de $(NTU)_L$ e $(NTU)_V$ podem ser obtidos a partir de eficiências no ponto:

$$\frac{1}{(NTU)_{OV}} = \frac{1}{(NTU)_V} + \frac{S_{strip}}{(NTU)_L} \quad (V.41)$$

com:

$$\frac{1}{(NTU)_{OV}} = -\ln(1 - E_{OV}) \quad (V.42)$$

onde:

$(NTU)_{OV}$ número de unidades de transferência global na fase vapor

E_{OV} eficiência de ponto da fase vapor

Aplicando estas relações, os autores encontraram a seguinte expressão:

$$k_L = 0,024 \cdot D_L^{0,25} \quad (V.43)$$

ou

$$k_L = \frac{2,6 \cdot 10^{-5}}{(\mu_L)^{0,25}} \quad (V.44)$$

onde:

D_L difusividade líquida (m^2/s)

μ_L viscosidade líquida ($N.s/m^2$)

Utilizando estas equações para o sistema ar/água com CO_2 como soluto, os autores calcularam o coeficiente de transferência de massa ($k_L = 1,5 \times 10^{-4}$ m/s). Embora este difere consideravelmente dos valores de SHARMA e GUPTA (1967) ($k_L \approx 3,0 \times 10^{-4}$ m/s), o valor calculado situa-se na mesma ordem de magnitude.

No trabalho desenvolvido por NEUBURG et al. (1994), os autores utilizaram pratos perfurados de pequeno diâmetro, onde pode ser assumido que a eficiência do prato é igual à eficiência de ponto. O modelo de NEUBURG e CHUANG (1982), que requer medidas experimentais da planta piloto para ajustar um parâmetro do modelo em termos das condições de operação, foi usado para prever a eficiência de ponto em cada prato. O modelo assume que a dispersão sobre o prato é líquido contínuo e o tamanho das bolhas pode ser representado por um diâmetro médio da bolha (d_B).

A área interfacial em uma dispersão de bolhas esféricas foi definida por:

$$a = 6 \cdot \frac{(1 - \varepsilon_L)}{d_B} \quad (V.45)$$

onde:

a	área interfacial específica (m^{-1})
ε_L	fração volumétrica do líquido na dispersão
d_B	diâmetro equivalente da bolha (m)

Assumindo que os coeficientes de transferência de massa e calor são bem representados pela teoria da penetração e/ou pela teoria da superfície renovada, o coeficiente de transferência de massa no filme líquido pode ser definido como:

$$k_L = 2 \left[\frac{D_L w_G}{\pi(1-\varepsilon_L)d_B} \right]^{1/2} \quad (V.46)$$

onde:

k_L	coeficiente de transferência de massa na fase líquida (m/s)
D_L	difusividade na fase líquida (m^2/s)
w_G	velocidade superficial do vapor (m/s)

O produto do coeficiente de transferência de massa na fase líquida e a área interfacial é calculado através da equação (V.47) baseado nas definições (V.45) e (V.46):

$$k_L \cdot a = 12 \cdot \left[\frac{D_L \cdot w_G \cdot (1-\varepsilon_L)}{\pi \cdot (d_B)^3} \right]^{1/2} \quad (V.47)$$

Assumindo-se que a superfície renovada ou o tempo de exposição do vapor e do líquido na interface são os mesmos, o coeficiente de transferência de massa na fase vapor passa a ser definido como:

$$k_{VaP} = k_L a \sqrt{\frac{D_V}{D_L}} \cdot \left(\frac{\rho^V}{PM^V} \right) \quad (V.48)$$

onde:

k_V	coeficiente de transferência de massa na fase vapor (m/s)
k_{VaP}	coeficiente de transferência de massa combinado na fase vapor (mol/m ³ .s)
$k_L a$	coeficiente de transferência de massa combinado na fase líquida (mol/m ³ .s)
D_V	difusividade na fase vapor (m ² /s)
D_L	difusividade na fase líquida (m ² /s)
ρ_V	densidade da fase vapor (kg/m ³)
M_V	peso molecular da mistura na fase vapor (g/gmol)

Empregando-se as equações (V.47) e (V.48) com a teoria dos dois filmes, o coeficiente de transferência de massa global combinado para a fase vapor é:

$$\frac{1}{K_{VaP}} = \frac{1}{k_{VaP}} + \frac{m_{eq} \cdot PM^L}{k_L a \rho^L} \quad (V.49)$$

onde:

K_{VaP}	coeficiente de transferência de massa global combinado para a fase vapor ($\text{mol/m}^3 \cdot \text{s}$)
m	inclinação da curva de equilíbrio
M_L	peso molecular da mistura líquida (g/gmol)

A eficiência de ponto resulta em:

$$E_{OV} = 1 - \exp\left(-\frac{K_{VaP} h_s}{G_s}\right) \quad (\text{V.50})$$

onde:

E_{OV}	eficiência de Murphree no ponto
h_s	altura da espuma sobre o prato (m)
G_s	fluxo molar superficial do vapor (moles/s.m^2)

Para a mistura completa do líquido sobre o prato, a eficiência de prato iguala a eficiência de ponto:

$$E_{MV} = E_{OV} \quad (\text{V.51})$$

Em 1995, YOUNG-STEWART desenvolveram, baseados no modelo de transferência de massa e calor em um prato perfurado, uma nova correlação para a função hidrodinâmica (a_{00}), simplificando, desta forma, a correlação proposta

em 1992. A função hidrodinâmica definida em 1992 (YOUNG-STEWART, 1992) era:

$$a_{00} = (0,277 \pm 0,0112) \left(\frac{\rho^V \langle v_G \rangle HW}{\mu^L} \right)^{0,648 \pm 0,075} \cdot \left(\frac{A_{act}^2}{A_{open}^2} - 1 \right)^{0,344 \pm 0,138} \cdot \left(\frac{\rho^L \mu^V}{\rho^V \mu^L} \right)^{0,412 \pm 0,079} \quad (V.52)$$

A relação simplificada desenvolvida pelos autores está presente na equação (V.53):

$$a_{00} = (0,2753 \pm 0,0097) \left(\frac{\rho^V V_o HW}{\mu^L} \right)^{0,420 \pm 0,046} \cdot \left(\frac{\mu^V \rho^L}{\mu^L \rho^V} \right)^{0,420 \pm 0,046} \quad (V.53)$$

onde:

a_{00}	função hidrodinâmica
A_{act}	área ativa do prato (m^2)
A_{open}	área aberta do prato (m^2)
h_W	altura do vertedor de saída (m)
$\langle v_G \rangle$	velocidade do vapor baseada na área total do prato (m/s)
V_o	velocidade do vapor baseada na área aberta do prato (m/s)
μ	viscosidade (kg/m/s)
ρ	densidade (kg/m^3)

Segundo os autores, este modelo é preferido, uma vez que melhor ajusta os dados experimentais com menos parâmetros.

Os coeficientes de transferência de massa e calor em um sistema binário para um prato perfurado são calculados a partir da equação (V.53) e as relações descritas abaixo:

$$k_A^L = c^L \cdot D_{L,j,k}^{1/2} \cdot a_{00} \cdot \sqrt{V_o / HW} \quad (V.54)$$

$$k_B^V = c^V \cdot D_{V,j,k}^{1/2} \cdot a_{00} \cdot \sqrt{V_o / HW} \quad (V.55)$$

$$h_V = \rho^V \cdot \hat{C}_p^V \cdot (\alpha^V)^{1/2} \cdot a_{00} \cdot \sqrt{V_o / HW} \quad (V.56)$$

$$h_L = \rho^L \cdot \hat{C}_p^L \cdot (\alpha^L)^{1/2} \cdot a_{00} \cdot \sqrt{V_o / HW} \quad (V.57)$$

onde:

k_A e k_B	coeficientes binários de transferência de massa baseados na área total do prato ($\text{kmol} / \text{m}^2 / \text{s}$)
h_V e h_L	coeficientes de transferência de calor baseados na área total do prato ($\text{kmol} / \text{m}^2 / \text{s}$)
c	concentração total (kmol / m^3)
D	difusividade binária (m^2/s)
C_p	capacidade calorífica a pressão constante ($\text{J} / \text{kg} / \text{K}$)

α difusividade térmica (m^2/s)

As relações apresentadas nas equações (V.54) a (V.57) foram preditas a partir da teoria da camada limite da interface móvel com pequenas taxas globais de transferência de massa. As equações (V.53) a (V.57) resumem os efeitos das principais variáveis sobre os coeficientes de transferência de massa e calor para cada fase em condições de fluxo em que os efeitos de arraste ou de gotejamento de líquido no prato não ocorrem; o efeito Marangoni é considerado. A função hidrodinâmica (a_{00}) denota o principal coeficiente obtido em uma expansão dos números de Nusselt ou Sherwood dada por STEWART (1987).

Em 1988, SPAGNOLO et al. utilizaram a teoria da penetração de HIGBIE (1935) para as fases líquida e vapor e a analogia de CHILTON e COLBURN (1934) para expressar os coeficientes de transferência de calor em termos dos coeficientes de transferência de massa correspondentes:

$$h_V = \rho^V \cdot \overline{Cp}_V \cdot k_V \cdot \sqrt{Le^V} \quad (\text{V.58})$$

$$h_L = \rho^L \cdot \overline{Cp}_L \cdot k_L \cdot \sqrt{Le^L} \quad (\text{V.59})$$

onde:

ρ_V	densidade molar do vapor (mol/m^3)
ρ_L	densidade molar do líquido (mol/m^3)
Cp_L	capacidade calorífica média do líquido ($\text{J}/\text{mol.K}$)
Cp_V	capacidade calorífica média do vapor ($\text{J}/\text{mol.K}$)
k_L	coeficiente de transferência de massa na fase líquida ($\text{J}/(\text{m}^2.\text{s.K})$)

k_V	coeficiente de transferência de massa na fase vapor ($J/(m^2.s.K)$)
Le_L	número de Lewis para a fase líquida
Le_V	número de Lewis para a fase vapor

Onde Le^V e Le^L são os números de Lewis para a fase vapor e líquida, respectivamente, definidos como:

$$Le^V = \frac{\kappa_V}{\rho^V \cdot D_V \cdot \overline{Cp}_V} \quad (V.60)$$

$$Le^L = \frac{\kappa_L}{\rho^L \cdot D_L \cdot \overline{Cp}_L} \quad (V.61)$$

onde:

κ_V	condutividade térmica na fase vapor ($J/(m.s.K)$)
κ_L	condutividade térmica na fase líquida ($J/(m.s.K)$)
D_V	coeficiente de difusão na fase gasosa (m^2/s)
D_L	coeficiente de difusão na fase líquida (m^2/s)

Os coeficientes de transferência de massa para a fase vapor e para a fase líquida e a área interfacial para a transferência de massa foram definidos por NEUBURG e CHUANG em 1982 como:

$$k_L = \sqrt{\frac{4D_L v_V}{\pi d_B (1 - \varepsilon_L)}} \quad (V.62)$$

$$k_V = \sqrt{\frac{D_V}{D_L}} \quad (\text{V.63})$$

$$a_m = \frac{6 \cdot (1 - \rho_m)}{d_B} \quad (\text{V.64})$$

onde:

v_V velocidade superficial do vapor (m/s)

d_B diâmetro equivalente médio de Sauter para a bolha (m)

ε_L densidade média da espuma sobre o prato

$$U = \frac{h_V \cdot h_L}{h_L + h_V} \quad (\text{V.65})$$

onde:

U coeficiente global de transferência de calor ($\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$)

h_V coeficiente de transferência de calor na fase vapor ($\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$)

h_L coeficiente de transferência de calor na fase líquida ($\text{J}/(\text{m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K})$)

Combinando as equações (V.58), (V.59), (V.62), (V.63), (V.64) e (V.65), determina-se o coeficiente de transferência de calor combinado na fase líquida ($h_L a_h$) e o coeficiente de transferência de calor global combinado ($U a_h$) em termos do diâmetro médio equivalente da bolha e a razão entre a área interfacial para a transferência de massa e calor:

$$h_L a_h = 12 \cdot \rho^L \cdot \overline{Cp}_L \cdot \frac{a_h}{a_m} \cdot \sqrt{\frac{D_L \cdot v_V \cdot (1 - \rho_m) \cdot Le^L}{d_B^3}} \quad (V.66)$$

$$Ua_h = \frac{h_L a_h}{1 + \frac{\rho^L}{\rho^V} \cdot \frac{\overline{Cp}_L}{\overline{Cp}_V} \cdot \sqrt{\frac{D_L \cdot Le^L}{D_L \cdot Le^V}}} \quad (V.67)$$

Neste estudo, as áreas interfaciais de transferência de massa e calor foram arbitrariamente estabelecidas como sendo iguais (isto é, $\frac{a_h}{a_m} = 1$). Nos processos reais, as áreas de transferência de massa e de transferência de calor são diferentes, pois a transferência de calor entre as fases líquida e vapor não ocorre somente através do contato direto entre as fases, como acontece na transferência de massa. Assim, o diâmetro da bolha, calculado a partir de dados experimentais para a transferência de calor, é menor que aquele calculado a partir de experimentos para a transferência de massa (NEUBURG e CHUANG, 1982). No entanto, a magnitude do diâmetro da bolha não é importante para prever a eficiência da transferência de calor no prato.

V.7 Transferência Simultânea de Massa e Calor

Historicamente, a destilação foi estudada como um processo puramente de transferência de massa, onde a difusão ocorre através da interface líquido/vapor. No início da década de 60, os aspectos da transferência de calor foram considerados juntamente com a transferência de massa; entretanto, o efeito da transferência de calor foi considerado somente como uma fonte secundária e independente da transferência de massa. Com o passar dos anos, sentiu-se a necessidade de se analisar a destilação como um processo simultâneo de massa e calor para levar em conta as interações entre o transporte de calor e massa. Um

levantamento da literatura mostra que os primeiros estudos sobre os efeitos da transferência de calor estavam baseados na idéia de que a transferência difusional de massa deveria ser acrescida com a contribuição térmica na modelagem do processo de destilação. As principais características foram:

- assumir um mecanismo de acordo com o qual o líquido evaporaria devido ao excesso de transferência de calor para mantê-lo saturado;
- considerar isto como um mecanismo independente da difusão através das fases.

Porém, as várias equações desenvolvidas foram severamente limitadas pela suposição da aditividade linear e não poderiam levar em conta as interações entre a transferência de massa e calor. Para examinar os efeitos do fluxo de calor sobre a transferência de massa, RUCKENSTEIN (1970), citado por KAYIHAN et al. (1975a), resolveu as equações de transferência na fase líquida sem utilizar a teoria do filme. Este foi um tratamento simultâneo de transferência de calor e massa, mas limitado à fase líquida. O tratamento microscópico do processo previu vários graus de superaquecimento e evaporação na fase líquida. Mais tarde, DUTKAI e RUCKENSTEIN (1971), citado por KAYIHAN et al. (1975a), abandonaram a idéia de destilação térmica e modelaram uma coluna de recheios usando somente o coeficiente global de transferência de massa levando em conta a distribuição radial do fluxo de líquido e a variação da área interfacial. No trabalho desenvolvido por KAYIHAN et al. (1975a, b), os autores explicaram a interação entre a transferência de massa e calor desenvolvendo uma série de relações teóricas que satisfaziam simultaneamente os balanços de massa e calor. Eles provaram, também, que a fase líquida em uma coluna de destilação estaria saturada se, e somente se, o coeficiente de transferência de massa na fase líquida fosse muito grande.

CONCLUSÃO

Neste capítulo foi possível descrever o modelo de transferência de massa em colunas de pratos e abordar os diferentes modelos e teorias para a determinação dos coeficientes de transferência de massa e calor. Notou-se um avanço progressivo nos diferentes métodos, baseados em diferentes suposições e simplificações.

No que diz respeito às correlações empíricas, pode-se afirmar que inúmeras delas foram desenvolvidas. Entretanto, sua aplicação é restrita a determinadas condições de operação e sistemas. Além disto, ficou evidente que algumas correlações, tentando se aproximar ao máximo da realidade, apresentam variáveis de difícil obtenção em colunas de destilação a nível experimental. Pode-se citar:

- o tempo de exposição de aglomerados de matéria na interface líquido/vapor (equação V.36);
- o diâmetro médio das bolhas de vapor e a fração volumétrica do líquido na dispersão (equação V.45);
- a densidade média da espuma sobre o prato (equação V.62);
- as áreas interfaciais de transferência de massa e calor (equação V.66).

Foi abordada, também, a questão da simultaneidade da transferência de massa e calor, assunto de fundamental importância, uma vez que, com o advento das modelagens microscópicas e moleculares dos processos, torna-se necessário o conhecimento real dos processos de transferência de massa e calor. Entretanto, a dificuldade em se determinar experimentalmente tais parâmetros, leva a certas simplificações durante a análise dos processos de transferência de massa e calor.

CAPÍTULO VI

CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE MURPHREE E DE O'CONNELL

Este capítulo tem como principal objetivo a descrição completa de todas as etapas envolvidas no cálculo da eficiência de Murphree e de O'Connell ao longo da coluna de destilação. Os resultados obtidos utilizando os dados experimentais são apresentados no Capítulo VIII.

VI.1 Método para o Cálculo da Eficiência de Murphree

VI.1.1 Conversão das frações mássicas em frações molares

Uma vez conhecidas as concentrações em cada ponto ao longo da coluna de destilação, deve-se, em seguida, transformar as frações mássicas (\tilde{x}_j) em frações molares (x_j), a partir da equação (VI.1):

$$x_j = \frac{\tilde{x}_j / PM_j}{\sum_{j=1}^{nc} (\tilde{x}_j / PM_j)} \quad (\text{VI.1})$$

onde:

\tilde{x}_j fração mássica do componente j na fase líquida

x_j fração molar do componente j na fase líquida

PM_j massa molecular do componente j (g/mol)

Os pesos moleculares adotados (PERRY e CHILTON, 1973) foram:

Etanol (C_2H_6O): 46,07 g/mol

Água (H_2O): 18,016 g/mol

VI.1.2 Operação em refluxo total

Considere-se a Figura VI.1, representando as correntes de líquido/vapor de um estágio arbitrário.

Utilizam-se as seguintes considerações:

- a coluna é adiabática;
- a mistura das fases é perfeita em cada estágio;
- o condensador é total.

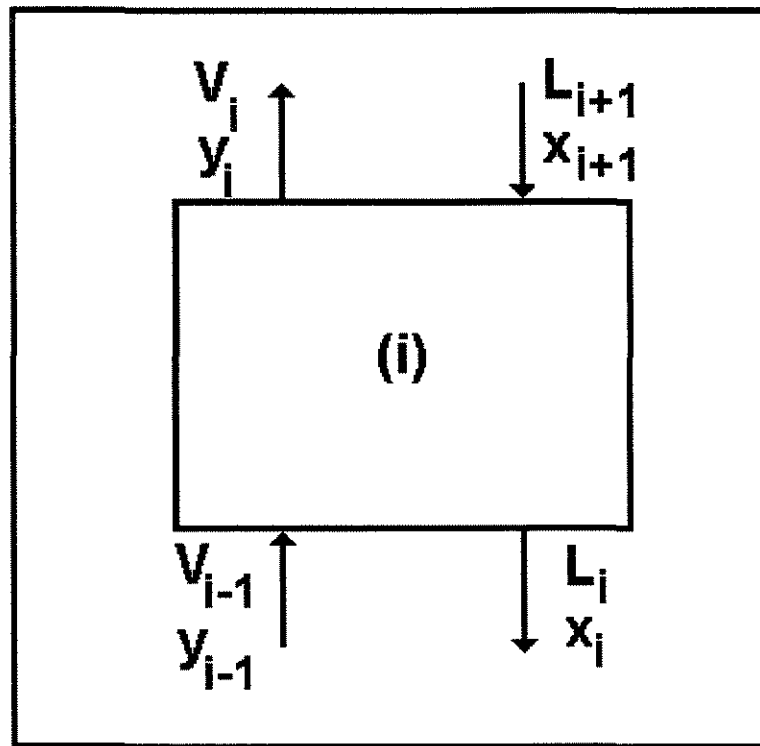


Figura VI.1 – Representação de um estágio

Balço de Massa Global Aplicado ao Estágio (i):

$$V_{(i-1)} + L_{(i+1)} = V_{(i)} + L_{(i)} \quad (\text{VI.2})$$

Na condição de refluxo total e considerando-se (i) como o prato de topo, sabe-se que:

$$V_{(i)} = L_{(i+1)} \quad (\text{VI.3})$$

Aplicando-se (VI.3) em (VI.2), tem-se:

$$V_{(i-1)} = L_{(i)} \quad (\text{VI.4})$$

Balanço de Massa Aplicado um Componente (Estágio i)

$$V_{(i-1)} \cdot y_{(i-1)} + L_{(i+1)} \cdot x_{(i+1)} = V_{(i)} \cdot y_{(i)} + L_{(i)} \cdot x_{(i)} \quad (\text{VI.5})$$

Na condição de refluxo total e considerando-se (i) como o prato de topo, sabe-se que:

$$y_{(i)} = x_{(i+1)} \quad (\text{VI.6})$$

Aplicando-se as equações (VI.3) e (VI.6) na equação (VI.5), tem-se:

$$V_{(i-1)} \cdot y_{(i-1)} = L_{(i)} \cdot x_{(i)} \quad (\text{VI.7})$$

Aplicando-se a equação (VI.4) na equação (VI.7):

$$y_{(i-1)} = x_{(i)} \quad (\text{VI.8})$$

onde:

L e V são as vazões molares das correntes de líquido e de vapor.

x e y são as composições, em fração molar, das fases líquida e vapor.

Por definição, o desempenho do prato é expresso em termos da eficiência de Murphree no prato baseado na fase vapor, isto é:

$$E_{MV} = \frac{(y_1 - y_2)}{(y_1^* - y_2)} \quad (\text{VI.9})$$

onde y_1, y_2 são as frações molares médias do componente mais volátil na fase vapor que deixa e que entra no prato e o asterisco denota a composição do vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato. Desde que a refluxo total o valor de y_1 é igual à composição do líquido que entra no prato, isto é, $y_1 = x_2$ e, similarmente, $y_2 = x_3$, então:

$$E_{MV} = \frac{(x_2 - x_3)}{(y_1^* - x_3)} \quad (\text{VI.10})$$

Como observado na equação (VI.10), para a determinação da eficiência de prato, além das frações molares é necessário o conhecimento da fração de equilíbrio (y^*).

VI.2 Método de Cálculo das Frações do Equilíbrio de Fases

Para cada componente j na mistura, a condição de equilíbrio termodinâmico é dada por:

$$f_j^V = f_j^L \quad (\text{VI.11})$$

onde f_j^V e f_j^L são, respectivamente, as fugacidades do componente j na fase vapor (V) e na fase líquida (L).

As fugacidades, como definidas pela equação (VI.11), têm pouco uso prático, a menos que sejam relacionadas com variáveis que possam ser determinadas experimentalmente, tais como as frações molares da fase líquida (x) e da fase vapor (y), a temperatura absoluta (T) e a pressão total (P) do sistema.

As relações desejadas entre as fugacidades e as variáveis citadas (x , y , T e P) para qualquer sistema são alcançadas através da introdução de duas funções auxiliares, que são os coeficientes de fugacidade (ϕ) e de atividade (γ).

VI.2.1 Coeficiente de fugacidade

O coeficiente de fugacidade (ϕ) relaciona a fugacidade da fase vapor (f_j^V) de uma mistura qualquer com a fração molar desta fase (y) e a pressão total (P). Quando a fase vapor se comporta como gás ideal, a fugacidade pode ser escrita através da seguinte relação:

$$f_j^V = y_j \cdot P \quad (\text{VI.12})$$

onde y_j é a fração molar do componente j na fase vapor e P a pressão absoluta do sistema.

Quando a fase vapor não se comporta como um gás ideal, pode-se definir o coeficiente de fugacidade (ϕ_i) como:

$$\phi_j = \frac{f_j^v}{y_j \cdot P} \quad (\text{VI.13})$$

ou rescrevendo a equação (VI.13):

$$f_j^v = \phi_j \cdot y_j \cdot P \quad (\text{VI.14})$$

O coeficiente de fugacidade pode ser relacionado com a propriedade volumétrica, \bar{v}_j , da fase vapor através da seguinte equação:

$$\ln \phi_j = \frac{1}{RT} \int_0^P \left(\bar{v}_j - \frac{RT}{P} \right) dP \quad (\text{VI.15})$$

onde R é a constante universal dos gases e \bar{v}_j o volume parcial molar do componente j, definido da seguinte forma:

$$\bar{v}_j = \left(\frac{\partial \text{Vol}}{\partial n_j} \right)_{T, P, n_{k \neq j}} \quad (\text{VI.16})$$

onde Vol é o volume total que contém n_j moles do componente j, n_k moles do componente k, a temperatura e pressão constantes.

Estas propriedades podem ser expressas através de uma equação de estado. Na literatura, pode-se encontrar diversas equações P-V-T que exprimem o comportamento das misturas para determinadas faixas de pressão e temperatura. A equação Virial truncada no segundo termo é uma das relações P-V-T que prediz com grande confiabilidade o comportamento das misturas nas condições de baixa a moderada densidade.

VI.2.2 Coeficiente de atividade

Um procedimento análogo ao da fase vapor pode ser realizado para a fase líquida através da introdução do coeficiente de atividade (γ_j) que relaciona a fugacidade da fase líquida (f_j^L) com a fração molar (x_j) e a fugacidade no estado de referência (f_j°). Assim sendo, o coeficiente de atividade é dado por:

$$\gamma_j = \frac{f_j^L}{x_j \cdot f_j^\circ} \quad (\text{VI.17})$$

ou rescrevendo a equação (VI.17), tem-se:

$$f_j^L = \gamma_j \cdot x_j \cdot f_j^\circ \quad (\text{VI.18})$$

Para que a equação (VI.18) seja completamente definida, a fugacidade no estado de referência deve ser claramente especificada. A definição da fugacidade no estado padrão, entretanto, torna-se arbitrária à medida em que é governada pela referência adotada e esta escolha é realizada conforme a conveniência.

Normalmente, o estado de referência escolhido é o do componente j puro, à temperatura e pressão de equilíbrio. Desta forma, tem-se:

$$f_j^O = f_j^S \exp \left[\int_{P_j^S}^P \frac{v_j}{RT} dP \right] \quad (\text{VI.19})$$

onde P_j^S é a pressão de saturação, f_j^S a fugacidade na temperatura de saturação e v_j o volume molar do componente j na fase líquida à temperatura absoluta (T).

O termo exponencial da equação (VI.19) é chamado de termo de correção de Poynting, que pode ser simplificado considerando que o volume é independente da pressão e definido como:

$$\exp \left[\int_{P_j^S}^P \frac{v_j}{RT} dP \right] = \exp \left[\frac{v_j}{RT} (P - P_j^S) \right] \quad (\text{VI.20})$$

Porém, na maioria dos casos, o termo de correção de Poynting é aproximadamente igual a unidade, dado que os termos $(P - P_j^S)$ e v_j são valores pequenos quando comparados com RT . Assim, a equação (VI.19) pode ser reescrita na forma:

$$f_j^O = f_j^S \quad (\text{VI.21})$$

Pela definição do coeficiente de fugacidade, pode-se escrever que:

$$f_j^S = \phi_j^S P_j^S \quad (\text{VI.22})$$

onde ϕ_j^s é o coeficiente de fugacidade do componente j na temperatura de saturação.

Uma vez definido f_j^o , pode-se, então, apresentar o procedimento para o cálculo do coeficiente de atividade.

Existem vários modelos que permitem calcular o coeficiente de atividade. De acordo com a literatura, os modelos de Wilson, NRTL (Non Random Two Liquid) e UNIQUAC (UNiversal QUAsi Chemical) são os mais confiáveis, uma vez que reproduzem o comportamento não ideal usando apenas dois ou três parâmetros ajustáveis. Deste modo, no presente trabalho, escolheu-se o modelo UNIQUAC.

Neste modelo, o coeficiente de atividade é composto por duas contribuições: a combinatorial, que descreve as contribuições entrópicas dos componentes (γ_j^C) e a residual, que expressa as forças intermoleculares que são responsáveis pela entalpia de mistura (γ_j^R).

Deste modo, pode-se escrever que:

$$\ln \gamma_j = \ln \gamma_j^C + \ln \gamma_j^R \quad (\text{VI.23})$$

A contribuição combinatorial é dada por:

$$\ln \gamma_j^C = \ln \frac{\phi_j}{x_j} + 5 \cdot q_j^A \cdot \ln \frac{\theta_j}{\phi_j} + l_j - \frac{\phi_j}{x_j} \sum_{j=1}^{nc} x_j \cdot l_j \quad (\text{VI.24})$$

onde:
$$l_j = 5 \cdot (r_j - q_j^A) - (r_j - 1)$$

$$\theta_j = \frac{q_j^A \cdot x_j}{\sum_{k=1}^{nc} q_k^A \cdot x_k} \quad (\text{VI.25})$$

$$\phi_j = \frac{r_j x_j}{\sum_{k=1}^M r_k x_k} \quad (\text{VI.26})$$

A parte combinatorial se resume, então, na dependência de dois parâmetros, r_j e q_j^A , dos componentes puros, que são, respectivamente, medidas do volume e da área molecular de Van der Waals.

A contribuição residual pode ser expressa por:

$$\ln \gamma_j^R = q_j^A \cdot \left[1 - \ln \left(\sum_{k=1}^{nc} \theta_j \cdot \tau_{ki} \right) - \sum_{k=1}^{nc} \theta_k \cdot \tau_{ik} / \sum_{l=1}^{nc} \theta_l \cdot \tau_{lk} \right] \quad (\text{VI.27})$$

onde:

$$\tau_{lk} = \exp \left[-\frac{U_{lk} - U_{kk}}{RT} \right] = \exp \left[-\frac{\Delta U_{lk}}{RT} \right] \quad (\text{VI.28})$$

sendo: $U_{lk} = U_{kl}$ e $\tau_{lk} \neq \tau_{kl}$

VI.3 Relação de Equilíbrio

A separação de uma mistura através da destilação é alcançada por meio de sucessivos estágios de contato líquido/vapor, tornando-se necessário predizer os dados de equilíbrio, para se obter informações da composição de equilíbrio de uma dada fase, conhecendo-se a temperatura, pressão e a composição da outra fase no estágio. No equilíbrio é necessário que a fugacidade do componente j seja a mesma em ambas as fases. Então, das equações (VI.13) e (VI.17) pode-se escrever:

$$\phi_j \cdot y_j \cdot P = \gamma_j \cdot x_j \cdot f_j^O \quad (\text{VI.29})$$

A equação (VI.29) fornece uma quantidade chamada relação de equilíbrio ou fator de separação, definido por:

$$K_{eq} = \frac{y_j}{x_j} = \frac{\gamma_j \cdot f_j^O}{\phi_j \cdot P} \quad (\text{VI.30})$$

VI.4 Curva de Equilíbrio para o Sistema Etanol/Água

O procedimento descrito no item (VI.2) permite calcular o equilíbrio de fases para uma série de sistemas. Neste trabalho, os métodos anteriormente apresentados foram limitados para o sistema em estudo (etanol/água) utilizando o simulador comercial PRO – II[®].

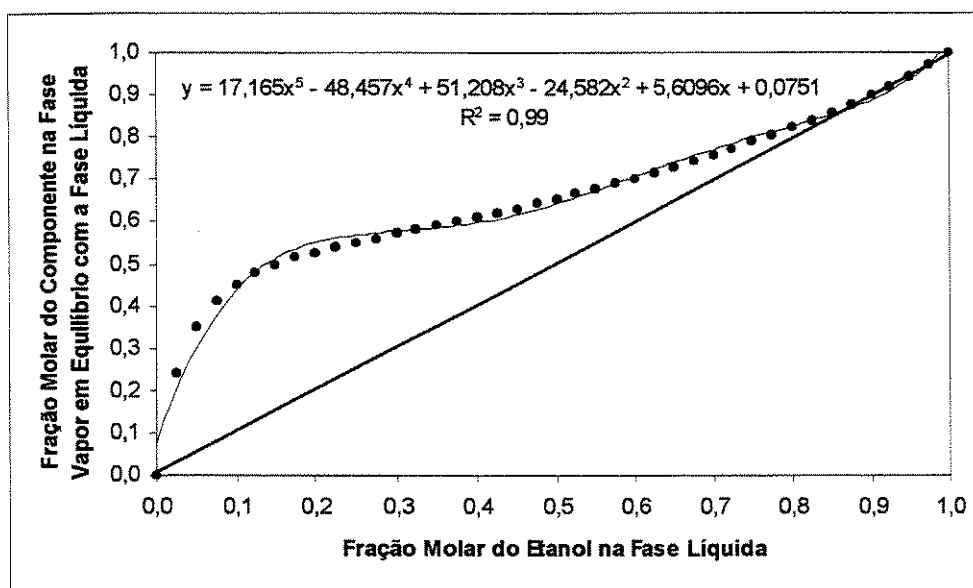


Figura VI.2 – Curva de equilíbrio do sistema etanol/água

VI. 5 Método para o Cálculo da Eficiência de O'Connell

O'CONNELL (1946) desenvolveu duas correlações empíricas de eficiência: uma para colunas de absorção e outra para colunas de fracionamento. A correlação para colunas de fracionamento é função do produto da volatilidade relativa dos componentes chave leve e pesado e da viscosidade média molar.

A correlação de O'Connell baseou-se, principalmente, em valores obtidos com sistemas hidrocarbonetos, mas inclui alguns valores para solventes clorados e para misturas água-álcool. Nos estudos efetuados até hoje, verifica-se que a correlação gera estimativas de confiança para a eficiência da coluna no caso de sistemas hidrocarbonetos, com uma margem de erro estimado de $\pm 7\%$ em relação aos dados experimentais da coluna. A expressão desenvolvida não leva em consideração os parâmetros de projeto de prato e apenas inclui duas variáveis que são propriedades físicas do sistema:

$$\text{Eficiência}(\%) = 48,7663 \cdot (\alpha_{LK} \cdot \mu_{\text{carga}})^{-0,255837} \quad (\text{VI.31})$$

onde:

$$\alpha_{LK} = \frac{\text{constante de equilíbrio do componente chave leve}}{\text{constante de equilíbrio do componente chave pesado}}$$

μ_{carga} = viscosidade da carga em Centipoise

VI.5.1 Determinação da volatilidade relativa

Para a determinação da volatilidade relativa (α_{LK}), empregou-se as constantes de equilíbrio, para os dois componentes presentes na mistura (etanol/água), através da utilização do simulador comercial PRO – II[®]. As constantes de equilíbrio são função da temperatura e, através da relação entre elas, é possível se determinar a volatilidade relativa, uma vez que se dispõem de dados experimentais de temperatura em cada estágio.

Conhecida a volatilidade relativa, o próximo passo consiste em se determinar a viscosidade da mistura em cada estágio.

VI.5.2 Determinação da viscosidade da mistura na fase líquida

As expressões mais exatas utilizadas para a predição da viscosidade de misturas líquidas não são baseadas apenas em dados dos componentes puros. São necessários dados experimentais da viscosidade para a mistura em questão e, preferencialmente, a várias temperaturas. Entretanto, quando esses dados não são disponíveis, pode-se utilizar equações alternativas que, embora menos exatas, ganham muito em simplicidade. Neste trabalho, devido à falta dos dados

experimentais necessários ao uso de expressões mais complexas, optou-se pela seguinte equação:

$$\ln(\mu_{mL}) = \sum_{i=1}^n x_i \cdot \ln(\mu_{iL}) \quad (\text{VI.32})$$

onde:

μ_{mL}	viscosidade da mistura líquida (cP)
μ_i	viscosidade do componente i na fase líquida
x_i	fração molar do componente i na mistura líquida

Conforme se observa na equação (VI.32), é necessário, ainda, um método adequado à estimativa da viscosidade de cada componente na temperatura de cada estágio. Para tanto, empregou-se os dados publicados por VAN VELZEN et al. (1972), YAWS et al. (1976) e DUHNE (1979) citados por REID et al. (1987) que permitem a estimação da viscosidade na fase líquida em função da temperatura para diversos componentes. Estes dados foram tratados e modificados para produzir unidades consistentes e estão disponíveis em REID et al. (1987). Para a água a seguinte correlação é indicada:

$$\ln \mu_i = A + \frac{B}{T} + C \cdot T + D \cdot T^2 \quad (\text{VI.33})$$

com:

μ_i	viscosidade do componente i na fase líquida (cP)		
T	temperatura (K)		

A	-2,471E+01	C	4,527E-02
B	4,209E+03	D	-3,376E-05

Esta correlação e as constantes são válidas para o componente água, na faixa de temperatura compreendida entre 0 e 370°C.

Para o etanol a seguinte correlação é indicada:

$$\ln \mu_i = A + \frac{B}{T} + C \cdot T + D \cdot T^2 \quad (\text{VI.34})$$

com

μ_i viscosidade do componente i na fase líquida (cP)

T temperatura (K)

A -6,210E+00 C 6,180E-03

B 1,614E+03 D -1,132E-05

Similarmente a água, esta correlação e as constantes são válidas somente para o componente etanol na faixa de temperatura compreendida entre -105 e 243°C.

Conhecidas as viscosidades na fase líquida para os dois componentes, as frações molares em cada estágio ao longo da coluna, e fazendo-se uso da equação (VI.32), determina-se a viscosidade da mistura em cada estágio. Com os valores da volatilidade relativa e da viscosidade determinados, utiliza-se a equação (VI.31) para a determinação da eficiência de O'Connell ao longo da coluna de destilação.

CONCLUSÃO

Neste capítulo foi apresentada, de forma detalhada, a metodologia a ser empregada para o cálculo da eficiência de Murphree e de O'Connell. De uma forma geral, conhecidas as frações molares em cada estágio e as frações de equilíbrio, determina-se, conforme a equação (VI.9), a eficiência de Murphree. De forma similar, conhecidas as temperaturas, as constantes de equilíbrio, a volatilidade relativa e a viscosidade da mistura em cada estágio determina-se a eficiência de O'Connell. Os perfis das eficiências calculados experimentalmente encontram-se no Capítulo VIII deste trabalho.

O capítulo a seguir descreve, com detalhes, todas as características da coluna de destilação em escala de laboratório que foi exclusivamente projetada e montada para a aquisição dos dados experimentais e, conseqüentemente, para o desenvolvimento deste trabalho. Também são apresentadas as características de operação da coluna, do sistema utilizado e do método de análise das amostras da fase líquida.

CAPÍTULO VII

DESENVOLVIMENTO EXPERIMENTAL

O objetivo deste trabalho é estudar uma coluna de destilação com pratos perfurados com vertedores. Para este fim, construiu-se uma coluna de destilação em escala de laboratório para a coleta dos dados experimentais. O equipamento construído é formado pela coluna, um condensador, um refeedor com aquecimento elétrico e o controlador da fonte de aquecimento. Neste capítulo, além da descrição do equipamento, são apresentados também o procedimento experimental utilizado e as características físicas da mistura teste e do método analítico utilizado na análise das amostras líquidas.

VII.1 Descrição do Equipamento

Apesar da literatura ser abundante quanto aos equipamentos e processos de separação, nela não são encontrados detalhes importantes relacionados à construção e montagem do equipamento, os quais são considerados neste trabalho. Diversos problemas levaram à sucessivas modificações na coluna de destilação experimental, de modo a permitir o seu eficiente funcionamento.

Durante a concepção do equipamento, procurou-se explorar alguns parâmetros de grande relevância na avaliação de projetos experimentais, tais como os fenômenos característicos de transferência de massa e calor, a interação líquido/vapor na superfície do prato e o gotejamento ou arraste de líquido decorrente do reduzido ou excessivo fluxo de vapor. Para isto, foram acoplados ao equipamento sistemas de visualização auxiliados por iluminação em pontos estratégicos da coluna de destilação (Vide anexos). Além disso, foi verificada a influência do isolamento da coluna.

VII.1.1 Características do equipamento principal

VII.1.1.1 Refervedor

Para a geração do vapor foi construído um refervedor, que consiste de um tanque em aço inoxidável com 400 mm de diâmetro e 500 mm de altura, provido de uma resistência elétrica com capacidade de 9000 Watts. Na parte superior do tanque, acoplou-se um bocal de conexão com a coluna de 140 mm de diâmetro interno, com flanges. A característica deste equipamento está descrita na Figura (VII.1), onde observa-se além do bocal, pontos para a retirada do produto de fundo, bocais da resistência elétrica e do termômetro.

Foi necessário projetar um controlador de potência trifásico para uma carga totalmente resistiva. Após a instalação, verificou-se que a corrente nominal do equipamento situou-se em torno de 14 Ampères, o que corresponde a uma potência de aproximadamente 9240 Watts. Com o controlador trifásico, o tempo de ebulição passou a ser de aproximadamente 45 minutos. Portanto, com este equipamento constatou-se um ganho de tempo, praticidade e eficiência.

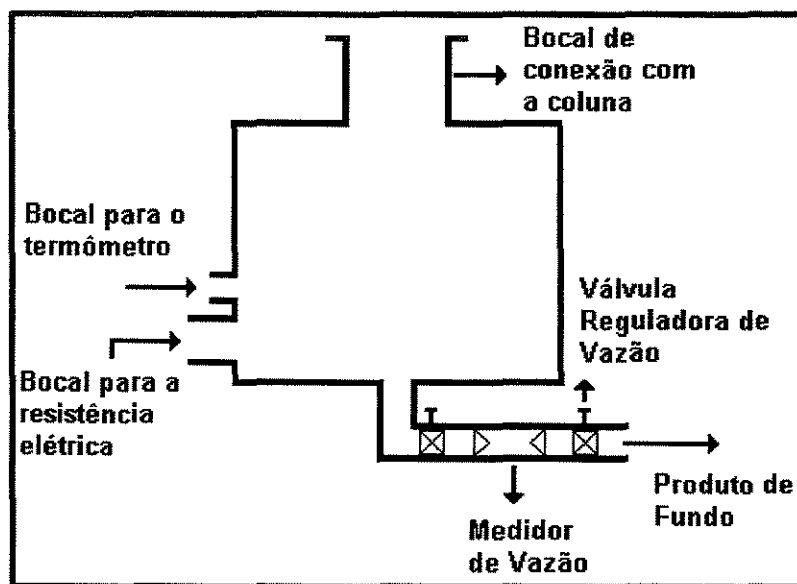


Figura VII.1 – Características do refeedor

VII.1.1.2 Estrutura da coluna

Acima do bocal superior do refeedor foi acoplada a coluna em aço inoxidável com pratos, flangeada, cuja estrutura interna será posteriormente descrita. Para flexibilizar o processo, a coluna foi dividida em três seções: uma com 1000 mm de comprimento e duas com 600 e 400 mm de comprimento, respectivamente. Em cada prato foram acoplados sistemas de amostragem apropriados para a retirada de amostra de líquido e para a medição da temperatura e pressão. A amostragem de líquido é feita por meio de seringas hipodérmicas e a temperatura determinada por meio de termopares conectados a cada prato e a um multímetro. Para evitar a drenagem do líquido entre os pratos e as paredes da coluna, foram utilizados anéis de borracha para a vedação.

VII.1.1.3 Sistema de refluxo

Na parte superior da coluna foi acoplado o sistema de refluxo, constituído por dois cilindros concêntricos. Na parte superior do cilindro de menor diâmetro ocorre a passagem do vapor, enquanto que no de diâmetro maior ocorre a passagem de líquido. A Figura (VII.2) ilustra tal arranjo.

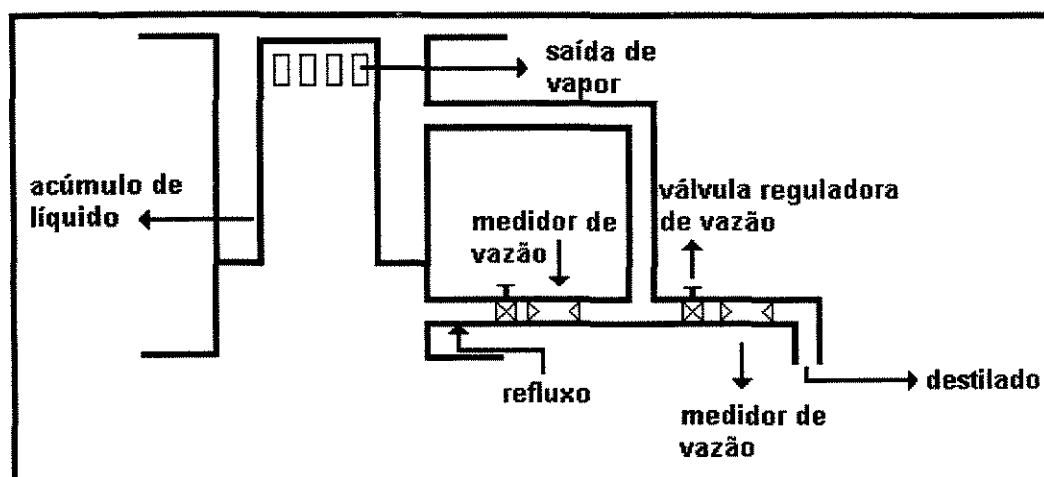


Figura VII.2 – Sistema de refluxo

VII.1.1.4 Condensador

Acima do sistema de refluxo foi inserido o condensador, com o diâmetro igual ao da coluna e com comprimento de 300 mm. No topo do condensador há uma abertura onde é acoplado um termômetro para a medida da temperatura. Nas laterais do condensador encontram-se os bocais de entrada e saída do líquido de condensação. No seu interior acha-se inserida uma serpentina em cobre com 1,26 cm de diâmetro externo, como mostra a Figura (VII.3).

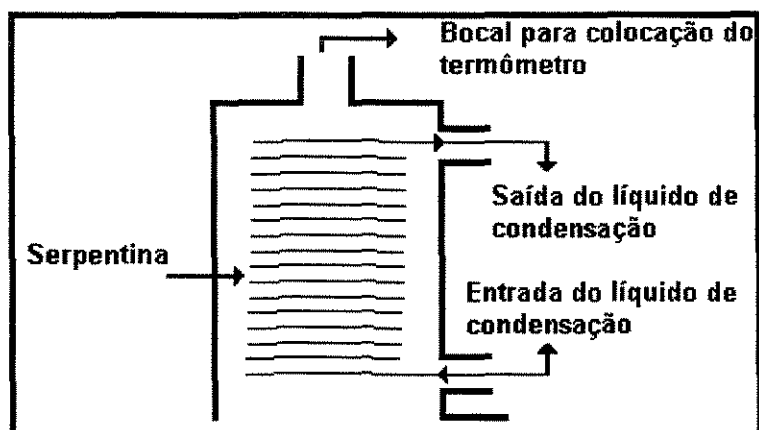


Figura VII.3 – Descrição do condensador

VII.1.1.5 Estrutura interna da coluna

As colunas de destilação são compostas internamente por pratos, cujo objetivo é aumentar a área efetiva de contato entre as fases líquida e vapor. Os tipos de pratos diferem entre si na capacidade das taxas de escoamento do líquido ou do vapor.

Ao longo dos anos, diferentes tipos de pratos foram propostos, permitindo que o vapor chegue ao prato com uma distribuição relativamente uniforme, entre em contato com o líquido e se separe rapidamente do mesmo. O tipo mais simples é o prato perfurado.

Um prato perfurado a fluxo cruzado pode operar com uma pequena taxa de escoamento de vapor até o ponto em que o líquido comece a drenar através dos orifícios e a dispersão do gás fica inadequada para se obter boa eficiência (BARROS et al., 1994).

As primeiras colunas de destilação foram construídas com pratos de campânula, que conduzem e invertem a direção do fluxo do vapor, causando a injeção ou o borbulhamento do vapor dentro do líquido através de fendas.

Outro modelo muito difundido é o prato valvulado. Em altas velocidades do vapor, a válvula é totalmente aberta e quando da diminuição da velocidade do vapor a válvula é parcialmente ou totalmente fechada. As válvulas proporcionam boa mistura entre o líquido e o vapor e podem operar com fluxos muito pequenos em virtude do fechamento das mesmas. Da hibridização do prato perfurado com o valvulado surgiu um novo tipo de prato já testado e utilizado pelas indústrias japonesas e alemãs denominado prato misto (BARROS et al., 1994).

Na coluna de destilação projetada para este trabalho optou-se por pratos perfurados, devido ao baixo custo do projeto. Os pratos perfurados apresentam certas vantagens sobre os pratos com campânula. São de fácil construção e relativamente baratos; podem ser fabricados não somente de metais, mas também de materiais plásticos e cerâmicos, entre outros, dependendo do sistema a ser separado. Podem operar com baixo "holdup" do líquido, baixo gradiente hidráulico e maior capacidade de separação quando comparado com colunas com pratos de campânula. A principal desvantagem é a baixa estabilidade operacional. Uma mínima taxa de vapor deve ser mantida para evitar que o líquido escoe através das perfurações; em maiores taxas de vapor, a resistência hidráulica aumenta rapidamente até que a coluna é inundada. Estas dificuldades podem ser superadas por meio de projetos adequados visando a melhor capacidade operacional (BARROS, 1992).

Uma vez determinado o número de estágios necessários para uma dada separação, deve-se dimensionar o prato. Dimensionar o prato significa determinar o diâmetro, as dimensões e disposições dos elementos do prato, tais como o diâmetro e o número de furos, a altura dos vertedores de entrada e saída do prato

e as dimensões do vertedor. Tal dimensionamento deve conduzir a um bom funcionamento do prato, com uma boa eficiência, estabilidade operacional e perda de carga compatível com a mistura a ser separada. O primeiro passo para esse dimensionamento consiste no cálculo da velocidade do vapor dentro da coluna.

VII.1.1.5.1 Cálculo da velocidade do vapor

Um prato opera satisfatoriamente dentro de um certo intervalo de velocidade de vapor; fora destes limites, a eficiência reduz-se a valores inaceitáveis. O limite superior é caracterizado pelo arraste de líquido para o prato superior e a conseqüente inundação da coluna. É preciso ter uma velocidade de vapor elevada para se ter rendimentos elevados, e a velocidade estará normalmente entre 70 e 90 % daquela que causaria inundação. Para projetos, recomenda-se o uso de 80 a 85% da velocidade de inundação.

VII.1.1.5.2 Cálculo do diâmetro do prato

Uma vez calculada a velocidade do vapor no projeto, o quociente entre a vazão volumétrica de vapor e a velocidade do vapor fornece o valor da área ativa (área transversal da coluna menos a área ocupada pelo vertedor). Para calcular a área transversal da coluna (área total do prato) é necessário estimar inicialmente a área da seção transversal do vertedor. O valor inicial a ser admitido para a seção transversal do vertedor é da ordem de 8% da área total do prato (FAIR, 1963).

A vazão volumétrica do vapor na coluna é função da capacidade operacional da coluna, da massa molecular média da mistura, da pressão interna e da taxa de refluxo adotada para o cálculo do número de estágios teóricos.

Na correlação de FAIR (1963), a distância entre os pratos é considerada como parâmetro de cálculo. Ela deve ser previamente fixada; em seguida, os cálculos da velocidade de arraste de gotículas, feitos pelo método de FAIR e MATHEWS (1958), permitem definir a adequação do espaçamento admitido inicialmente; caso não seja adequada, uma nova distância entre pratos deverá ser definida e o conseqüente cálculo de um novo diâmetro. Usando-se este método, calculou-se o diâmetro da coluna e o espaçamento entre pratos ao longo da coluna de destilação.

VII.1.1.5.3 Vertedor

Para colunas de pequeno porte e, principalmente, colunas para pesquisa, é comum usar-se vertedores constituídos por um duto circular.

VII.1.1.5.4 Cálculo da vazão de afogamento

A correlação de FAIR et al. (1958) permite calcular a velocidade do vapor acima do prato, na condição de afogamento, através da relação entre a vazão volumétrica e a área transversal disponível para o escoamento do vapor (área transversal da coluna menos a área do vertedor).

Pela correlação de FAIR et al. (1958), a velocidade é dada pela equação (VII.1):

$$U_{nf} = K_1 \cdot \left(\frac{\rho^L - \rho^V}{\rho^V} \right)^{1/2} \quad (\text{VII.1})$$

onde K_1 é um parâmetro empírico, dado em ft/s, obtido através da Figura (VII.4).

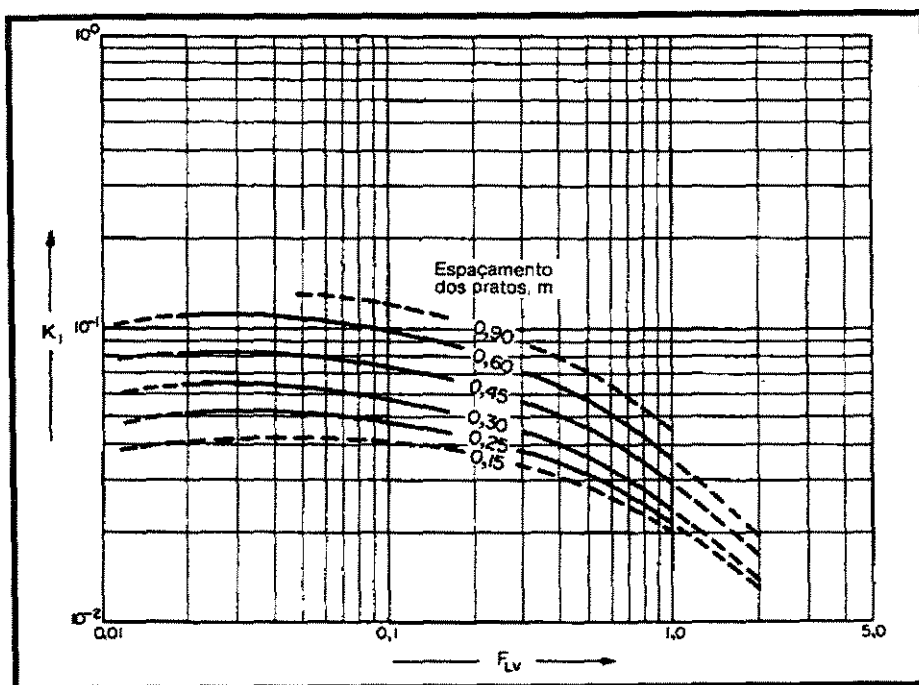


Figura VII.4 – Velocidade de inundação em pratos perfurados

Na Figura (VII.4), a abcissa está relacionada com os parâmetros da equação (VII.2).

$$F_{LV} = \frac{L}{V} \cdot \left(\frac{\rho^L}{\rho^V} \right)^{0,5} \quad (\text{VII.2})$$

A massa específica do líquido corresponde à mistura etanol/água 50% molar na temperatura de saturação e a do vapor corresponde à mistura etanol/água que estaria em equilíbrio com o líquido de composição diferente do equilíbrio.

O valor dado pela Figura (VII.4) corresponde a um líquido com a tensão superficial de 0,020 N/m. Para líquidos com diferentes tensões superficiais, o valor de K_1 é corrigido da seguinte forma:

$$K_1 = (K_1)_{\sigma=20} \left(\frac{\sigma}{20} \right)^{0,2} \quad (\text{VII.3})$$

Obtém-se, assim, o valor da velocidade de afogamento através da equação (VII.1).

Conhecendo-se a área do prato e sabendo-se que a área do vertedor é igual a 8% da área do prato, obtém-se a área disponível para o fluxo do vapor (A_n) e pode-se calcular a vazão de afogamento:

$$Q_f = A_n \cdot U_{nf} \quad (\text{VII.4})$$

A velocidade de afogamento utilizada para o cálculo do diâmetro da coluna, através da velocidade de vapor, é 80 a 85% da velocidade de inundação; esta porcentagem é chamada de fator de inundação. A relação entre a vazão e a velocidade do vapor fornece a área disponível para o fluxo de vapor, que, com a área do vertedor, fornece a área da seção transversal do prato.

VII.1.1.5.5 Altura do vertedor de saída do prato

Foi adotada uma altura de 25,4 mm, dentro da faixa de valores recomendados na literatura.

VII.1.1.5.6 Cálculo do número de furos no prato

Segundo COULSON et al. (1983), o tamanho de furos usados variam de 2,5 a 12 mm; a dimensão preferida é 5 mm. Usam-se, em alguns casos, furos

maiores, principalmente quando os sistemas a serem separados contêm partículas sólidas.

Este cálculo é feito através do limite inferior de funcionamento do prato, isto é, na condição em que o líquido começa a gotejar através dos furos.

O líquido flui através dos furos quando a velocidade do vapor é tão pequena que a perda de carga através do prato é inferior à carga hidrostática do líquido no prato.

Esta carga hidrostática é proporcional à altura do líquido sobre o prato (H_{LO}), composta por dois parâmetros: a altura do vertedor de saída (HW) mais a altura do líquido sobre o vertedor (H_{OW}), como mostra a equação (VII.5):

$$H_{LO} = H_{OW} + HW \quad (VII.5)$$

onde $HW = 25,4$ mm.

A altura do líquido sobre o vertedor (crista) pode ser calculada usando-se a equação proposta por Francis. Esta, no caso de vertedores circulares, é descrita pela equação (VII.6):

$$H_{OW} = 750 \cdot \left[\frac{L}{\rho^L \cdot l_W} \right]^{2/3} \quad (VII.6)$$

Pode-se calcular também a velocidade mínima de vapor através dos furos usando-se a equação VII.7.

$$U_{hm} = \frac{F_{hm}}{(\rho v)^{0,5}} \quad (\text{VII.7})$$

onde F_{hm} é o fator de velocidade mínima do vapor através dos furos, dado por:

$$F_{hm} = 1,22 \cdot \left[B - 18,8 \left(1 - \frac{D_h}{25,4} \right) \right] \quad (\text{VII.8})$$

B é um fator empírico apresentado por CHAVES (1980) e D_h é o diâmetro dos furos. Para os furos, usou-se o diâmetro de 3,18 mm (1/8 polegada), segundo recomendações da literatura.

Com o fator de velocidade mínimo, pode-se calcular a velocidade do vapor na condição de choro (U_{hm}). A velocidade do vapor através dos furos, para projeto da coluna, é dada por:

$$U_h = \frac{U_{hm}}{(FLEX)} \times 100 \quad (\text{VII.9})$$

(*FLEX*) é a flexibilidade, que é a razão entre vazões mínimas e a de operação da coluna, adotada como 60%.

Com a velocidade do vapor nos furos, para projeto, pode-se calcular a área dos furos através da relação entre a vazão volumétrica do vapor e a velocidade. Assim, o número de furos será a relação entre a área dos furos e a área de um furo.

VII.1.1.5.7 Distribuição dos furos no prato

O passo entre as perfurações (distância entre os centros dos furos), l_p , não deve ser inferior a duas vezes o diâmetro do furo e o intervalo normal é 2,5 a 4 vezes o diâmetro. Dentro deste intervalo, pode-se escolher o passo para se obter o número de furos ativos necessários para a área total de perfuração especificada.

Para a distribuição dos furos é preciso adotar um arranjo triangular ou retangular; prefere-se o padrão triangular, pois este proporciona melhor interação entre o líquido e o vapor, além de evitar a formação de caminhos preferenciais. Neste trabalho, foi adotado o arranjo triangular com o passo entre os furos na ordem de 7,9 mm de comprimento. Com base no intervalo normal de cada variável do projeto, juntamente com os valores e equações recomendadas, todos os cálculos relativos ao dimensionamento do prato foram realizados.

A coluna de destilação é constituída internamente por 8 pratos perfurados de polietileno. Optou-se por este tipo de material por apresentar baixo custo e ser facilmente usinado. A sua deformação só ocorre em temperaturas acima de 120°C e o efeito de transferência de calor na superfície é desprezível. Os pratos inseridos na coluna de destilação estão espaçados a 200 mm de distância entre eles e cada um com 87 perfurações, sendo o passo entre os furos de 7,9 mm com 3,18 mm de diâmetro, distribuídos em um padrão tal que os centros dos furos formam um triângulo eqüilátero (WINKLE e UMHOLTZ, 1957; HAY e JOHNSON, 1960; FANE e SAWISTOWSKI, 1969). A altura da represa é de 25,4 mm. Nas Figuras (VII.5) e (VII.6) visualiza-se as características dos pratos usados na coluna de destilação:

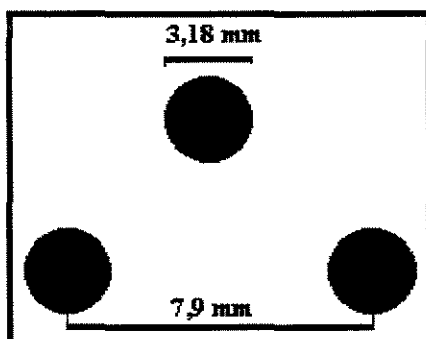


Figura VII.5 – Distribuição dos furos nos pratos

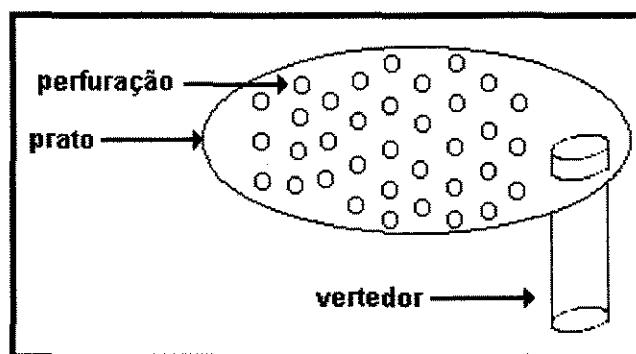


Figura VII.6 – Esquema do prato

VII.1.2 Estrutura completa da coluna

A combinação de todas as peças descritas anteriormente definem a estrutura da coluna de destilação. Nos anexos encontram-se fotos do equipamento anteriormente descrito. Pode-se visualizar também as fases em contato no regime turbulento durante o andamento do processo.

VII. 2 Procedimento Experimental

A operação da coluna em refluxo total, caracterizada pelo retorno à coluna de todo o vapor condensado, é realizado da seguinte forma: carrega-se o

refervedor com uma solução aquosa de etanol, abre-se o registro para permitir a circulação de água pelo condensador e acionam-se as resistências elétricas. Com isto, a solução do fervedor se aquece, entra em ebulição produzindo, então, o vapor. Este vapor sobe pela coluna até alcançar o condensador onde é totalmente condensado e, após a condensação, é recirculado integralmente à coluna na condição de líquido saturado.

O primeiro equipamento a ser ligado é a resistência elétrica acoplada ao fervedor, cuja regulação é feita de modo cuidadoso através de um controlador de potência. O aquecimento é conduzido progressivamente, iniciando com taxas mais baixas e crescendo, gradativamente, até a taxa adequada para o experimento. Entende-se como taxa adequada àquela fornecida ao sistema de maneira que a velocidade do vapor não provoque os fenômenos de arraste ou de gotejamento. Portanto, a potência de aquecimento escolhida deve ser capaz de produzir uma quantidade de vapor que permita que o líquido fique retido e forme uma boa dispersão sobre os pratos. Quando ocorre a dispersão sobre o prato, formada pela interação entre as fases líquida e vapor, a coluna está em condições de operação. Quando isto ocorre, não significa necessariamente que a coluna esteja trabalhando em regime permanente, pois é necessário um tempo de operação para que tanto a altura do líquido sobre o prato como a temperatura em cada prato estabilizem. A coleta dos dados é feita com a coluna operando em regime permanente para cada potência de aquecimento. Foi adotado, como critério de verificação do regime permanente, a estabilidade da temperatura, determinada nos diversos pratos ao longo da coluna mediante registro periódico de tal parâmetro. Após o estabelecimento do regime permanente, inicia-se a retirada das amostras de uma maneira sistemática, com volumes na ordem de 1 a 2 ml. A amostragem é feita por meio de seringas acopladas à estrutura da coluna, as quais são lavadas três vezes com o próprio líquido do local da amostragem. Esta lavagem consiste na aspiração do líquido para a seringa e sua devolução rápida para a coluna sem a necessidade de retirada da agulha. Somente após tal procedimento, a amostra líquida é retirada. A seringa é desconectada da agulha

somente após algum tempo de espera, permitindo a redução da sua temperatura. Após a coleta das amostras, estas são armazenadas em frascos com boa vedação, em ambiente adequado, até a realização das análises.

VII.2.1 Material utilizado

A mistura líquida utilizada para o estudo da coluna de destilação foi o sistema etanol/água, que na pressão de 1 atm, apresenta um azeótropo na fração molar igual a 0,894 em etanol e tem uma temperatura de ebulição de 78,15°C. Nas condições de operação da coluna, pode-se esperar que a temperatura máxima na base fosse igual a 100°C e no topo próxima a do ponto de azeotropia.

Antes de cada ensaio é necessário proceder-se com a preparação da solução de álcool etílico hidratado comercial, diluído até uma concentração abaixo do ponto azeotrópico.

VII.2.2 Determinação da composição das amostras

A determinação da composição da mistura etanol/água é feita através de análise instrumental aplicando-se a cromatografia gasosa. O uso de cromatografia é extensivo aos sistemas binários e apresenta como principal vantagem a retirada de pequenos volumes de amostra.

A cromatografia em fase gasosa é uma técnica que possibilita a identificação de substâncias através da comparação do seu tempo de retenção com o da substância padrão. Na cromatografia em fase gasosa a fase móvel é um gás quimicamente inerte, chamado gás de arraste e a fase estacionária um sólido impregnado colocado em tubos apropriados de vidro, sílica fundida ou metal que

constituem a coluna cromatográfica. A amostra é, então, introduzida na coluna na forma de gás ou vapor através de um injetor aquecido e é arrastada pela fase móvel percorrendo continuamente a coluna e entrando em contato com a fase estacionária. Devido aos fatores como afinidade com a fase estacionária, ponto de ebulição e momento dipolar dos componentes da mistura, ocorre uma distribuição diferente dos componentes entre a fase estacionária e a fase móvel. Isto acarreta uma defasagem durante a passagem pela coluna dos diversos componentes, que chegam em tempos diferentes em um detetor conectado ao final da coluna. O cromatograma é então registrado sob a forma de picos, sendo que em condições ideais cada pico corresponde a um composto.

A exemplo de outras técnicas analíticas, as análises em cromatografia a gás são executadas mediante o emprego de padrões. Isto é, para cada substância analisada é empregado um padrão de concentração conhecida. Sem os mesmos, a interpretação dos cromatogramas, bem como as análises quantitativas tornam-se inviáveis. Na investigação de determinada substância numa amostra ou na análise quantitativa da mesma, o padrão é um elemento indispensável. Os métodos de análise quantitativa mais empregados são o método de padrão externo e o método do padrão interno (ou de padronização interna). O método de padrão externo utiliza soluções de concentrações definidas da substância em análise. Os padrões são preparados na faixa de concentração estimada da substância e são injetados um a um. As áreas obtidas para cada concentração devem gerar uma curva no diagrama cartesiano. Em seguida, a amostra é injetada, a substância em análise gera a área proporcional à sua concentração e esta é interpolada na curva de concentração versus área das soluções padrão. Assim, obtém-se a concentração da substância na amostra.

No método do padrão interno (MPI) uma substância padrão conhecida é adicionada à amostra e nas soluções de calibração. As análises quantitativas são conduzidas mediante a correlação das áreas do padrão e das substâncias

presentes na amostra. Deve-se adotar alguns critérios para a escolha do padrão interno:

a) de modo geral, deve possuir características físico-químicas comuns – mesmo grupo químico, polaridade, densidade, peso molecular e ponto de ebulição semelhantes – àquelas que são objeto de estudo presentes na amostra. No entanto, deve-se assegurar que o tempo de retenção do padrão interno não coincida com os tempos de retenção das substâncias em análise. Esses requisitos nem sempre são alcançados;

b) nunca poderá ser um dos constituintes da amostra;

c) não deverá reagir com nenhum componente da amostra;

d) deverá ser incorporado à amostra nas mesmas condições em que o analito incorporou-se. Na prática, isto raramente é atendido;

e) em geral, deverá eluir acompanhado do analito, de forma que no cromatograma os picos sejam próximos (não demasiadamente), com boa resolução de linha de base;

f) o padrão interno e o analito deverão dar respostas similares no sistema detector e deverão estar presentes em concentrações próximas.

Se uma amostra requerer a quantificação de muitos analitos, pode-se usar vários padrões internos desde que os critérios de escolha sejam atendidos. As substâncias usadas como padrão interno incluem os análogos, isômeros, enantiômeros e isótopos preparados a partir do próprio analito. Após a seleção da substância a ser utilizada como padrão interno, prepara-se uma série de padrões contendo uma concentração fixa bem conhecida do padrão interno, variando a concentração do analito. A concentração do padrão interno a ser incorporado à amostra deve ser próxima à concentração estimada do analito para que as áreas do analito e do padrão interno geradas no cromatograma sejam semelhantes. Cada padrão é analisado pelo cromatógrafo e a razão de área (área do pico do analito / área do pico do padrão interno) é calculada e disposta no diagrama cartesiano, obtendo-se a concentração do analito nos padrões.

Uma concentração do padrão interno, assim como nos padrões, é adicionada à amostra. Esta adição é realizada antes de qualquer manipulação para compensar as perdas do analito decorrentes dos procedimentos de manipulação e preparo da amostra. Isto está baseado na suposição de que o comportamento do analito e do padrão interno em qualquer processo de preparo (extração, por exemplo) deveria ser semelhante devido às similaridades químicas dos dois compostos. A amostra com a adição do padrão interna é analisada no cromatógrafo e a razão de área dos compostos é determinada. A correspondente concentração do analito na amostra é interpretada frente ao gráfico dos padrões. A concentração final do analito na amostra é calculada considerando os fatores de diluição decorrentes do preparo da amostra.

A maior vantagem do método do padrão interno é que não há necessidade do conhecimento e controle do volume de amostra injetada. Entretanto, poderá haver problemas decorrentes da adição de uma substância estranha à amostra e dificuldades para encontrar um padrão interno adequado para amostras muito complexas que geram cromatogramas com um grande número de picos, onde não seja possível introduzir o pico do padrão interno. No caso em estudo, o padrão interno utilizado foi o n-propanol, devido às suas similaridades com o etanol.

As análises cromatográficas foram realizadas em um aparelho da marca Shimadzu, modelo GC-14 B, com uma coluna CBP10 Cianopropil Metil Silicone Shimadzu e integrador modelo C-R6A do Instituto de Pesquisas Tecnológicas da Universidade Regional de Blumenau. O detetor utilizado foi o "Flame Ionization Detector" (FID) e o gás de arraste empregado foi o hidrogênio.

CAPÍTULO VIII

ANÁLISE DOS RESULTADOS EXPERIMENTAIS

O objetivo deste capítulo é apresentar e analisar os resultados dos ensaios envolvidos na determinação da eficiência de Murphree e O'Connell e dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna de destilação com pratos perfurados com vertedor, operada com o sistema etanol/água. No apêndice A são apresentadas, de forma resumida, as condições em que foram realizados os ensaios e os principais resultados obtidos. Nele estão indicadas as composições da alimentação, as frações mássicas e molares, a temperatura em cada estágio ao longo da coluna de destilação, além da potência fornecida ao refeedor.

VIII.1 Avaliação do Funcionamento dos Acessórios

Com o equipamento descrito no Capítulo VII deste trabalho, realizaram-se as primeiras atividades que visaram a avaliação e o estabelecimento de critérios e da filosofia de funcionamento da coluna de destilação.

Os dois primeiros ensaios tiveram como objetivos principais avaliar o funcionamento da coluna de destilação, verificar o comportamento do controlador de potência, bem como do sistema de leitura de temperatura (termopares e multímetros), familiarizando-se, desta maneira, com a rotina de trabalho. Portanto, para estes dois ensaios não constam, no apêndice A, valores relacionados às composições em cada estágio. No ensaio 1, os únicos parâmetros avaliados foram a temperatura e a operacionalidade do controlador de potência. Para este ensaio, a mistura inicial continha 24% em fração mássica de etanol, sendo a potência fornecida à resistência de 0,387E8 J/h.

Na Figura VIII.1 observa-se o perfil de temperatura resultante deste ensaio. As temperaturas situaram-se entre 99°C e 79°C no fundo e no topo da coluna, respectivamente, estando, portanto, de acordo com a faixa de temperatura de ebulição dos componentes envolvidos. Observou-se neste ensaio, conforme citado na literatura, que a região de baixa concentração de etanol apresenta temperaturas mais elevadas devido ao aumento da concentração da água, componente com maior temperatura de ebulição da mistura utilizada.

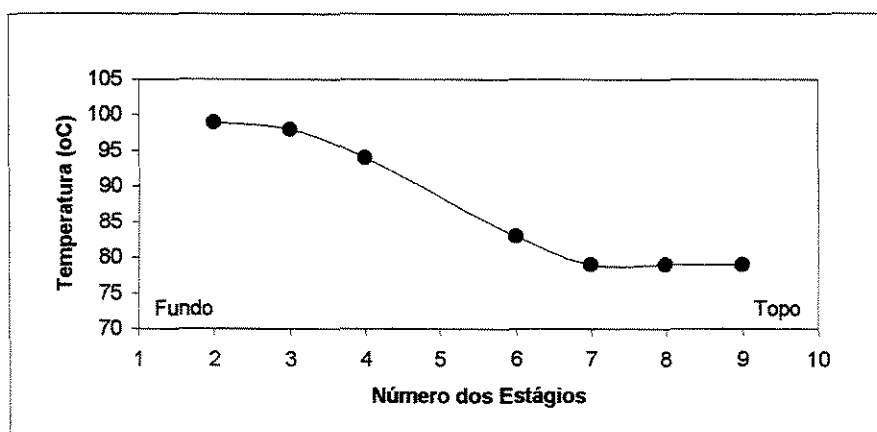


Figura VIII.1 – Perfil de temperatura na fase líquida (Ensaio 1)

Concebida a filosofia do funcionamento do equipamento, procedeu-se ao ensaio 2, que visava determinar o perfil de temperatura ao longo da coluna de

destilação e retirar amostras para a determinação da composição na alimentação e no destilado, familiarizando-se, desta maneira, com a metodologia a ser adotada na análise das amostras. Este ensaio permitiu o estabelecimento de uma metodologia seqüencial utilizada na operação da coluna de destilação. As medidas de temperatura foram realizadas em intervalos de 30 minutos, iniciadas quarenta e cinco minutos após o início do processo e o seu comportamento (Figura VIII.2) foi similar ao descrito no ensaio 1. A potência de aquecimento escolhida foi aquela com capacidade de produzir a quantidade de vapor suficiente para proporcionar o borbulhamento necessário para a dispersão do líquido sobre os pratos. Para valores muito abaixo da potência estipulada, observou-se o fenômeno de gotejamento e, muito acima deste, o fenômeno de arraste de gotas de líquido para o prato superior, culminando na inundação da coluna de destilação. As amostras retiradas neste ensaio foram conservadas em frascos apropriados e determinado, analiticamente, o teor dos componentes presentes em cada uma delas. As frações obtidas permitiram observar o enriquecimento do componente mais volátil em direção ao topo da coluna, identificando, assim, a capacidade operacional deste equipamento. Além do mais, a filosofia do funcionamento e da operação do cromatógrafo à gás utilizado na determinação do teor dos componentes presentes na amostra foi concebida.

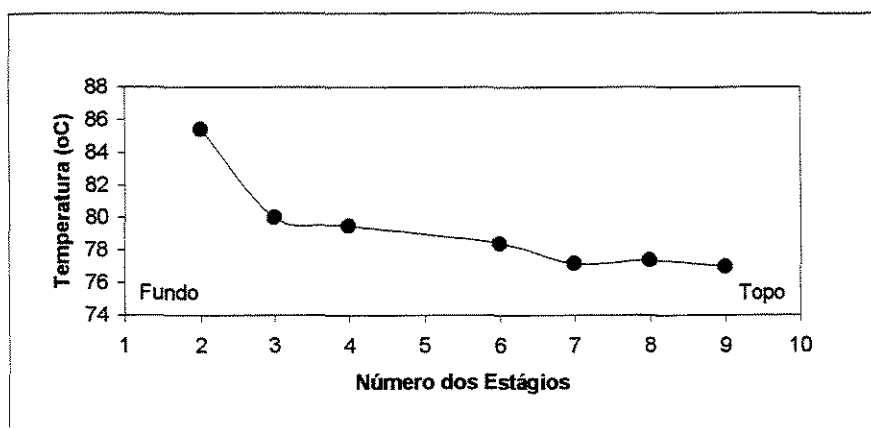


Figura VIII.2 – Perfil de temperatura na fase líquida (Ensaio 2)

VIII.2 Determinação do Estado Estacionário da Coluna de Destilação

Conhecida a filosofia do funcionamento do equipamento, procedeu-se aos ensaios para a determinação do tempo necessário para o alcance do estado estacionário ao longo da coluna de destilação.

VIII.2.1 Coluna sem isolamento térmico

Antes de iniciar a coleta de amostras, a coluna foi operada a refluxo total e a pressão atmosférica e em condições fixas de potência fornecida à resistência. O alcance do estado estacionário foi estabelecido através da leitura periódica das temperaturas nos estágios intermediários da coluna de destilação, em intervalos fixos de tempo. Quando o parâmetro medido tornava-se constante, assumia-se que a coluna havia alcançado o estado estacionário.

Na Figura VIII.3 visualiza-se o comportamento da temperatura nos estágios 2 a 5, em função do tempo, na coluna sem isolamento térmico. A leitura de temperatura foi realizada em intervalos de 5 minutos e, como pode-se observar na Figura VIII.3, o estabelecimento do estado estacionário ocorreu a aproximadamente uma hora após iniciada a operação em praticamente todos os estágios. Entretanto, a retirada das amostras foi feita somente no final do ensaio, com um tempo de operação de, aproximadamente, 10 horas. Este procedimento evita a obtenção de amostras em uma coluna, caso a mesma não estivesse operando em regime permanente.

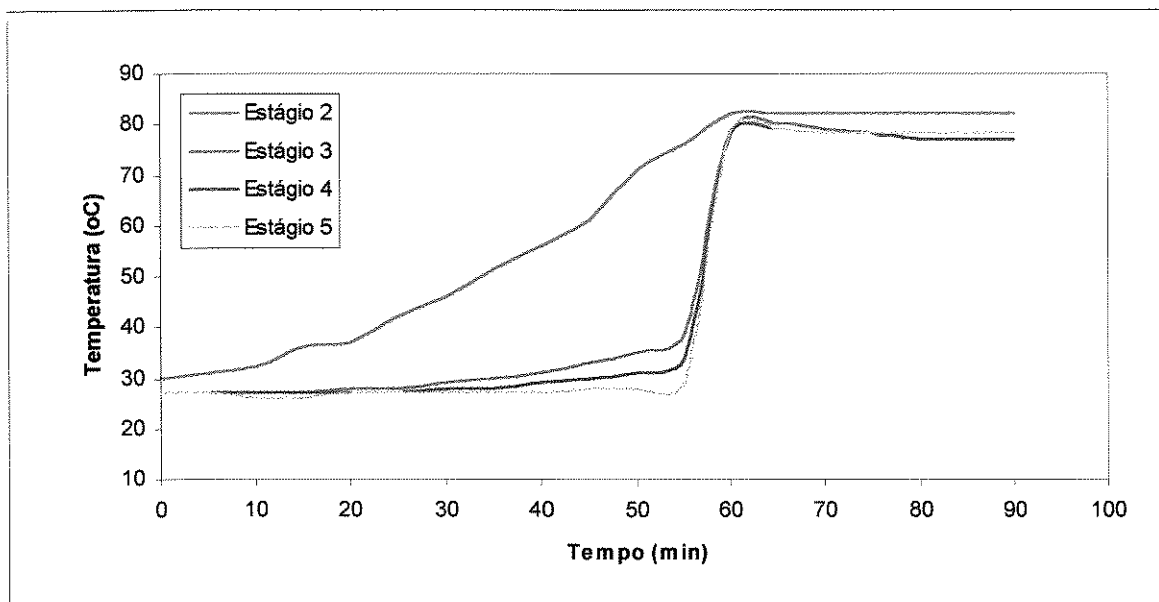


Figura VIII.3 Perfil de temperatura em função do tempo (coluna sem isolamento – Ensaio 7)

VIII.2.2 Coluna com isolamento térmico

Procedimento similar ao descrito no item VIII.2.1 foi utilizado na determinação do estado estacionário na coluna de destilação com isolamento térmico. Observa-se, na Figura VIII.4 que, comparando-se à Figura VIII.3, o tempo para o alcance do estado estacionário foi reduzido (25 minutos) para todos os estágios. A descrição do estado estacionário (Figura VIII.4) mostra o comportamento térmico dos estágios 2, 3, 4 e 5, similar aos demais estágios não especificados nesta figura.

Os resultados obtidos, nesta avaliação, permitiram identificar a influência do isolamento térmico nos processos de separação por destilação e sua relevância na economia de energia.

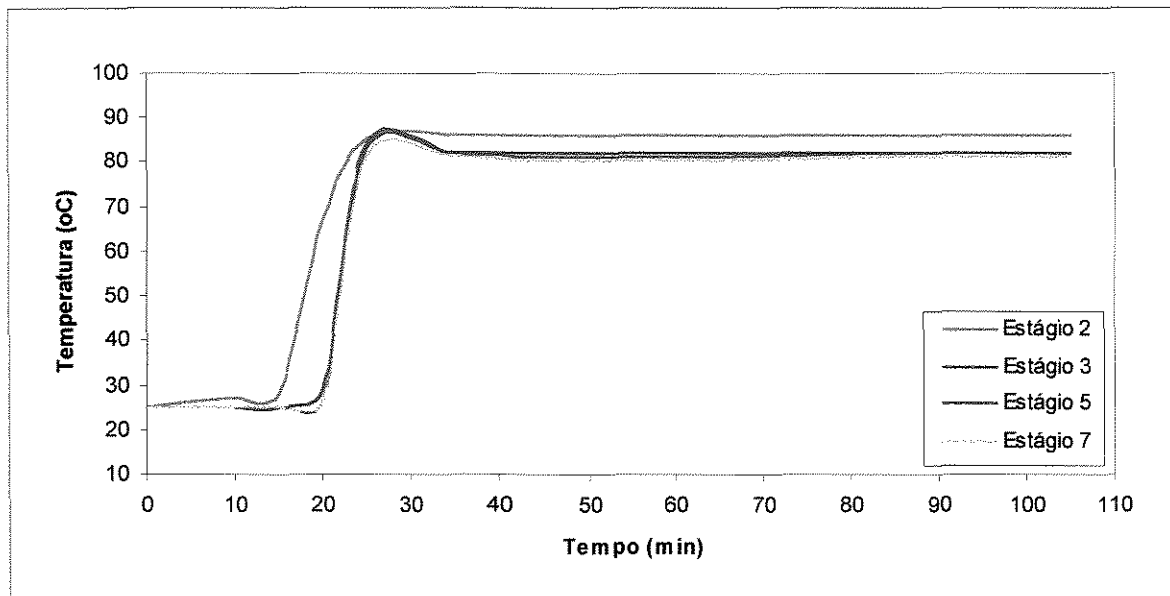


Figura VIII.4 Perfil de temperatura em função do tempo (coluna com isolamento – Ensaio 9)

Ao contrário do que ocorre com a coluna sem isolamento térmico, observa-se, na Figura VIII.4, que a diferença de temperatura entre o estágio 2 e os demais é reduzida, o que não ocorre na Figura VIII.3, onde o estágio 2 apresenta um ΔT maior ao observado entre os estágios 3 e 4, por exemplo. Portanto, o isolamento permitiu uma elevação progressiva da temperatura em todos os estágios em virtude da minimização das perdas de calor para o ambiente.

Para melhor avaliar a influência do isolamento térmico sobre o perfil de temperatura, a Figura VIII.5 mostra os perfis obtidos com a coluna sem isolamento e com isolamento térmico. De acordo com a figura, fica claro que a perda de calor para o meio é acentuada para a coluna sem isolamento. Esta diferença passa a ter um grande significado quando se compara os dados obtidos por simulação (a ser demonstrado no Capítulo IX). O fato do modelo supor a condição de processo adiabático, gera grandes desvios quando os perfis de temperatura experimentais são comparados com os simulados. Quando do isolamento da coluna, estes desvios passam a ser bem menores.

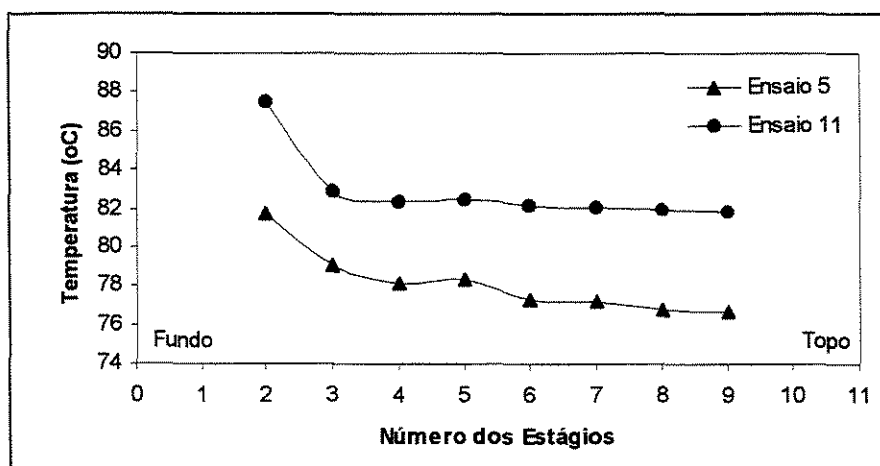


Figura VIII.5 – Perfis de temperatura na fase líquida para coluna sem isolamento térmico (Ensaio 5) e com isolamento térmico (Ensaio 11)

Os ensaios realizados permitiram, portanto, o conhecimento operacional da coluna e a determinação do tempo necessário para o alcance do estado estacionário. Além do mais, a comparação entre os perfis de temperatura (Figura VIII.5) mostra a influência do isolamento térmico da coluna, condição ideal para a obtenção dos dados com alta precisão. O uso do isolamento térmico proporciona uma redução significativa no consumo de energia, uma vez que se alcança rapidamente o estado estacionário, reduzindo, assim, o tempo de operação. De uma maneira geral, os resultados apresentados permitiram avaliar a capacidade operacional da coluna.

VIII.3 Perfis de Concentração e Temperatura Característicos da Coluna de Destilação

Os perfis de concentração e temperatura no interior de uma coluna de destilação convencional possuem características que a diferenciam daquelas observadas em unidades de destilação extrativa ou azeotrópica. O comportamento das concentrações e da temperatura, ao longo da coluna de destilação, é avaliado

neste item. Na representação dos perfis de concentração e temperatura, descritos neste trabalho, o estágio 1 corresponde ao refeedor da coluna e o estágio 10 ao condensador.

VIII.3.1 Análise dos perfis de concentração

A obtenção do perfil de concentração em uma coluna de destilação de pratos envolve dificuldades bem menores do que em uma coluna de recheios. Nas colunas de pratos, os estágios são perfeitamente identificáveis, existindo em cada um deles uma grande quantidade de líquido retido. Isso possibilita a retirada de amostras da fase líquida em cada estágio sem maiores problemas, sendo relativamente simples evitar a coleta de amostras contaminadas pela fase vapor.

O conhecimento dos perfis de concentração permite uma análise qualitativa e quantitativa da distribuição dos componentes em uma coluna de destilação. Por se tratar de uma coluna operada a refluxo total, não é possível identificar as regiões de alimentação, de esgotamento e retificação, características das colunas de destilação contínuas. Tal comportamento é visualizado nas Figuras VIII.6 e VIII.7. A introdução da alimentação modifica a taxa de líquido, ou de vapor ou de ambas as fases, dependendo da condição térmica assumida, o que proporciona perturbações dos fluxos internos da coluna. Como se observa nas figuras citadas, as frações mássicas e molares não apresentam tais perturbações ao longo da coluna, característica do modo de operação, ou seja, sem alimentação e sem retirada de produto de fundo e de topo. Além disso, os perfis molares e mássicos possuem o mesmo comportamento qualitativo. É digno lembrar que os dados foram obtidos em condições de regime permanente.

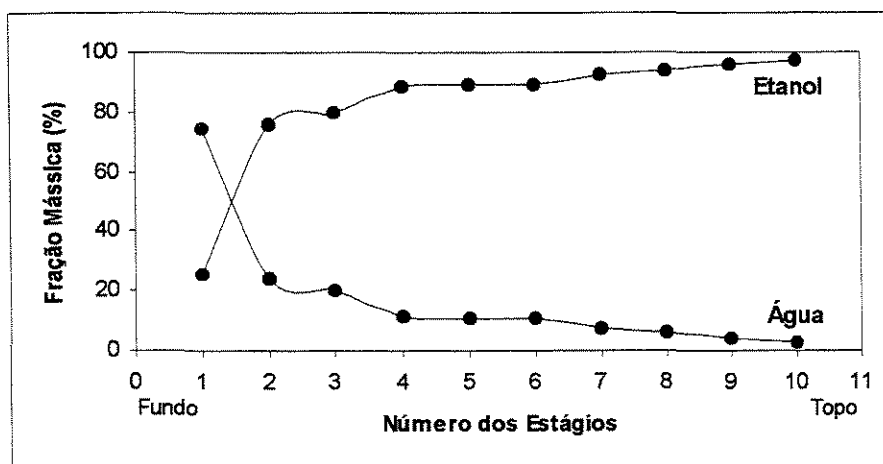


Figura VIII.6 – Perfis das frações mássicas na fase líquida (Ensaio 7)

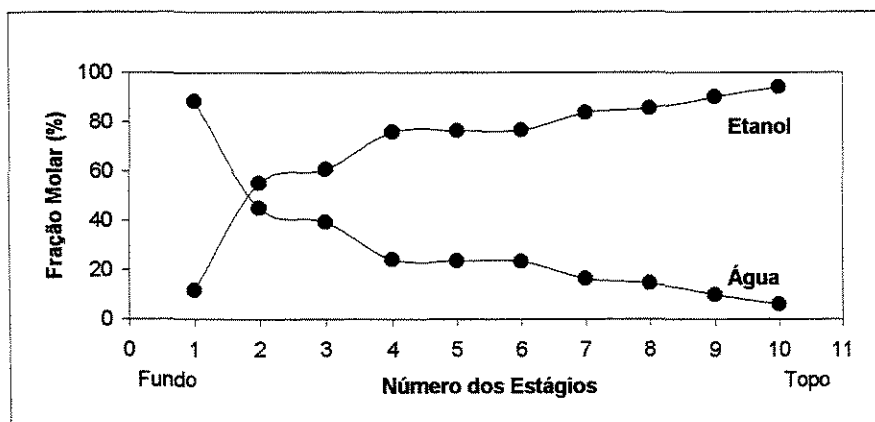


Figura VIII.7 – Perfis das frações molares na fase líquida (Ensaio 7)

O comportamento das frações molares, descrito nesta seção, é caracterizado pelo aumento da concentração do componente mais volátil na corrente interna do líquido em direção ao topo da coluna e a diminuição deste componente no fundo do equipamento. Este processo ocorre mediante transferência de massa e calor descrita através dos fenômenos de condensação e vaporização parcial em cada estágio da coluna de destilação. Quando os fenômenos de transferência de massa e calor ocorrem simultaneamente, a composição e a temperatura interfacial devem estar em equilíbrio entre si

seguindo o diagrama de fases. Para manter esta condição deve ocorrer a evaporação ou a condensação parcial na interface para tornar o fluxo de calor diferente nas duas fases. Neste processo, ocorre a transferência do componente mais volátil da fase líquida para a fase vapor, enquanto que o componente menos volátil é transferido da fase vapor para a fase líquida, mediante condensação parcial.

A progressão destes fenômenos ocasiona o enriquecimento do componente mais volátil em direção ao topo da coluna, cujas fases envolvidas são mantidas nas condições de saturação. As condições da carga para cada ensaio foram avaliadas e descritas no Apêndice A, que ilustra o comportamento das frações mássicas e molares dos componentes envolvidos ao longo da coluna de destilação, onde se observa o enriquecimento do componente mais volátil no topo da coluna e o seu conseqüente esgotamento no fundo. A análise comparativa sobre a influência das condições da carga térmica foram avaliadas no item VIII.4.

A Figura VIII.8 mostra como variam as concentrações de um estágio para outro ao longo da coluna. Observa-se uma dificuldade crescente em concentrar o componente mais volátil (etanol) à medida que suas composições aproximam-se dos componentes puros. Pode ser observado também que as frações molares na fase líquida se distribuem de 6,89% no refeedor a 77,8% no condensador, para esta condição particular de operação. Por outro lado, as frações molares na fase vapor se distribuem entre 44,8% no refeedor a 80,3% no condensador. Apesar de não se dispor de dados referentes à fase vapor, o emprego da curva de equilíbrio presente na Figura VI.2 permitiu a determinação da composição do etanol em equilíbrio com o líquido na fase vapor. Estes dados permitiram demonstrar, portanto, o comportamento do etanol em ambas as fases, conforme Figura VIII.8.

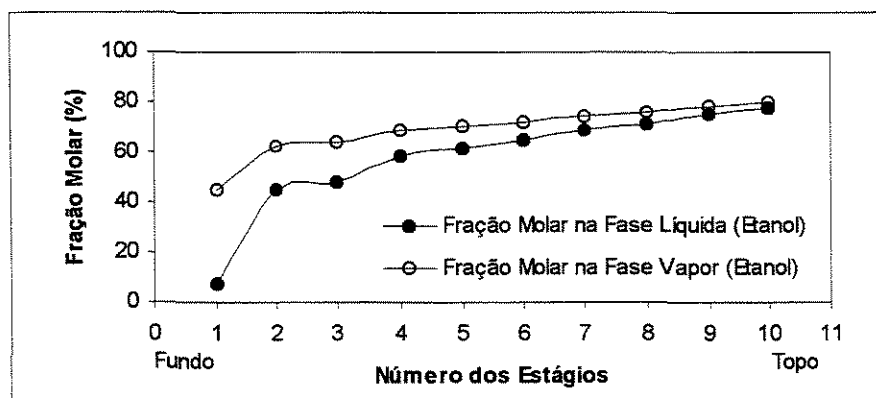


Figura VIII.8 Variação das composições ao longo da coluna (Ensaio 11)

VIII.3.2 Análise dos perfis de temperatura

Avaliou-se, neste trabalho, o comportamento térmico ao longo da coluna, como descrito na Figura VIII.9, em regime permanente. Observa-se, nesta figura, o aumento da temperatura do topo para o fundo da coluna, seguindo a tendência das frações molares dos componentes, descrito no item VIII.3.1. A variação média de temperatura neste processo situou-se entre 76°C e 99°C, faixa dependente das condições de carga e do isolamento da coluna. Apesar de não haver alimentação e a retirada de produtos ao longo da coluna de destilação, observa-se um ligeiro aumento da temperatura no estágio 5, decorrente de erro de leitura experimental.

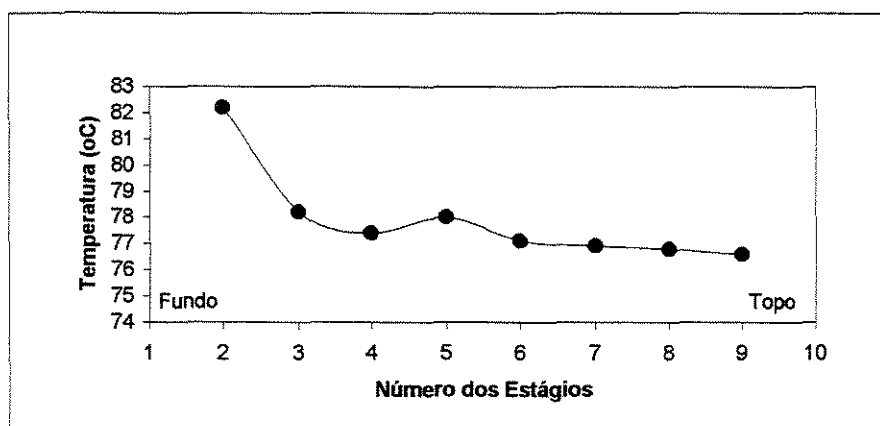


Figura VIII.9 – Perfil de temperatura na fase líquida (Ensaio 7)

VIII.4 Influência da Carga Térmica sobre o Comportamento da Coluna de Destilação

Um estudo realizado por NEUBURG et al. (1994) em uma coluna de destilação com 10 pratos perfurados, com 5,65 cm de diâmetro, utilizando o sistema etanol/água, mostrou a influência da carga térmica fornecida ao refeedor sobre o comportamento da mistura. Para isto, variaram a energia fornecida ao refeedor em condições fixas da alimentação e observou o efeito sobre as composições e temperatura na fase líquida. Os resultados mostraram que, à medida que a energia fornecida ao refeedor aumentava, as composições na fase líquida diminuía.

De acordo com NEUBURG et al. (1994), tal comportamento está relacionado com os altos fluxos de vapor na coluna, o que acarreta uma redução na inclinação da linha de operação. Para avaliar a influência da carga térmica sobre o perfil de temperatura, o autor promoveu alterações na carga térmica e observou a diminuição das temperaturas ao longo da coluna com a diminuição da carga térmica e o aumento das concentrações do componente mais volátil.

Para uma melhor compreensão do funcionamento da coluna de destilação e para avaliar o efeito da carga térmica sobre o comportamento da mistura, análise similar ao estudo realizado por Neuburg foi desenvolvido neste trabalho. Para tanto, os ensaios foram divididos em 4 grupos em conformidade com a composição do componente mais volátil na carga inicial (tabela VIII.1).

Tabela VIII.1 - Agrupamento dos Ensaios

Grupos	Ensaios	Composição da Alimentação (% Etanol)		Composição do Destilado (% Etanol)		Calor no Refervedor (J/h)
		Fração Mássica	Fração Molar	Fração Mássica	Fração Molar	
I	17*	7,9	3,2	95,2	88,6	0,147E8
	12*	8,7	3,6	88,1	74,3	0,193E8
	13*	10,3	4,3	91,6	81,0	0,192E8
II	04	15,3	6,6	89,0	76,0	0,260E8
	11*	16,9	7,4	90,0	77,9	0,194E8
	03	18,1	7,9	95,8	89,9	0,238E8
III	10*	29,8	14,3	85,4	69,6	0,226E8
	09*	30,4	14,6	89,3	76,5	0,198E8
	08	32,8	16,0	91,0	79,81	0,393E8
IV	06	34,2	16,9	88,7	75,5	0,237E8
	07	34,4	17,0	97,6	94,1	0,323E8
	05	35,4	17,7	90,7	79,2	0,230E8

* Ensaios realizados com a coluna termicamente isolada.

O fato do ensaio 7 apresentar fração mássica e molar de etanol no destilado maior que a do azeótropo (causado por contaminação da amostra durante a preparação para análise ou até mesmo por erro na análise) levou a realização de um novo ensaio (Ensaio 17).

Analisando-se a tabela VIII.1, tem-se as seguintes observações:

1. Ensaios 12 e 13: para a mesma carga térmica, maior fração de etanol no destilado é obtida para maior concentração do componente mais volátil na alimentação.
2. Ensaios 10 e 6: para cargas térmicas quase iguais, maior fração do etanol é obtida para maior concentração do mesmo na alimentação. Mesmo comportamento obtido no item 2.
3. Ensaios 12 e 17: para frações de alimentação próximas, menor carga térmica aumenta a fração do componente mais volátil na corrente de destilado, conforme os estudos de NEUBURG et al. (1994).
4. Ensaios 5 e 6: mantendo-se fixa a carga térmica, o ensaio com maior fração do componente mais volátil na alimentação proporciona um destilado com maior fração do componente mais volátil. Mantendo-se constante a fração da alimentação (na faixa de 34%), nota-se que o aumento da carga térmica diminui a fração do componente mais volátil na corrente de destilado, conforme observado no item 4.
5. Ensaios 9 e 10: mantendo-se constante a fração do componente mais volátil na alimentação, reduz-se a fração molar do componente mais volátil no destilado com o aumento na carga térmica, conforme observações 4 e 5.

Uma análise global demonstrou que os ensaios envolvendo colunas isoladas (9, 10, 11, 12, 13 e 17) proporcionam menor consumo de energia em comparação com os ensaios 3, 4, 5, 6, 7 e 8 (colunas sem isolamento térmico). Isto confirma, mais uma vez, a influência do isolamento térmico em uma coluna de destilação.

Com o intuito de melhor avaliar a influência da carga térmica sobre o comportamento da coluna de destilação, três novos ensaios foram realizados, fixando-se, desta vez, as frações iniciais de alimentação, 35,6% em fração mássica de etanol, tendo-se variado a carga térmica e observado a sua influência sobre o perfil de temperatura. As cargas térmicas utilizadas foram: 0,0936E8 J/h, 0,115E8 J/h e 0,133E8 J/h. Na Figura VIII.10, observa-se o comportamento obtido e no apêndice A encontram-se as características relacionadas aos ensaios 14, 15 e 16.

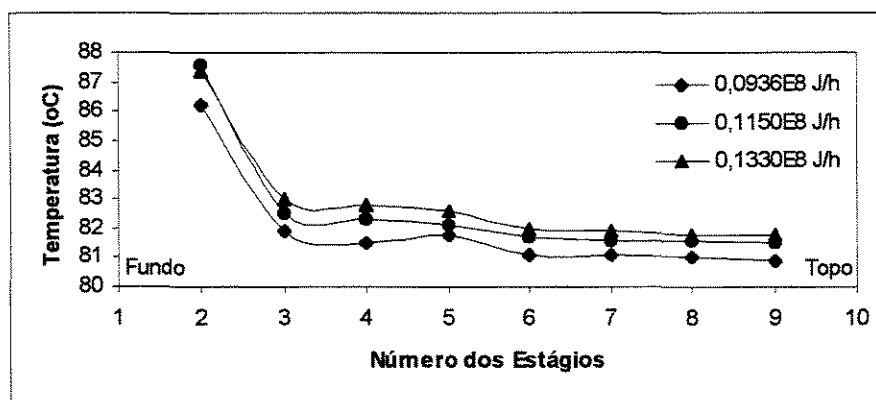


Figura VIII.10 Influência da carga térmica sobre o perfil de temperatura (Ensaios 14, 15 e 16)

A partir da Figura VIII.10 é possível identificar a influência da carga térmica sobre o comportamento da temperatura, constatando-se que à medida que se aumenta a carga térmica, aumenta a temperatura em cada estágio da coluna de destilação. Tal comportamento, também observado por NEUBURG et al. (1994), está relacionado com o aumento do fluxo de vapor no interior da coluna. Este incremento no fluxo de vapor tende a reduzir o tempo de contato entre as fases, o que é prejudicial para o bom desempenho do equipamento. A redução no tempo de contato impede que as fases líquida e vapor interajam entre si por mais tempo, afetando os fenômenos de transferência de massa e calor e, consequentemente, influenciando na eficiência do processo. As temperaturas

tendem a aumentar, conforme observado na Figura VIII.10, acarretando uma significativa redução na composição do componente mais volátil no topo da coluna de destilação.

VIII.5 Avaliação da Eficiência de Murphree

Para a determinação da eficiência de transferência de massa foi utilizado o conceito desenvolvido por Murphree, cujo procedimento de cálculo encontra-se descrito no Capítulo VI. Os dados aqui apresentados estão divididos em 4 grupos caracterizados pelo desempenho da eficiência ao longo da coluna de destilação obtida para cada ensaio avaliado, de acordo com a similaridade no comportamento.

Ensaio 6 e 9

Conforme se observa na Figura VIII.11, a eficiência não se mantém constante ao longo da coluna de destilação, variando significativamente do fundo ao topo. Excetuando os valores correspondentes aos estágios 2 e 8, nota-se que a eficiência tende a diminuir em direção ao condensador, estando este parâmetro compreendido entre 5 e 80%. Este fato confirma os argumentos de BIDDULPH et al. (1986) que constataram, experimentalmente, o aumento da eficiência do topo para o fundo da coluna. A eficiência descrita na Figura VIII.11 confirma que altos valores de eficiência são possíveis na região de baixa concentração de etanol. Isto é devido ao elevado valor da inclinação da curva de equilíbrio nesta região, resultando em elevados gradientes de concentração. Os ensaios 6 e 9 têm o mesmo comportamento, mas os valores são diferenciados, mostrando que as condições de operação afetam o comportamento da eficiência. No refeedor (estágio 1) e no condensador (estágio 10) a eficiência atinge valores acima de 100%.

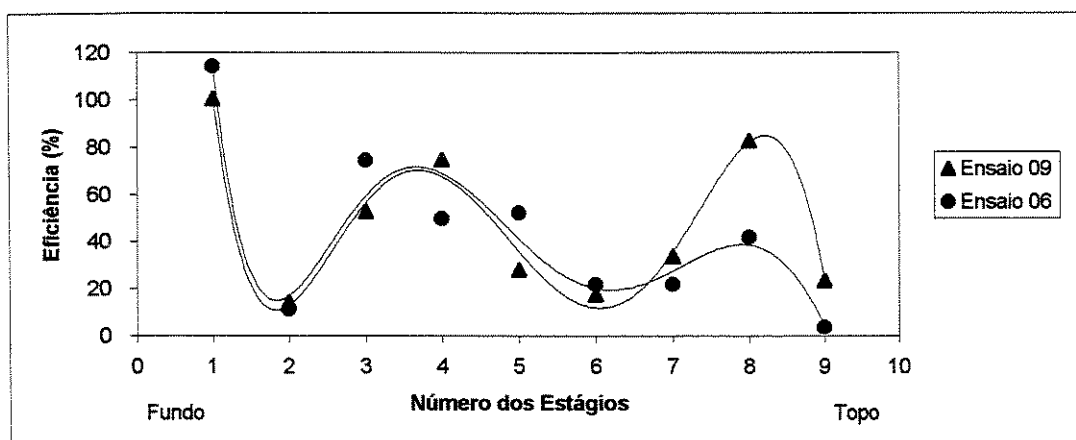


Figura VIII.11 – Perfis de eficiência (Ensaios 6 e 9)

Ensaios 8 e 11

Na Figura VIII.12, observa-se os perfis de eficiência obtidos para os ensaios 8 e 11. Ao contrário do que ocorre com os ensaios 6 e 9, nota-se que a eficiência tende a aumentar em direção ao topo da coluna, quando o estágio 1 não é considerado. Para o estágio 1 (refervedor), a eficiência atinge valores acima de 100%. A eficiência negativa obtida no estágio 3 (ensaio 8) está relacionada à diminuição da composição de etanol no prato, que passou de 73,1% do estágio 2 para 71% no estágio 3. Neste grupo apenas um estágio apresentou eficiência acima de 100%. Os demais estiveram compreendidos no intervalo [0,1]. Avaliando-se as condições dos ensaios 8 e 11, nota-se que a condição de alimentação afeta os valores da eficiência ao longo da coluna de destilação, promovendo um comportamento diferenciado ao obtido na Figura VIII.11.

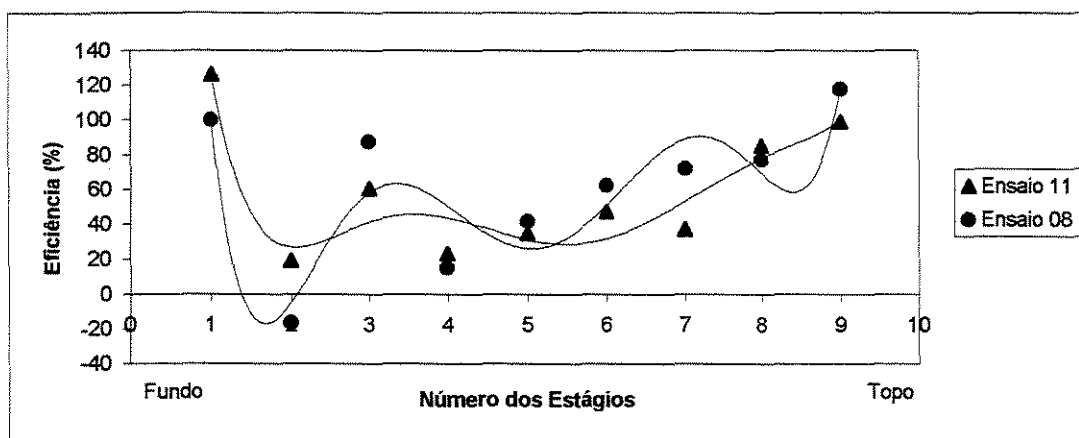


Figura VIII.12 – Perfis de eficiência (Ensaio 8 e 11)

Ensaio 10 e 12

Na Figura VIII.13 são avaliados os perfis de eficiência para os ensaios 10 e 12, cujas características de operação estão presentes no Apêndice A. Contrariamente as Figuras VIII.11 e VIII.12, não se observa na Figura VIII.13, aumentos significativos nos valores da eficiência do topo ao fundo da coluna. Desconsiderando os estágios 1 e 10, cujas eficiências são maiores que 100% e os estágios 2 e 8 que apresentam eficiências negativas, para o ensaio 10, os valores de eficiência mantiveram-se entre 0 e 100%.

Para a obtenção dos dados dos ensaios 10 e 12, a coluna foi previamente isolada para diminuir a dissipação de energia térmica que induz a condensação do vapor nas paredes da coluna, o que pode promover erros facilmente identificáveis no comportamento dos dados experimentais, principalmente relacionados a temperatura. Estas diferenças, tanto no modo quanto nas condições de operação da coluna originam diferentes comportamentos nos perfis de eficiência para os ensaios até agora analisados.

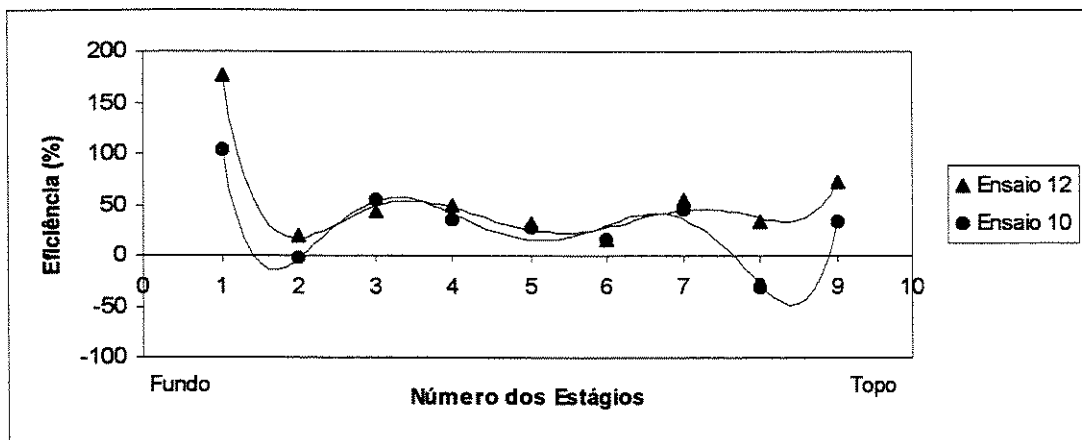


Figura VIII.13 – Perfis de eficiência (Ensaio 10 e 12)

Ensaio 4, 5 e 13

Entre todas as figuras avaliadas, a Figura VIII.14, que abrange os perfis de eficiência para os ensaios 4, 5 e 13, foi a que apresentou os resultados com maior dispersão. As eficiências variaram drasticamente, atingindo valores negativos e maiores que 100%.

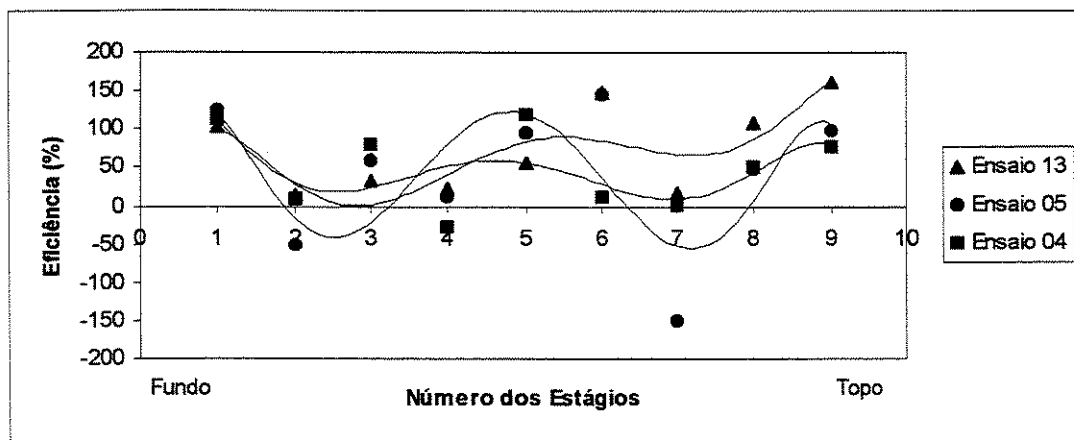


Figura VIII.14 – Perfis de eficiência (Ensaio 4, 5 e 13)

VIII.6 Avaliação da Eficiência de O'Connell

Com os dados experimentais (temperatura e composição) obtidos ao longo da coluna destilação, procedeu-se ao cálculo da eficiência de O'Connell de acordo com a metodologia descrita no Capítulo VI. Desde que as constantes de equilíbrio, calculadas através do simulador comercial PRO® II, variam em função da temperatura na faixa de 78 a 100°C, o cálculo da constante de equilíbrio para os ensaios 3, 4, 5, 6, 7 e 8 fica comprometido pelo fato de apresentarem temperaturas menores que 78°C (vide apêndice A), ocasionadas pelo excesso de calor dissipado ao ambiente. Os perfis de eficiência de O'Connell são apresentados nas Figuras VIII.15, VIII.16, VIII.17 e VIII.18.

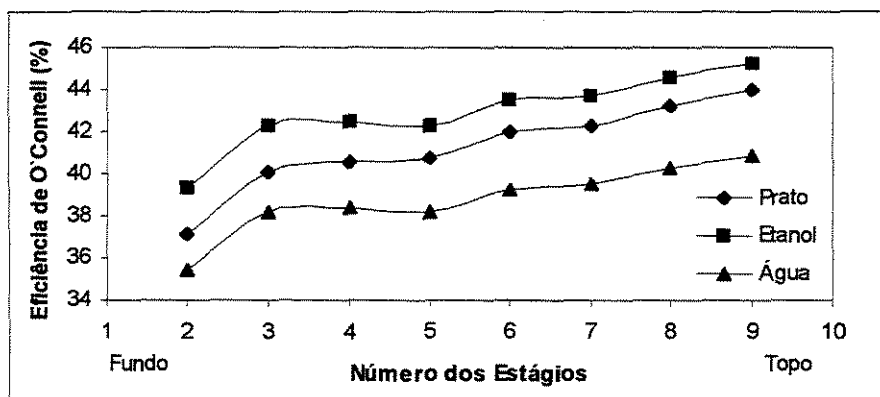


Figura VIII.15 – Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 9)

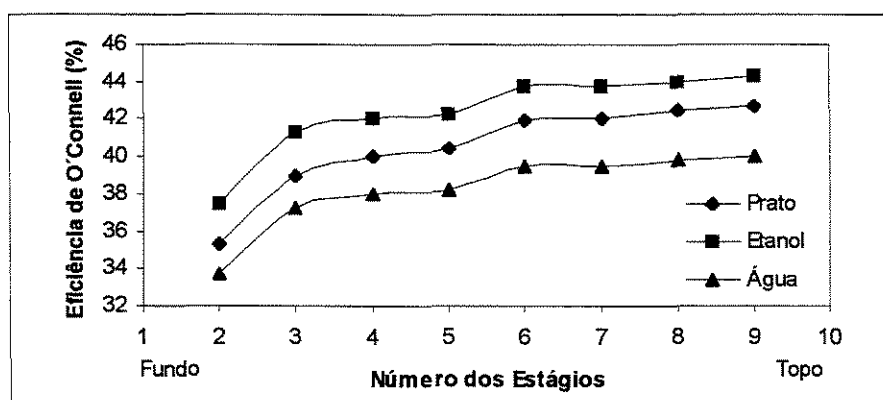


Figura VIII.16 – Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 10)

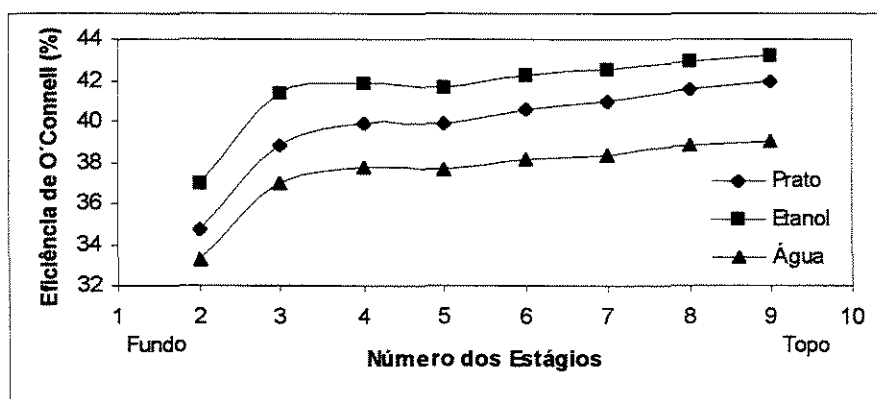


Figura VIII.17 – Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 11)

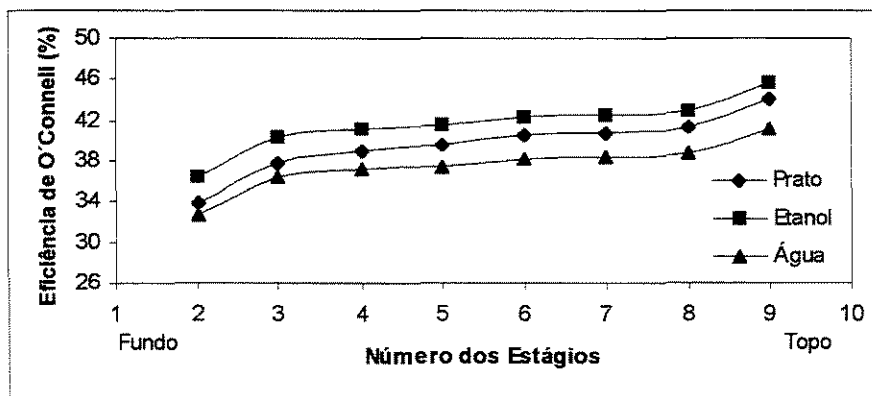


Figura VIII.18 – Perfis de eficiência de O'Connell (Ensaio 12)

De acordo com as Figuras VIII.15, VIII.16, VIII.17 e VIII.18, é possível observar que:

- a eficiência de prato e dos componentes aumenta em direção ao topo da coluna de destilação;
- os valores da eficiência do componente mais volátil são maiores ao longo da coluna, enquanto que a eficiência do componente de menor volatilidade possui valores menores;
- a eficiência de prato possui valores intermediários aos dos componentes, aproximando-se mais do perfil da eficiência do componente mais volátil nos ensaios 9, 10 e 11, pois é regida pelos parâmetros da mistura;
- para o ensaio 12, houve uma maior aproximação entre os perfis de eficiência;
- no âmbito geral, as eficiências do prato variaram de 33 a 44% em direção ao topo. Para o etanol e para a água, as eficiências variaram entre 36 a 46% e 33 a 43%, respectivamente;
- as maiores variações nos valores de eficiência estão situadas na região próxima ao refeedor, região que apresenta também maiores variações nos perfis das frações molares.

Uma comparação com os dados obtidos através de simulação (ensaios 11 e 12) utilizando o programa com a modelagem de estágios de equilíbrio, mostrou um comportamento similar aos obtidos experimentalmente.

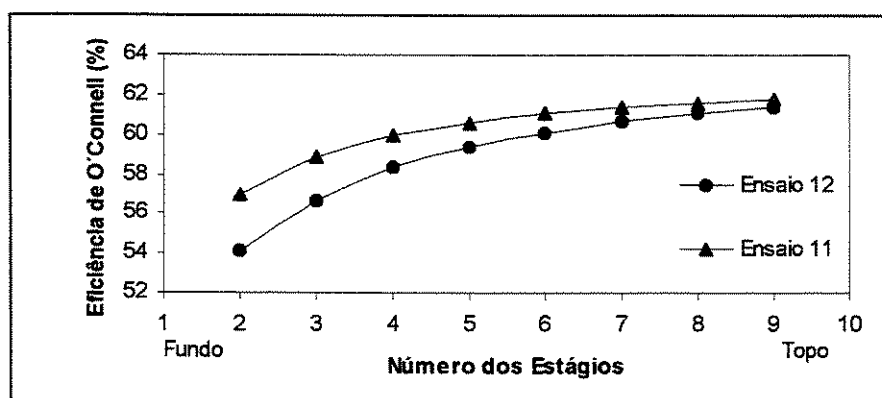


Figura VIII.19 – Perfis de eficiência de O'Connell simulados para o prato (Ensaios 11 e 12)

De acordo com a Figura VIII.19, observa-se que, apesar da eficiência de prato variar entre 54 e 62%, esta tende a aumentar em direção ao topo da coluna de destilação. Logo, é necessário avaliar a causa deste aumento. Conforme a equação (VI.31), a eficiência de O'Connell é função da volatilidade relativa e da viscosidade. Portanto, conhecendo-se o comportamento de tais parâmetros ao longo da coluna de destilação, pode-se identificar as razões para o aumento da eficiência em direção ao topo da coluna de destilação. Em virtude da volatilidade relativa ser função da temperatura, seu comportamento é similar ao observado nos perfis de temperatura, ou seja, diminui em direção ao topo. Entretanto, a viscosidade aumenta na mesma direção. Logo, a viscosidade é o parâmetro de maior influência no comportamento da eficiência de O'Connell.

Ao contrário dos perfis de eficiência obtidos utilizando o conceito de Murphree, os resultados oriundos do emprego do conceito de O'Connell mostram comportamento similar para todos os ensaios avaliados, estando relacionado com as próprias variáveis envolvidas no cálculo.

CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentados os comportamentos das frações dos componentes etanol e água e da temperatura ao longo da coluna de destilação, onde foi possível se observar um aumento na concentração do componente mais volátil em direção ao topo da coluna, seguido de uma redução na temperatura, características comuns em colunas de destilação convencional operada a refluxo total. Além disto, observou-se também a influência do isolamento térmico sobre o comportamento dos perfis de temperatura e da carga térmica. O isolamento proporciona menor perda de calor ao ambiente, além de reduzir o consumo de energia, fator de fundamental importância nos processos industriais. O aumento na carga térmica fornecida ao refeedor, tende a aumentar a temperatura ao longo do equipamento e, conseqüentemente, reduzir a fração do componente mais volátil na corrente de destilado.

Pôde-se observar que valores de eficiência de Murphree maiores que 100% e menores que zero foram obtidos nas avaliações experimentais realizadas neste trabalho. Estes desvios geralmente surgem em pratos adjacentes, onde pequenos erros na medida das composições causam erros. Embora os resultados tenham apresentado grande dispersão, as eficiências situaram-se entre 0 e 100%. TOOR (1957), citado por SEADER (1989), mostrou que os valores de eficiência de sistemas multicomponentes podem situar-se fora do intervalo [0,1], desvio este relacionado com situações físicas como a difusão reversa, difusão osmótica e resistência à difusão. Apesar de não se ter trabalhado com um sistema multicomponente, o presente trabalho gerou eficiências maiores que 100% em algumas faixas de composição, como observaram MEDINA, ASHTON e MCDERMOTT (1978) que trabalharam com sistemas multicomponentes e obtiveram valores de eficiências fora do intervalo definido, justificado como função de erros experimentais. A influência que os erros experimentais têm sobre os valores das eficiências de Murphree podem ser enormes. De um modo geral, as

eficiências do tipo “Murphree” estão de acordo com a realidade física, uma vez que seus valores situam-se no intervalo $[0,1]$.

Com relação a eficiência de O’Connell, observou-se um comportamento bastante diferenciado ao obtido com a eficiência de Murphree. Os valores não apresentam variações acentuadas em cada estágio, mostrando tendência uniformizada. Os valores obtidos, utilizando a eficiência de O’Connell, situaram-se na faixa de 32 a 46% ao longo do equipamento.

CAPÍTULO IX

COMPARAÇÃO ENTRE DADOS SIMULADOS E EXPERIMENTAIS

Neste capítulo serão comparados os perfis de temperatura e das frações molares obtidos experimentalmente, com a coluna com e sem isolamento térmico, e por simulação empregando a modelagem de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio, bem como a avaliação estatística dos dados. Deve-se ressaltar que nos modelos o processo adiabático é considerado como condição de contorno. Portanto, é de se esperar que os perfis de temperatura obtidos experimentalmente apresentem maiores desvios quando comparados com os preditos pelos modelos, principalmente aqueles envolvendo coluna sem isolamento térmico.

IX.1 Comparação entre Dados da Modelagem de Estágios de Equilíbrio e Dados Experimentais

Um dos objetivos deste trabalho, conforme indicado anteriormente, é a validação da modelagem de estágios de equilíbrio utilizando-se o programa desenvolvido por BARROS (1997) que incorpora a correlação de eficiência de

Barros e Wolf descrita no Capítulo III, através dos dados experimentais obtidos nos diversos ensaios detalhados neste trabalho. Para tanto, os resultados dos perfis de temperatura e composição, obtidos experimentalmente, foram comparados com os dados simulados. Para efeito de análise, cinco ensaios (5, 6, 8, 11 e 12) foram selecionados, cujas condições de operação estão descritas no apêndice A.

IX.1.1 Avaliação dos dados do ensaio 5

As condições de operação do ensaio 5 foram utilizadas para simular a coluna de destilação com a correlação de Barros & Wolf de forma a se avaliar os perfis de temperatura e das frações molares ao longo do equipamento. Os resultados obtidos desta avaliação estão presentes nas Figuras IX.1 e IX.2. Para este ensaio fez-se uso da especificação 4, que relaciona a fração molar do componente mais volátil no destilado e o calor no refeedor (XD e QR, respectivamente). Da comparação entre os dados experimentais e os simulados, pode-se observar uma boa concordância dos perfis, tanto qualitativa quanto quantitativamente. Convém salientar que estão sendo comparadas variáveis com dimensão bastante variadas, ou seja, fração molares, cuja faixa de valores compreende 0 e 1 e perfis de temperatura com valores na faixa de 70 a 90°C.

Deve-se ressaltar que durante a realização do ensaio 5, a coluna de destilação não havia sido termicamente isolada, mas mesmo assim, os resultados obtidos desta comparação mostram boa concordância quando os perfis de temperatura são comparados. Observa-se que as temperaturas obtidas experimentalmente são, geralmente, menores que as obtidas através de simulações, condição decorrente da ausência do isolamento térmico. Em termos gerais de comportamento dos perfis, maiores temperaturas foram obtidas no fundo da coluna seguida por uma leve estabilização a partir do estágio 5 em direção ao

topo da mesma. Resultados bem coerentes com a condição de operação estudada.

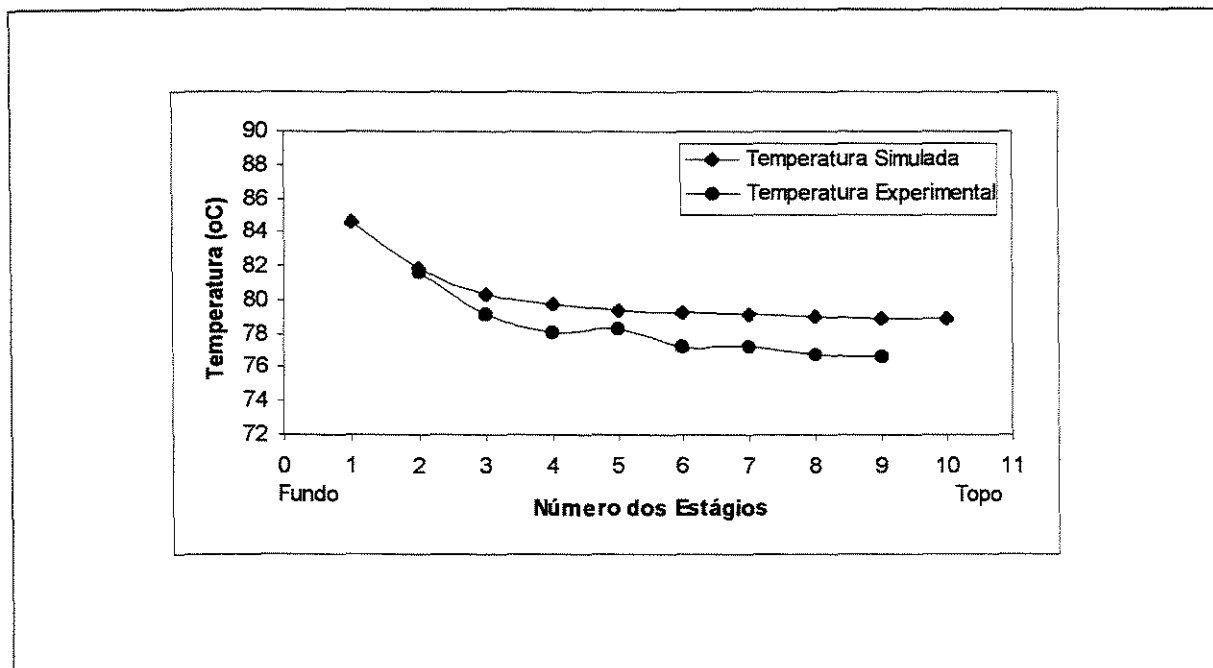


Figura IX.1 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR = 0,230E8 J/h)

Os perfis das frações molares apresentaram uma boa aproximação, similarmente ao comportamento da temperatura para a especificação usada. Como se observa na Figura IX.2, ocorre um aumento gradual das frações molares do componente mais volátil em direção ao topo da coluna e o seu conseqüente esgotamento em direção ao fundo do equipamento. Valores também extremamente coerentes com a realidade física desta condição de operação.

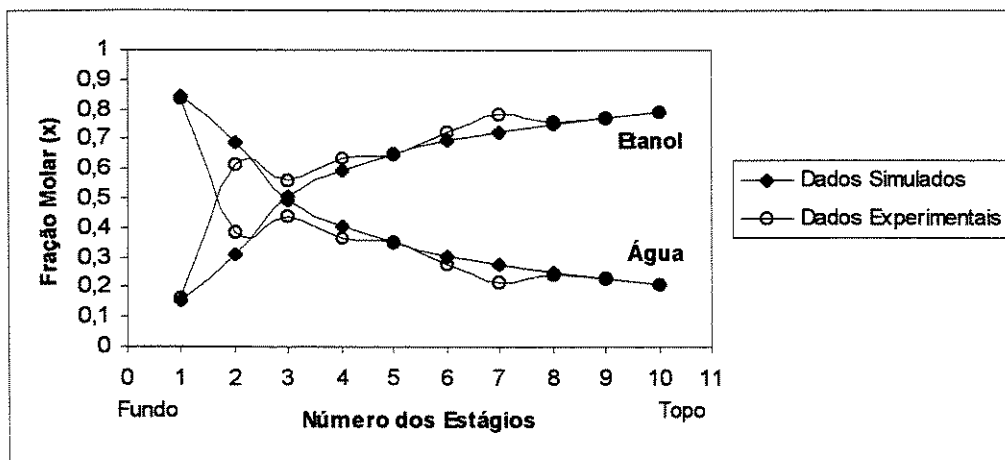


Figura IX.2 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais ((Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR = 0,230E8 J/h)

IX.1.2 Avaliação dos dados do ensaio 6

Para a análise do comportamento dos perfis de temperatura e da composição, do ensaio 6, foram realizadas simulações fazendo-se uso da especificação 4. Comparando-se os dados experimentais e os simulados observa-se, nas Figuras IX.3 e IX.4, uma boa aproximação entre os perfis de temperatura e de composição. Durante a realização do ensaio 6, similarmente ao ensaio 5, a coluna de destilação não havia sido termicamente isolada, entretanto, novamente a proximidade entre os perfis é constatada. Observa-se, também, um comportamento similar ao observado no ensaio 5, isto é, as temperaturas experimentais situaram-se abaixo das temperaturas simuladas. Entretanto, os perfis apresentaram similaridade de comportamento, destacando-se maiores temperaturas na região próxima ao refeedor e menores temperaturas na região próxima ao condensador, com uma leve estabilização deste parâmetro a partir do estágio 5.

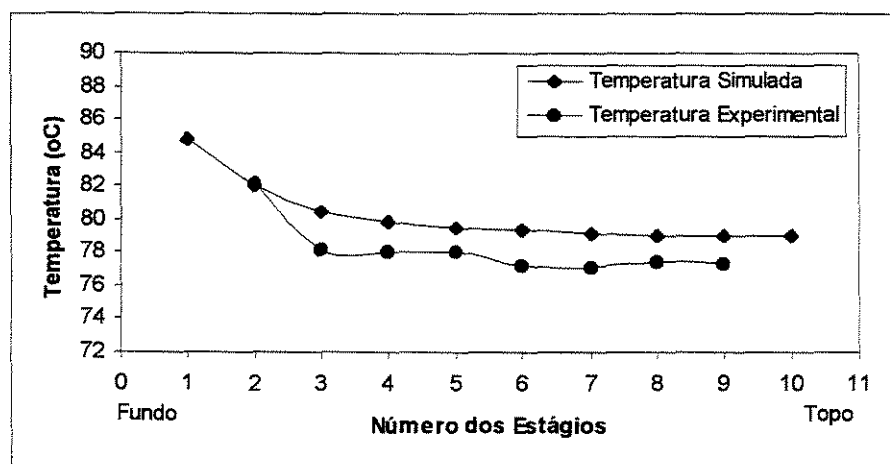


Figura IX.3 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h)

Com relação aos perfis de composição (Figura IX.4), constata-se uma boa aproximação quando da utilização da especificação 4, escolhida pelo fato de relacionar parâmetros obtidos experimentalmente. Este experimento acaba também validando o experimento anterior, uma vez que os dados são razoavelmente similares.

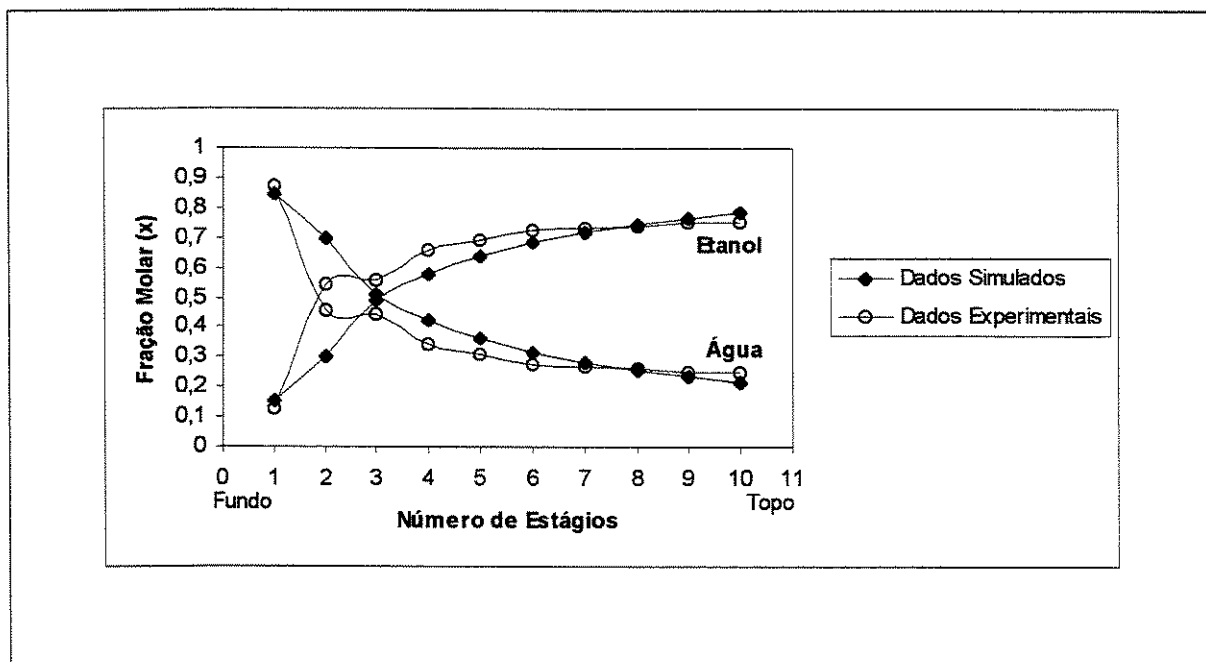


Figura IX.4 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h)

IX.1.3 Avaliação dos dados do ensaio 8

Os dados simulados oriundos da correlação de Barros & Wolf, utilizando-se a especificação 4, foram comparados com os dados do ensaio 8 obtidos com a coluna de destilação sem isolamento térmico, cujos resultados estão descritos na Figura IX.5, na qual constata-se uma boa aproximação entre ambos os perfis. Apesar do não isolamento térmico do equipamento, os perfis de temperatura aproximaram-se acentuadamente. A similaridade no comportamento da temperatura é mantida, isto é, maiores temperaturas na região próxima ao refeedor e menores temperaturas na região próxima ao condensador, com estabilização a partir do estágio 5. Os perfis das frações molares (Figura IX.6), ao longo da coluna de destilação, também apresentaram uma aproximação muito boa.

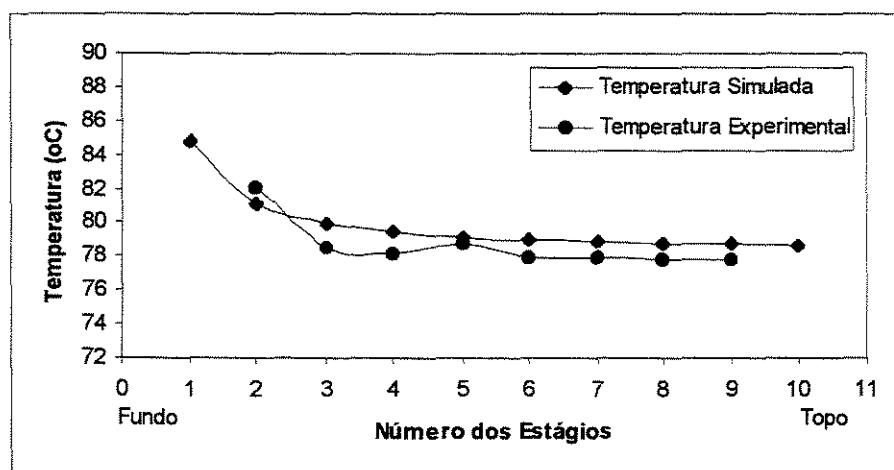


Figura IX.5 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h)

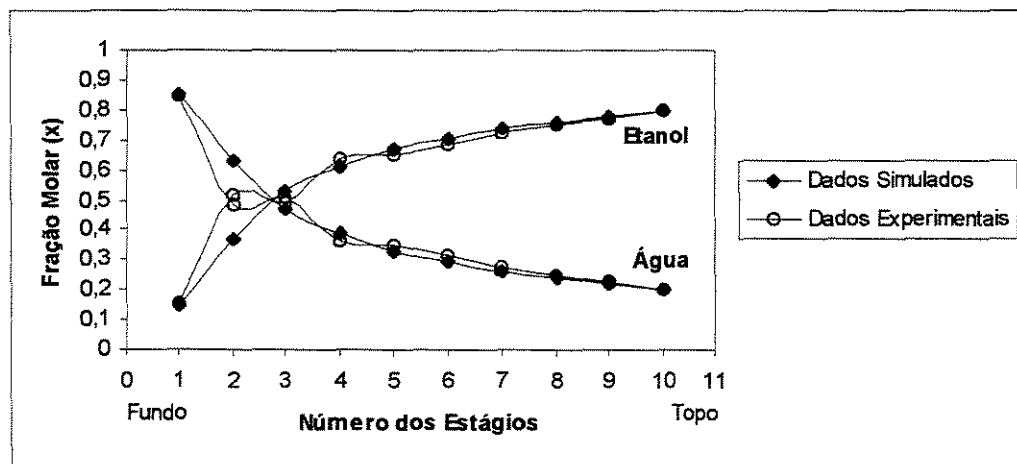


Figura IX.6 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h)

IX.1.4 Avaliação dos dados do ensaio 11

Para a avaliação do ensaio 11 foi usada a correlação de Barros & Wolf, fazendo-se uso da especificação 4, relacionada com a fração do componente mais volátil na corrente de destilado e o calor no refeedor.

Na comparação entre os dados experimentais e os simulados é possível observar, na Figura IX.7, que, ao contrário das observações dos dados dos ensaios 5, 6 e 8 obtidos com a coluna sem isolamento térmico, os perfis obtidos a partir do ensaio 11, com isolamento térmico, se aproximaram acentuadamente. O isolamento térmico utilizado, conforme se observa na figura citada, proporcionou temperaturas experimentais levemente maiores que as temperaturas simuladas, comprovando que o isolamento térmico minimiza a perda de energia para o ambiente.

Novamente observa-se comportamento dos perfis de temperatura similares aos dos ensaios 5, 6 e 8: maiores temperaturas obtidas no fundo, diminuindo em direção ao topo do equipamento. Nesta avaliação observou-se também a estabilização da temperatura acima do estágio 5.

Os perfis de composição apresentaram excelente concordância, principalmente acima do estágio 5, onde se observa praticamente a sobreposição dos perfis. Os maiores desvios foram obtidos apenas nos estágios 2 e 3.

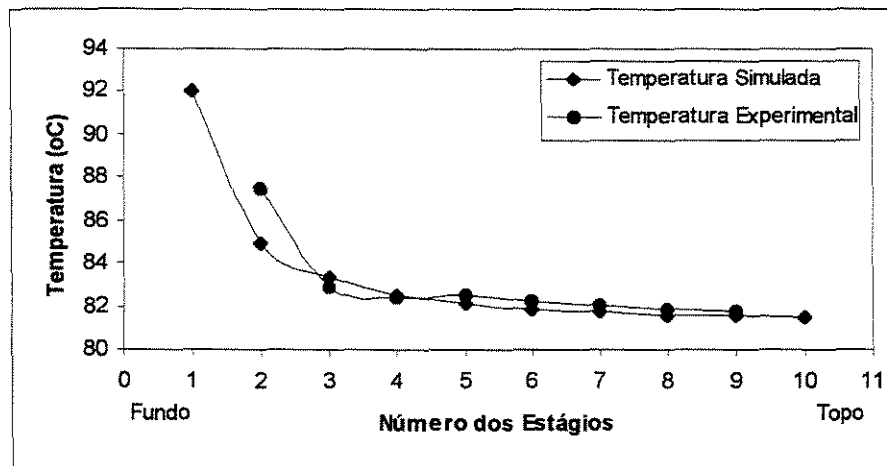


Figura IX.7 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h)

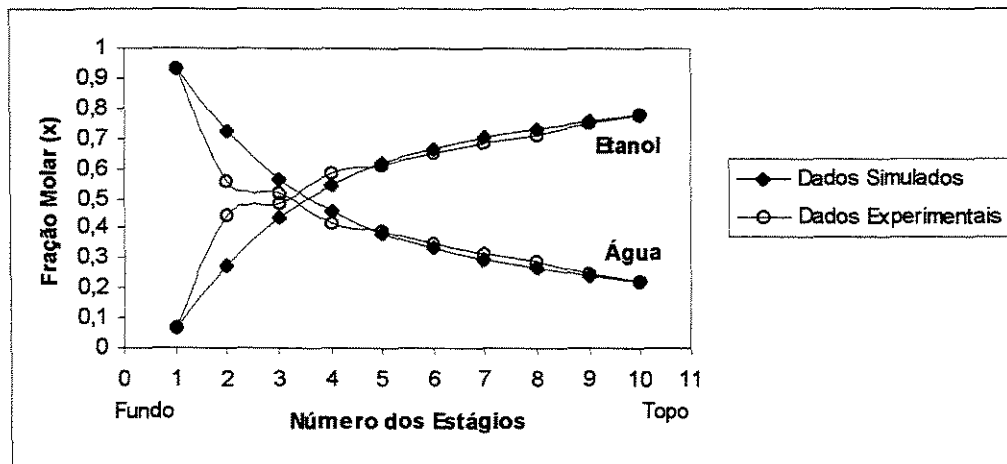


Figura IX.8 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h)

IX.1.5 Avaliação dos dados do ensaio 12

No ensaio 12 fez-se uso novamente da especificação 4, similar em todos os ensaios. Os resultados obtidos desta avaliação encontram-se descritos nas Figuras IX.9 e IX.10. Novamente, os perfis de temperatura apresentam comportamento similar, ou seja, houve, praticamente, a sobreposição dos perfis ao longo do equipamento.

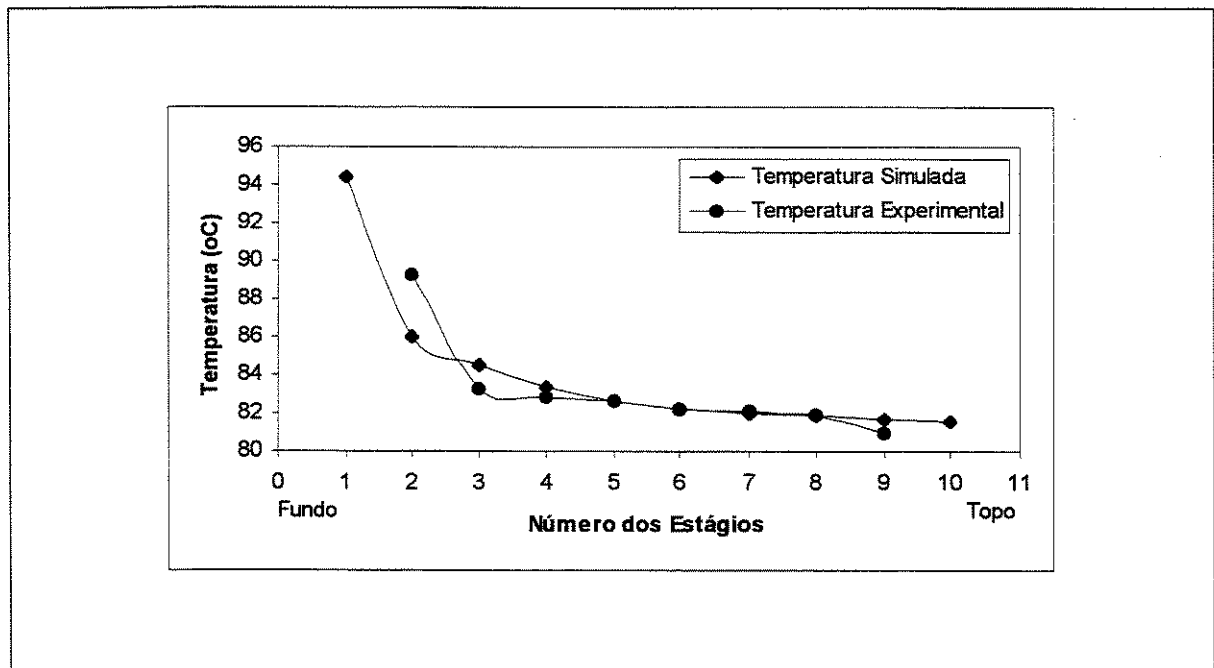


Figura IX.9 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h)

O comportamento dos perfis de temperatura obtidos no ensaio 11 são reproduzidos no ensaio 12. Observou-se que o isolamento térmico proporcionou maior aproximação entre os perfis de temperatura. Ao contrário do que se observa nos ensaios 5, 6 e 8, as temperaturas experimentais passam a ser levemente maiores, principalmente no ensaio 11.

Quando os perfis das frações molares são comparados, os resultados mostram que os comportamentos oriundos dos dados simulados e experimentais são similares, como se observa na Figura IX.10, apresentando ótima concordância quando da utilização da especificação 4.

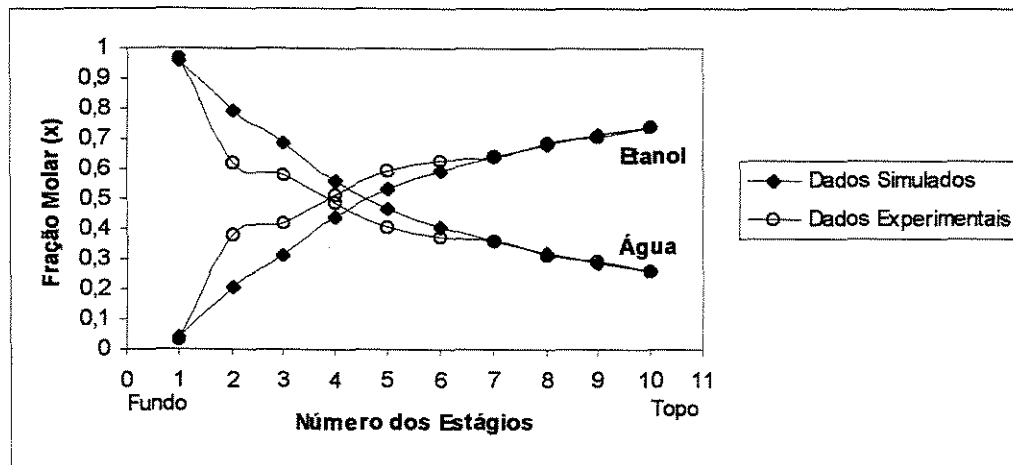


Figura IX.10 – Comparação entre dados simulados (correlação de Barros & Wolf) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h)

Deve-se destacar que em todas as comparações envolvidas nesta análise observa-se uma característica pertinente, isto é, os dados experimentais referentes ao estágio 2 são os que apresentam maiores discrepâncias quando comparados com os dados simulados, principalmente no que diz respeito aos perfis das frações molares. Este comportamento está relacionado à proximidade do estágio 2 com o refeedor. Tal aproximação promove a vaporização do líquido no estágio em questão, comprovado quando da retirada de amostras. Observou-se, durante o trabalho experimental, que havia a retirada de vapor que condensava ao entrar em contato com as paredes da seringa. Se

desconsiderarmos os valores do estágio 2 nesta comparação, os resultados estarão mais próximos dos obtidos por simulação.

IX.2 Avaliação Estatística dos Dados Simulados Utilizando a Modelagem de Estágios de Equilíbrio e os Dados Experimentais

Devido à importância dos resultados obtidos, avaliou-se estatisticamente os dados simulados usando a correlação de Barros & Wolf e os dados experimentais, de forma a se identificar os desvios médios (a diferença entre os dados simulados e os dados experimentais) e as diferenças percentuais médias, definidas pela equação IX.1, para cada um dos ensaios avaliados neste capítulo.

$$\left| \frac{\text{Dados Experimentais} - \text{Dados Simulados}}{\text{Dados Experimentais}} \right| \cdot 100 = \text{Diferença Percentual}$$

(IX.1)

Pode-se observar nas Figuras IX.11, IX.12, IX.13, IX.14 e IX.15 uma boa relação entre os dados simulados e experimentais, com desvios mais acentuados quando da comparação dos dados referentes à temperatura para os ensaios avaliados, principalmente para aqueles envolvendo a coluna sem isolamento, térmico decorrente da maior perda de calor para o ambiente. Com relação às frações molares, nota-se maior concordância entre os dados avaliados para todos os ensaios (coluna termicamente isolada e não isolada), principalmente na região de maior concentração do componente mais volátil.

A seguir são apresentados os gráficos comparativos e tabelas contendo os valores dos desvios médios e das diferenças percentuais médias para os ensaios mencionados.

IX.2.1 Avaliação estatística do ensaio 5

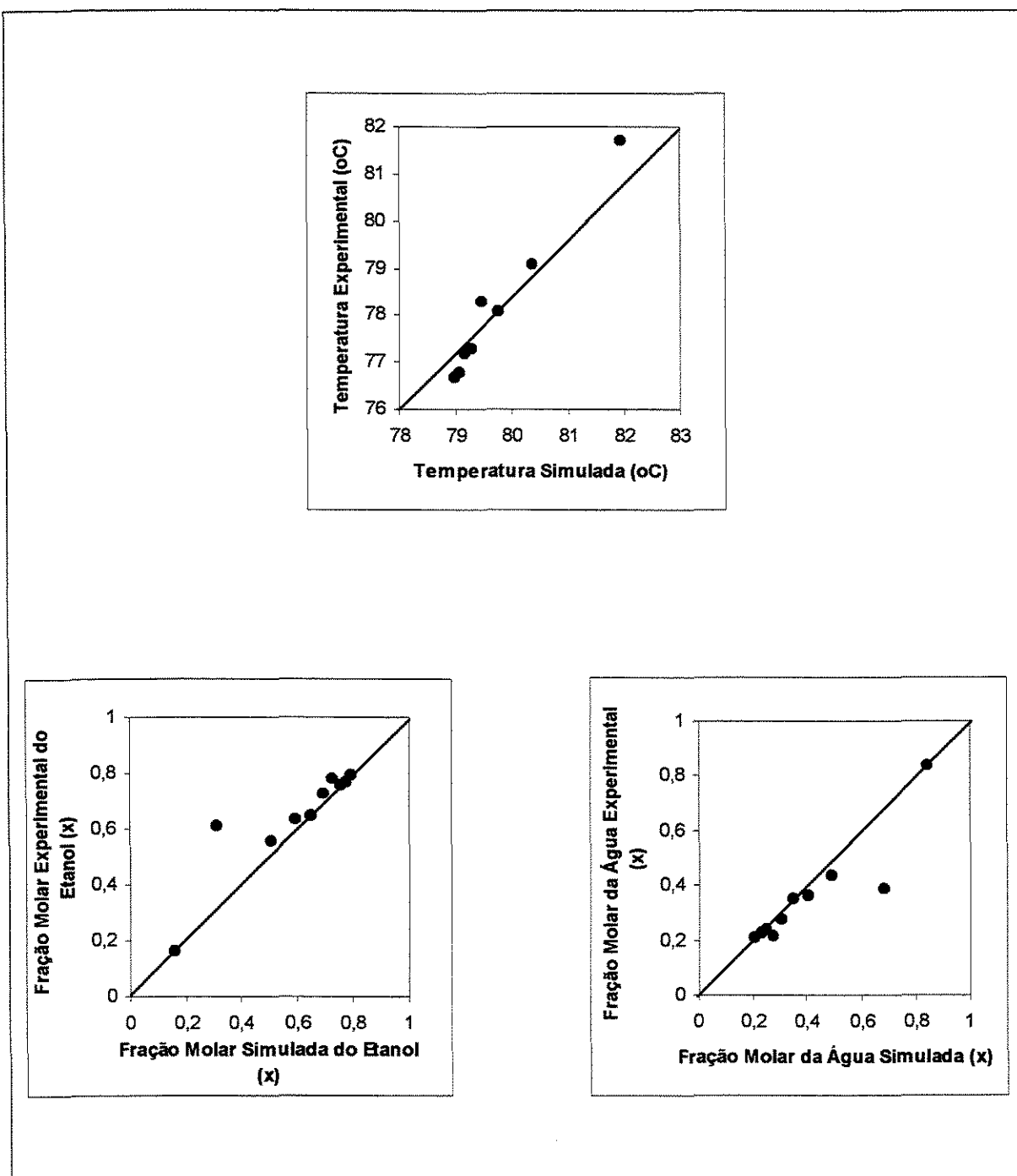


Figura IX.11 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4)

IX.2.2 Avaliação estatística do ensaio 6

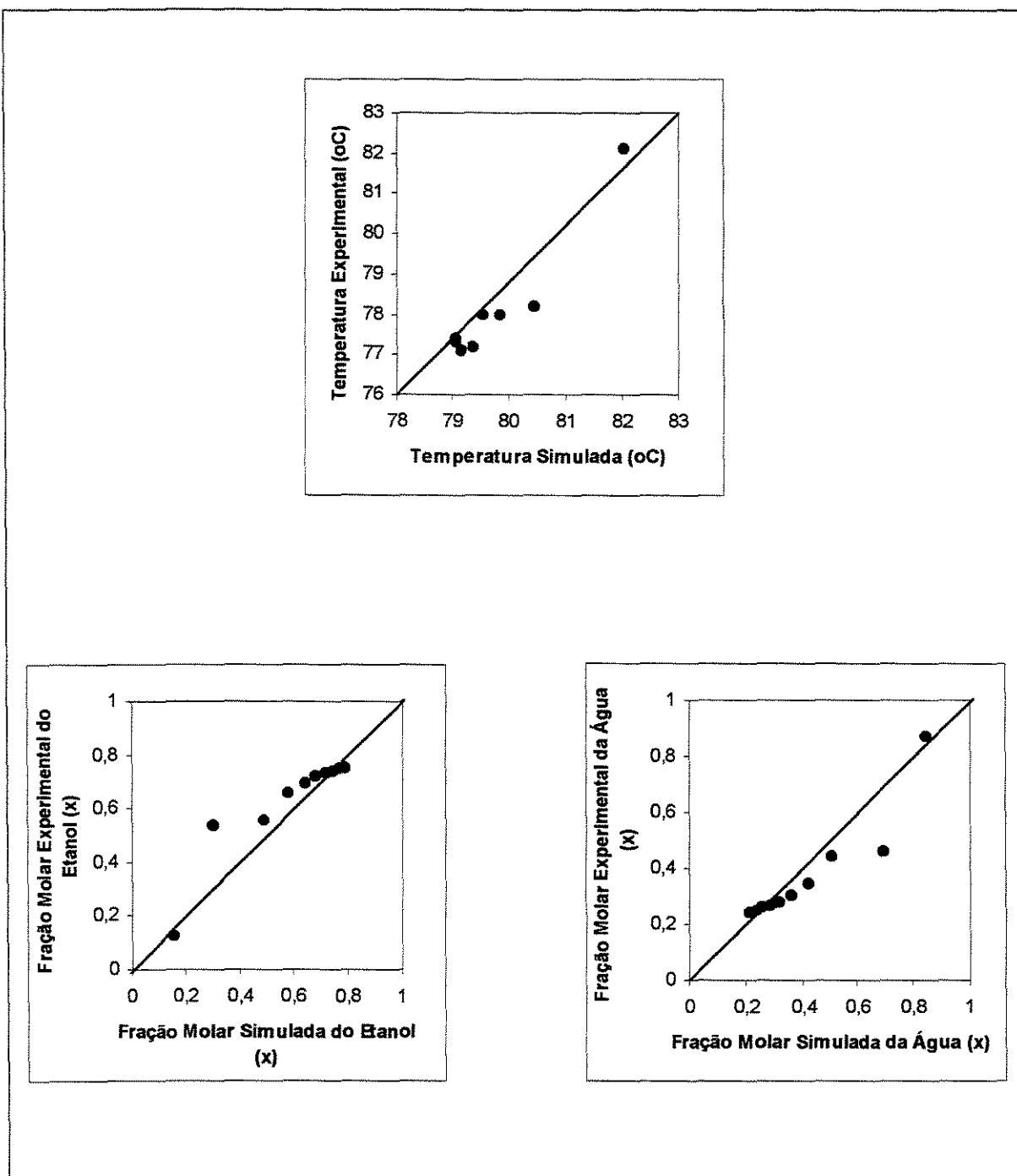


Figura IX.12 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4)

IX.2.3 Avaliação estatística do ensaio 8

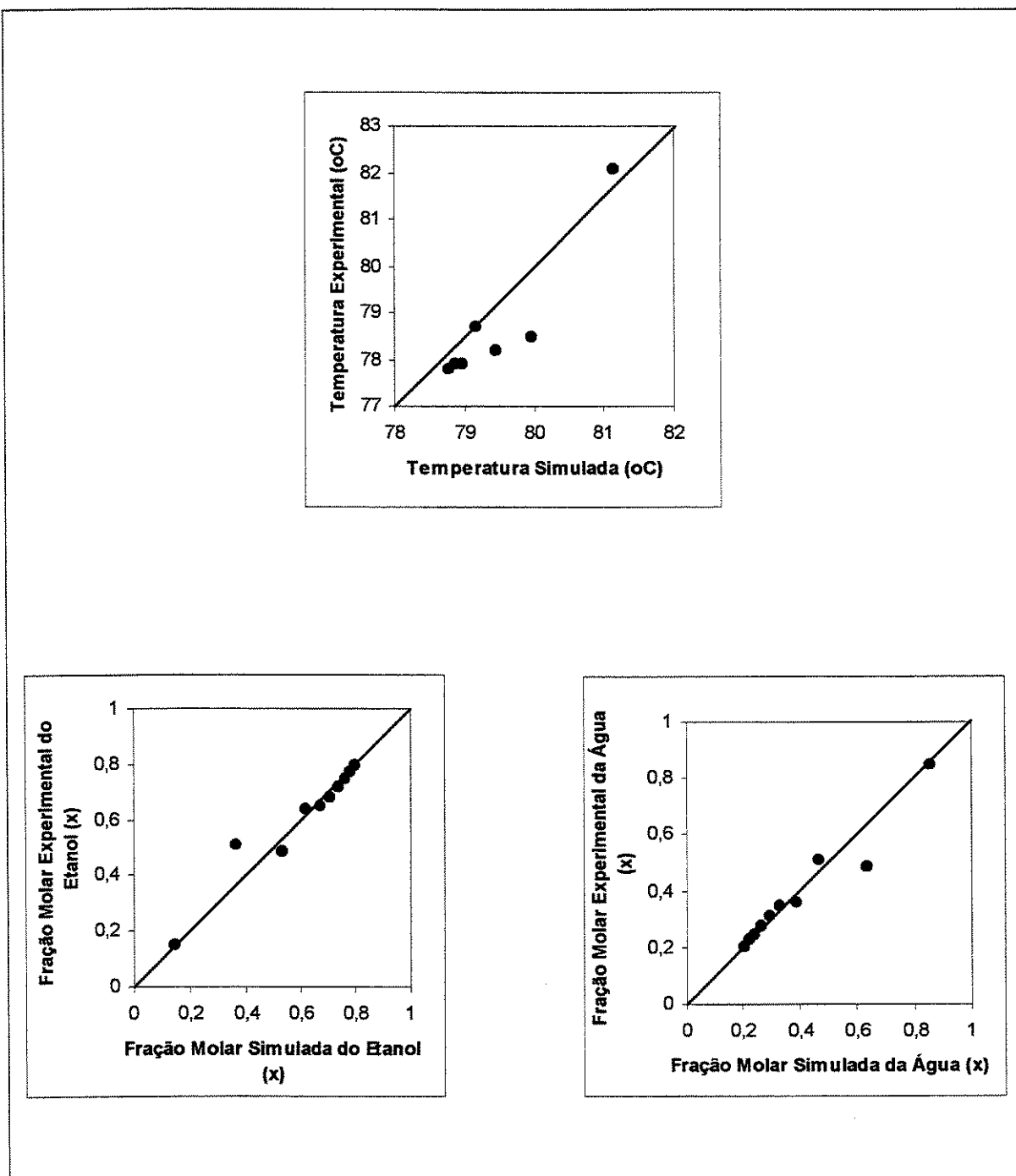


Figura IX.13 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4)

IX.2.4 Avaliação estatística do ensaio 11

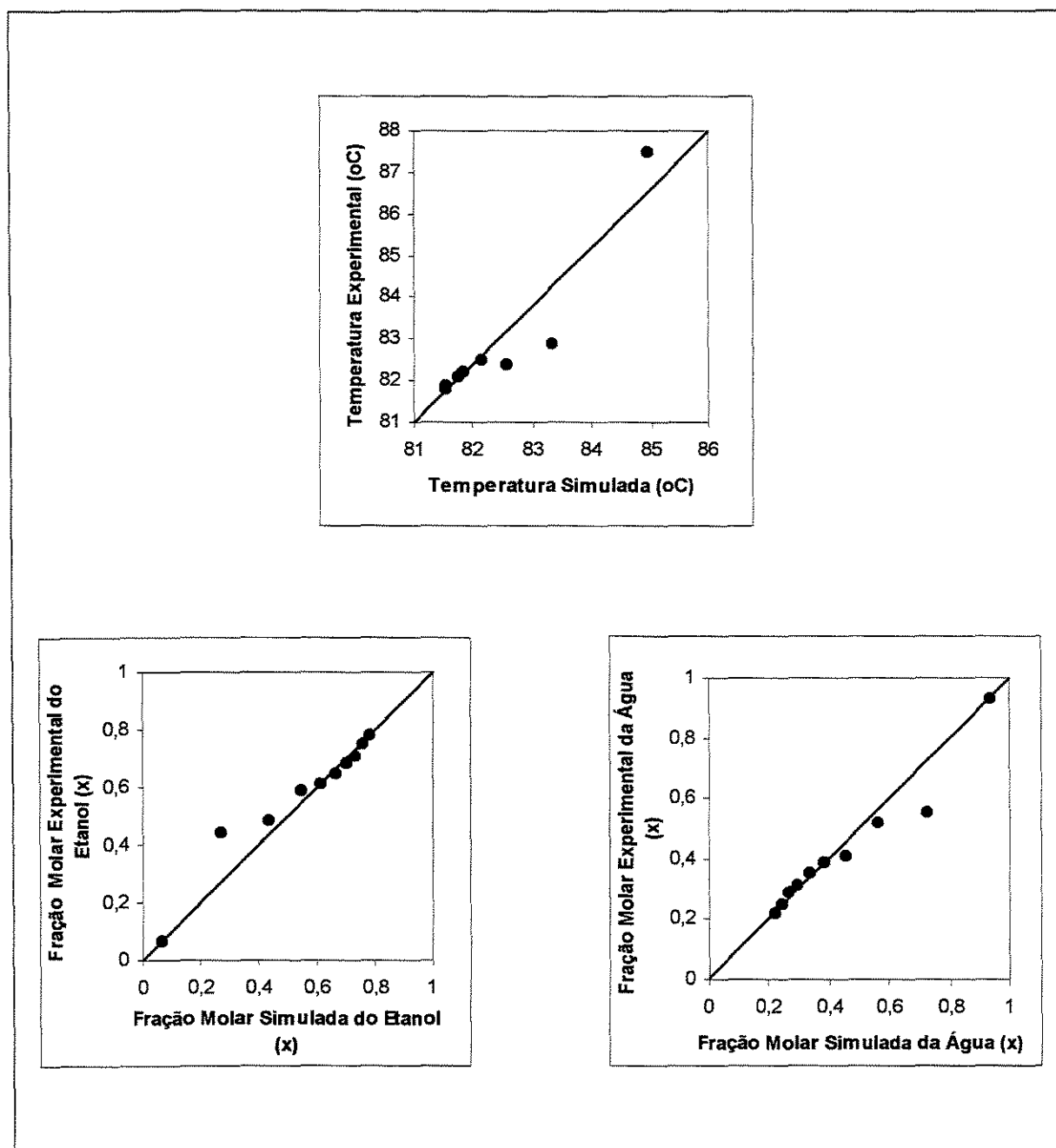


Figura IX.14 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4)

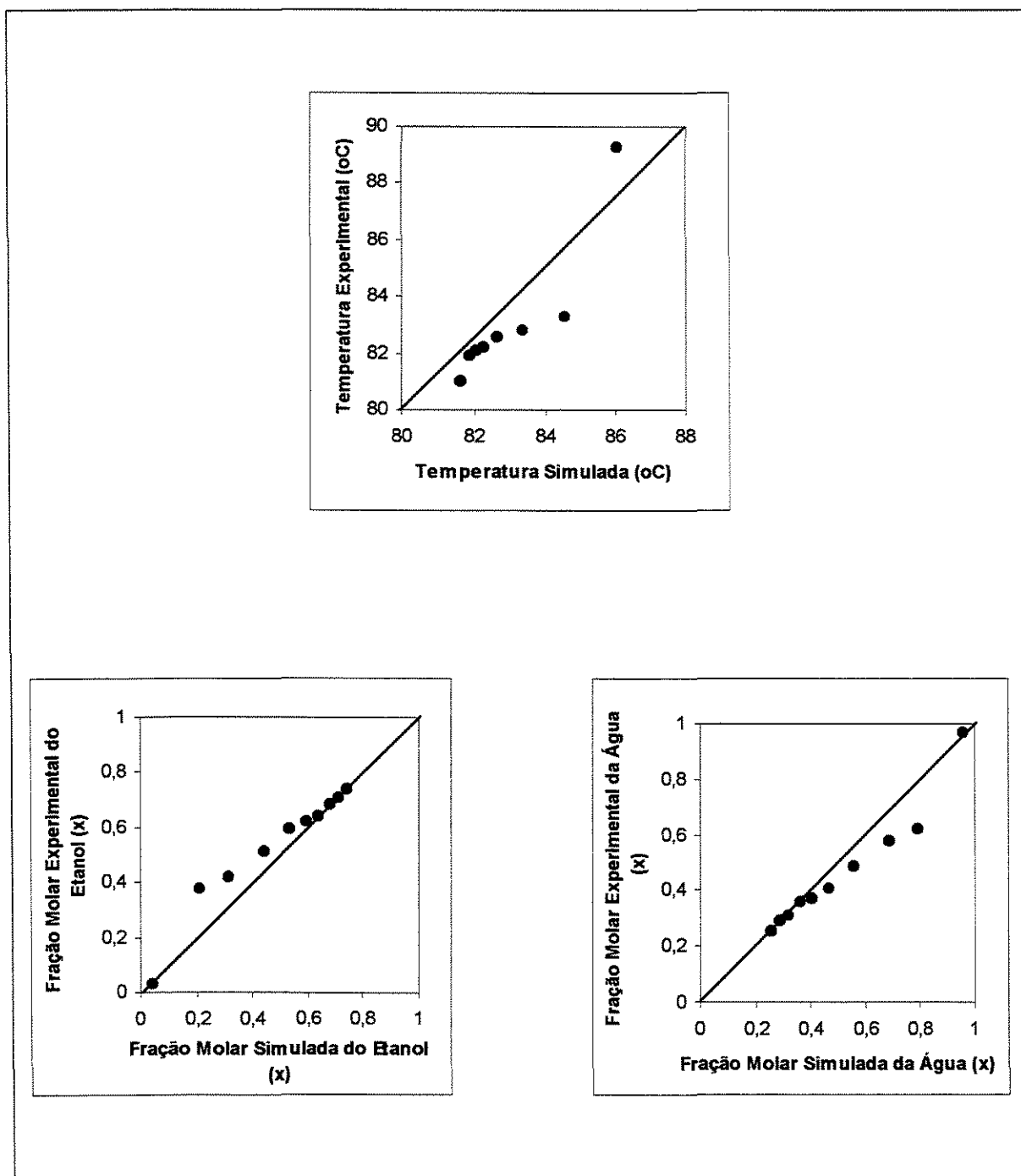
IX.2.5 Avaliação estatística do ensaio 12

Figura IX.15 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4)

Com base na comparação entre os dados simulados e experimentais presentes nas Figuras IX.11, IX.12, IX.13, IX.14 e IX.15, determinou-se os desvios médios e as diferenças percentuais, tanto para a temperatura quanto para as frações molares dos dois componentes constituintes do sistema. As tabelas IX.1 e IX.2 apresentam os resultados desta avaliação.

Tabela IX.1 – Desvios Médios entre os Dados Simulados e Experimentais

(Modelagem de Estágios de Equilíbrio)

Ensaio	Especificação	T (°C)	Fração Molar do Etanol	Fração Molar da Água
5	4	1,587	0,050	0,050
6	4	1,662	0,056	0,056
8	4	1,000	0,029	0,029
11	4	0,600	0,033	0,033
12	4	0,737	0,047	0,047

De acordo a tabela IX.1, os desvios médios são mais acentuados para a temperatura, principalmente para os ensaios 5, 6 e 8 em virtude da excessiva perda de calor. Quanto as frações molares, os desvios apresentam variação a partir da segunda casa decimal, tanto para o componente mais volátil quanto para o componente menos volátil.

As diferenças percentuais foram calculadas para os ensaios acima citados de acordo com a equação IX.1. Conforme se observa na tabela IX.2, maiores desvios de temperatura geram maiores diferenças percentuais, sendo estas menores que 2,5%. Apesar dos menores desvios, as diferenças percentuais

médias das frações molares são mais acentuadas devido a faixa de variação deste parâmetro.

Tabela IX.2 – Diferenças Percentuais Médias entre os Dados Simulados e Experimentais

(Modelagem de Estágios de Equilíbrio)

Ensaio	Especificação	T (%)	Fração Molar de Etanol (%)	Fração Molar da Água (%)
5	4	2,048	7,979	14,314
6	4	2,142	10,889	14,780
8	4	1,273	5,536	7,061
11	4	0,706	7,050	7,123
12	4	0,856	13,660	8,947

Convém salientar que ao se desprezar os dados referentes ao estágio 2, os desvios médios e, conseqüentemente, as diferenças percentuais seriam reduzidas.

IX.3 Comparação entre Dados da Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio e Dados Experimentais

Os dados experimentais utilizados para a corroboração da modelagem de estágios de equilíbrio com a correlação de eficiência de Barros e Wolf foram também usados para a corroboração da modelagem de estágios de não equilíbrio. Os ensaios selecionados foram 5, 6, 8, 11 e 12.

Nesta seção são apresentados os resultados e as avaliações das simulações para os ensaios selecionados utilizando o programa desenvolvido por BARROS (1997) e que incorpora a modelagem de estágios de não equilíbrio de modo similar ao item IX.1. Novamente deve-se salientar que o modelo supõem a condição de processo adiabático como condição de contorno.

IX.3.1 Avaliação dos dados do ensaio 5

Na avaliação do ensaio 5 foi utilizada a especificação 4, definida como a fração molar do componente mais volátil no destilado e o calor fornecido ao refeedor. Para esta especificação foram avaliados os perfis de temperatura na fase líquida e os perfis das frações molares do etanol e da água ao longo do equipamento. Com base nestes parâmetros foram feitas as comparações entre o modelo teórico e os dados experimentais.

Na Figura IX.16 são apresentados os perfis de temperatura para a especificação 4, onde se observa tendência similar no comportamento entre os dados simulados e experimentais: temperaturas elevadas próximas ao refeedor (região de maior concentração do componente menos volátil) decrescendo em direção ao condensador (região de maior concentração do componente mais volátil). Similarmente a modelagem de estágios de equilíbrio, identifica-se a

estabilização da temperatura a partir do estágio 5. Neste ensaio a coluna não encontrava-se termicamente isolada, o que culminou em temperaturas experimentais menores que as simuladas, conforme o obtido com a modelagem de estágios de equilíbrio.

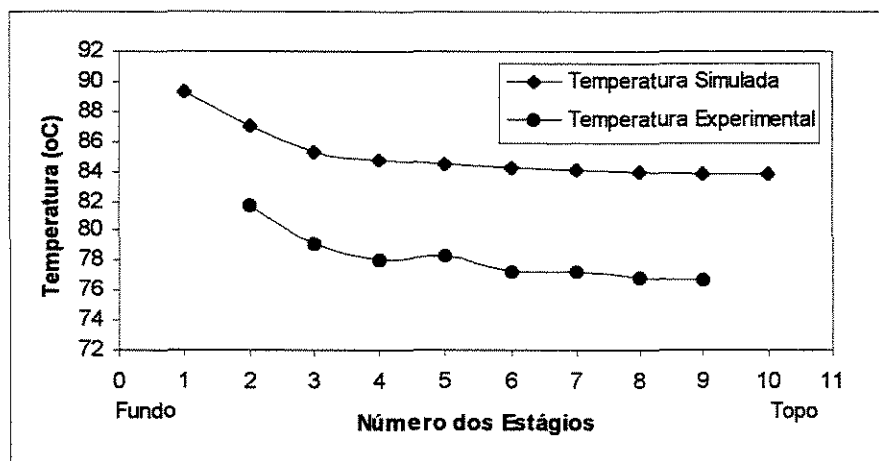


Figura IX.16 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR: 0,230E8 J/h)

Para a avaliação do comportamento das frações molares, foram realizadas simulações com a mesma especificação e os resultados obtidos foram comparados com os dados experimentais. Conforme visualiza-se na Figura IX.17, os perfis apresentam uma aproximação acentuada quando comparados com os perfis de temperatura. Houve, praticamente, uma sobreposição dos perfis ao longo do equipamento, tanto para a água quanto para o etanol.

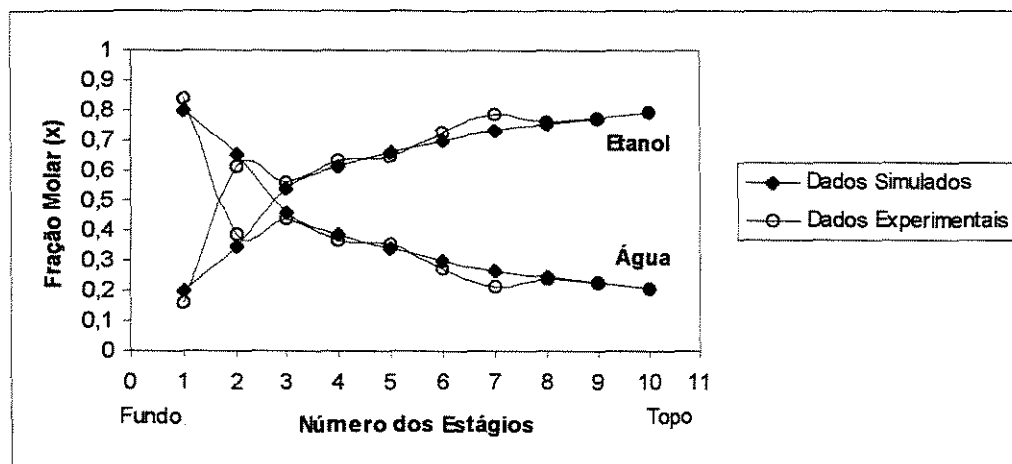


Figura IX.17 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4: XD: 79,2% e QR: 0,230E8 J/h)

IX.3.2 Avaliação dos dados do ensaio 6

Utilizando-se a especificação 4, fez-se, desta vez, as simulações utilizando os dados experimentais do ensaio 6, cujas descrições encontram-se no Apêndice A. O fato dos ensaios 5 e 6 apresentarem características idênticas levou a uma similaridade no comportamento dos perfis, principalmente quando analisados os gráficos relacionados com a temperatura. Conforme observado na Figura IX.18, os perfis se afastam razoavelmente. As temperaturas obtidas experimentalmente mantiveram-se abaixo das temperaturas simuladas devido a ausência de isolamento térmico, porém o comportamento não foi alterado, obtendo-se na região próxima ao refeedor temperaturas mais elevadas que na região próxima ao condensador.

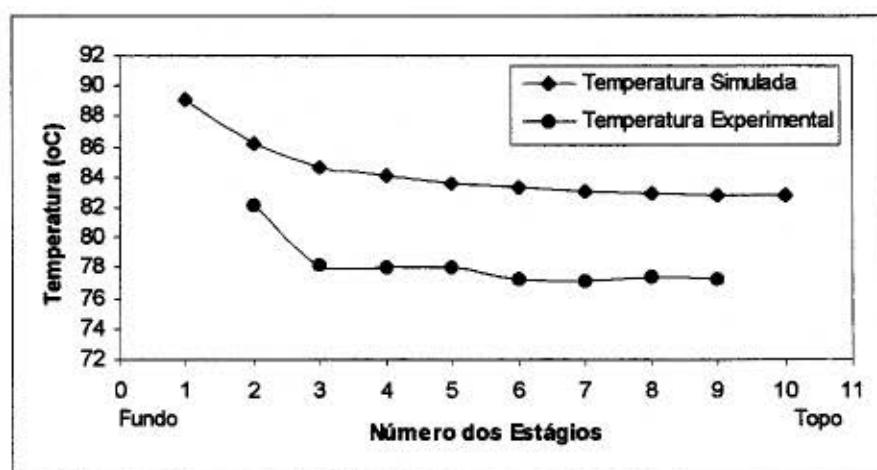


Figura IX.18 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h)

Ao contrário do que se observa no ensaio 5, que apresentou praticamente uma sobreposição dos perfis, no ensaio 6 as frações molares apresentaram maior afastamento ao longo do equipamento. Maiores distanciamentos foram observados nos estágios 2, 4, 5 e 6.

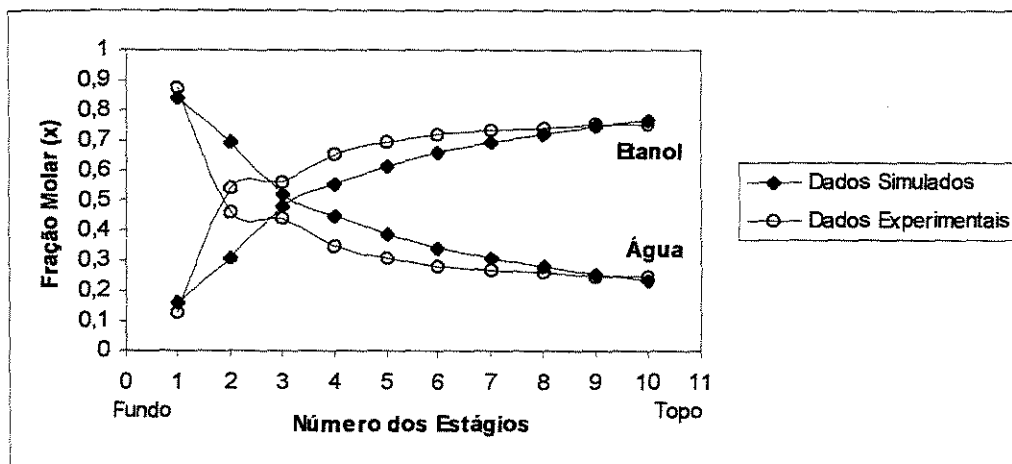


Figura IX.19 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4: XD: 75,5% e QR: 0,237E8 J/h)

IX.3.3 Avaliação dos dados do ensaio 8

Nesta seção os resultados obtidos foram oriundos de simulações realizadas com dados do ensaio 8 utilizando-se a especificação 4.

Na Figura IX.20 estão apresentados os perfis de temperatura experimental e simulada para a especificação acima citada. Apesar do afastamento característico, observa-se que ocorre uma maior aproximação entre os perfis quando comparados aos obtidos nos ensaios 5 e 6. As temperaturas experimentais situaram-se abaixo das temperaturas simuladas, visto que os dados experimentais foram obtidos com a coluna de destilação sem isolamento térmico.

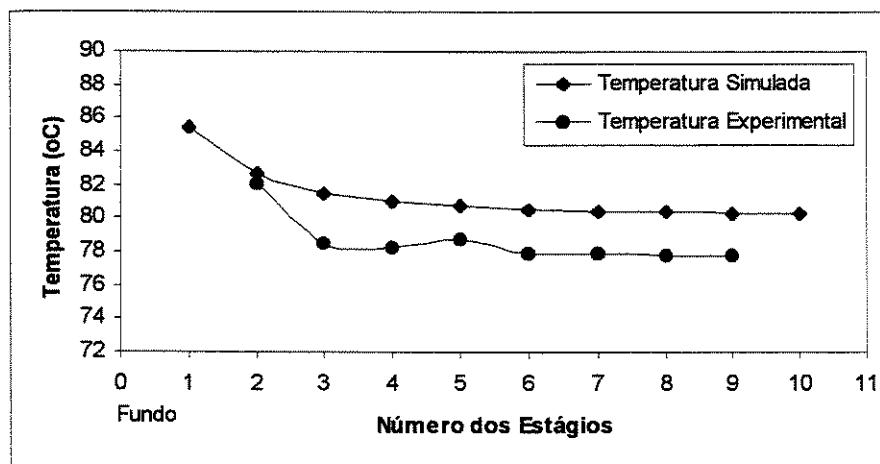


Figura IX.20 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h)

Com a especificação utilizada para a análise da temperatura, foram realizadas as comparações entre os perfis das frações molares experimentais e simuladas. De acordo com a Figura IX.21 nota-se uma boa similaridade entre os dados experimentais e simulados ao longo do equipamento, ocorrendo praticamente a sobreposição dos mesmos.

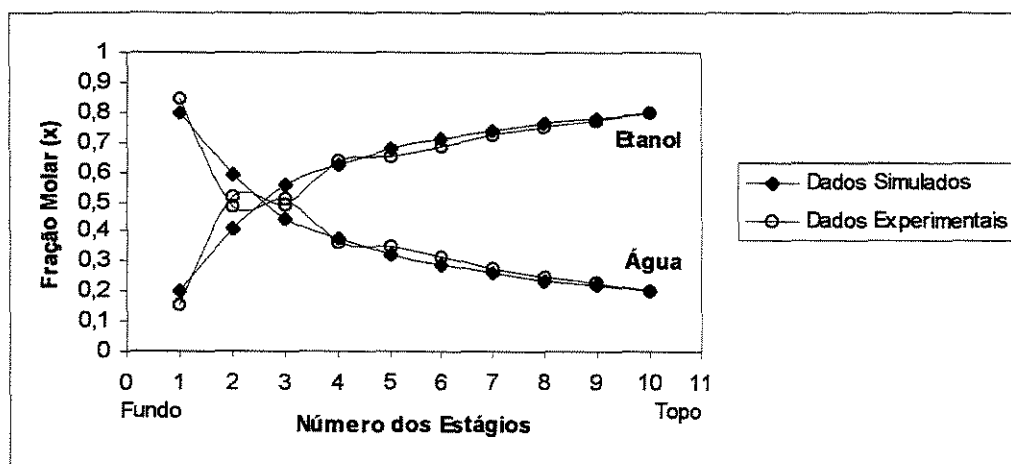


Figura IX.21 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4: XD: 79,8% e QR: 0,393E8 J/h)

IX.3.4 Avaliação dos dados do ensaio 11

O ensaio 11 caracteriza-se pelo uso da coluna de destilação com isolamento térmico. A especificação 4 foi utilizada para a simulação da coluna empregando os dados experimentais do ensaio em questão.

De acordo com o esperado, o isolamento térmico utilizado, promoveu a sobreposição dos perfis de temperatura, conforme o observado nos ensaios 11 e 12 quando da avaliação da modelagem de estágios de equilíbrio.

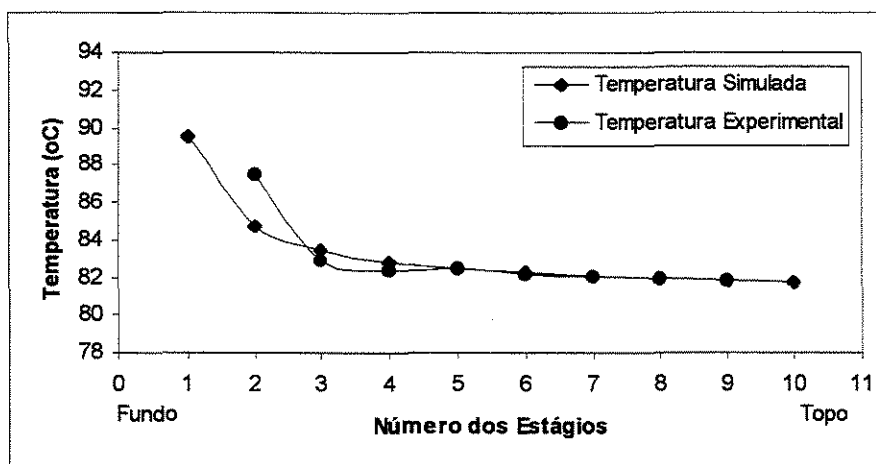


Figura IX.22 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h)

Na Figura IX.23 é possível visualizar o comportamento dos perfis das frações molares obtidos por meio de simulações utilizando-se os dados de operação do ensaio 11 com a especificação 4. A comparação entre os perfis das frações molares experimentais e simuladas mostra uma sobreposição dos perfis praticamente ao longo de todo o equipamento, com exceção do estágio 2 onde observa-se um leve afastamento, conforme caracterizado no item IX.1.

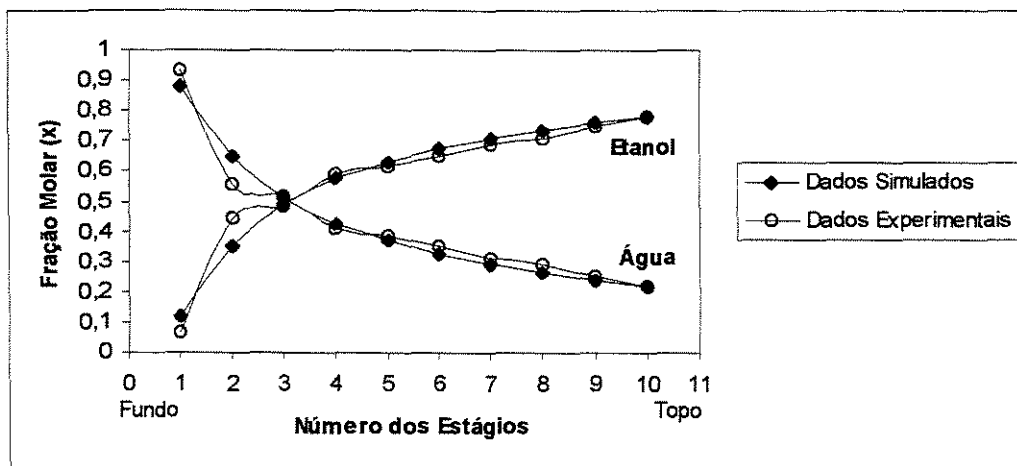


Figura IX.23 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 11: Especificação 4: XD: 77,9% e QR: 0,194E8 J/h)

IX.3.5 Avaliação dos dados do ensaio 12

Para esta avaliação, foram empregados os dados operacionais do ensaio 12, na qual foi utilizada a especificação 4, similarmente ao ensaio 11.

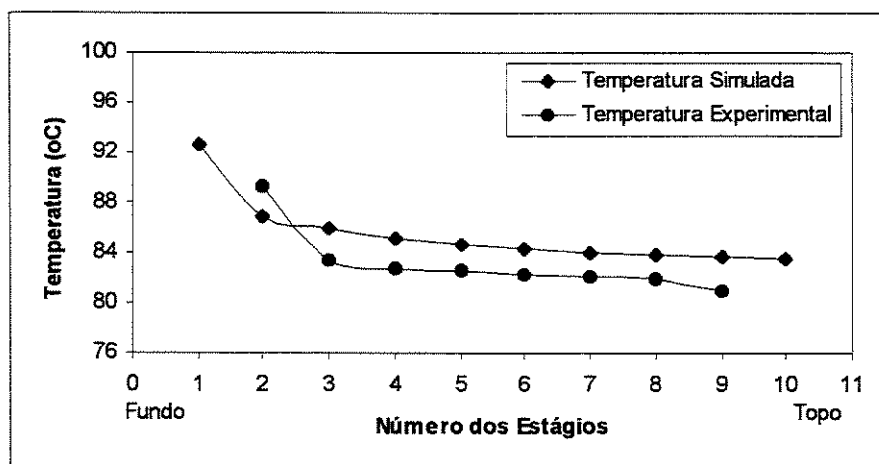


Figura IX.24 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h)

Na Figura IX.24 são apresentados os perfis de temperatura, experimentais e simulados, na qual se observa uma grande similaridade de comportamento e uma maior aproximação, principalmente quando comparado aos perfis obtidos nos ensaios 5, 6 e 8.

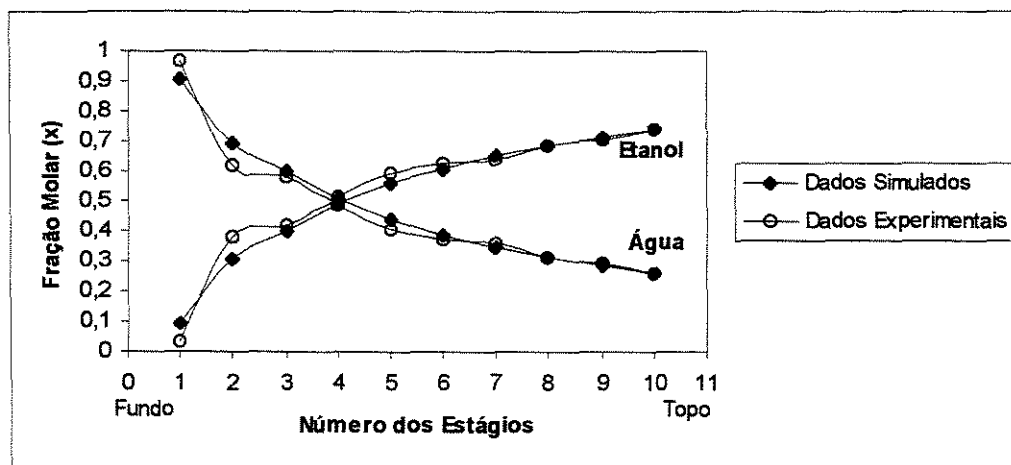


Figura IX.25 – Comparação entre dados simulados (modelagem de estágios de não equilíbrio) e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4: XD: 74,3% e QR: 0,193E8 J/h)

Os perfis das frações molares apresentados na Figura IX.25 mostram um excelente comportamento, onde observa-se praticamente a sobreposição dos perfis. Nos estágios 2 e 5 ocorre um desvio maior.

IX.4 Avaliação Estatística dos Dados Simulados Utilizando a Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio e os Dados Experimentais

Similarmente a seção IX.2, são avaliados, estatisticamente, os dados experimentais e simulados utilizando-se a modelagem de estágios de não equilíbrio, identificando-se os desvios médios, definido como a diferença entre os dados simulados e os dados experimentais, e as diferenças percentuais médias, definida pela equação IX.1, para cada um dos ensaios do item IX.3.

Conforme se observa nas Figuras IX.26, IX.27, IX.28, IX.29 e IX.30, a comparação entre os dados simulados e experimentais apresenta uma boa concordância na modelagem de estágios de não equilíbrio, principalmente no que diz respeito às frações molares. Com relação aos perfis de temperatura, o afastamento é mais acentuado, comportamento visualizado tanto nos perfis avaliados no item IX.3 quanto nas figuras presentes nesta seção.

Nas tabelas IX.3 e IX.4 são demonstrados os resultados dos desvios médios e das diferenças percentuais médias calculadas.

IX.4.1 Avaliação estatística do ensaio 5

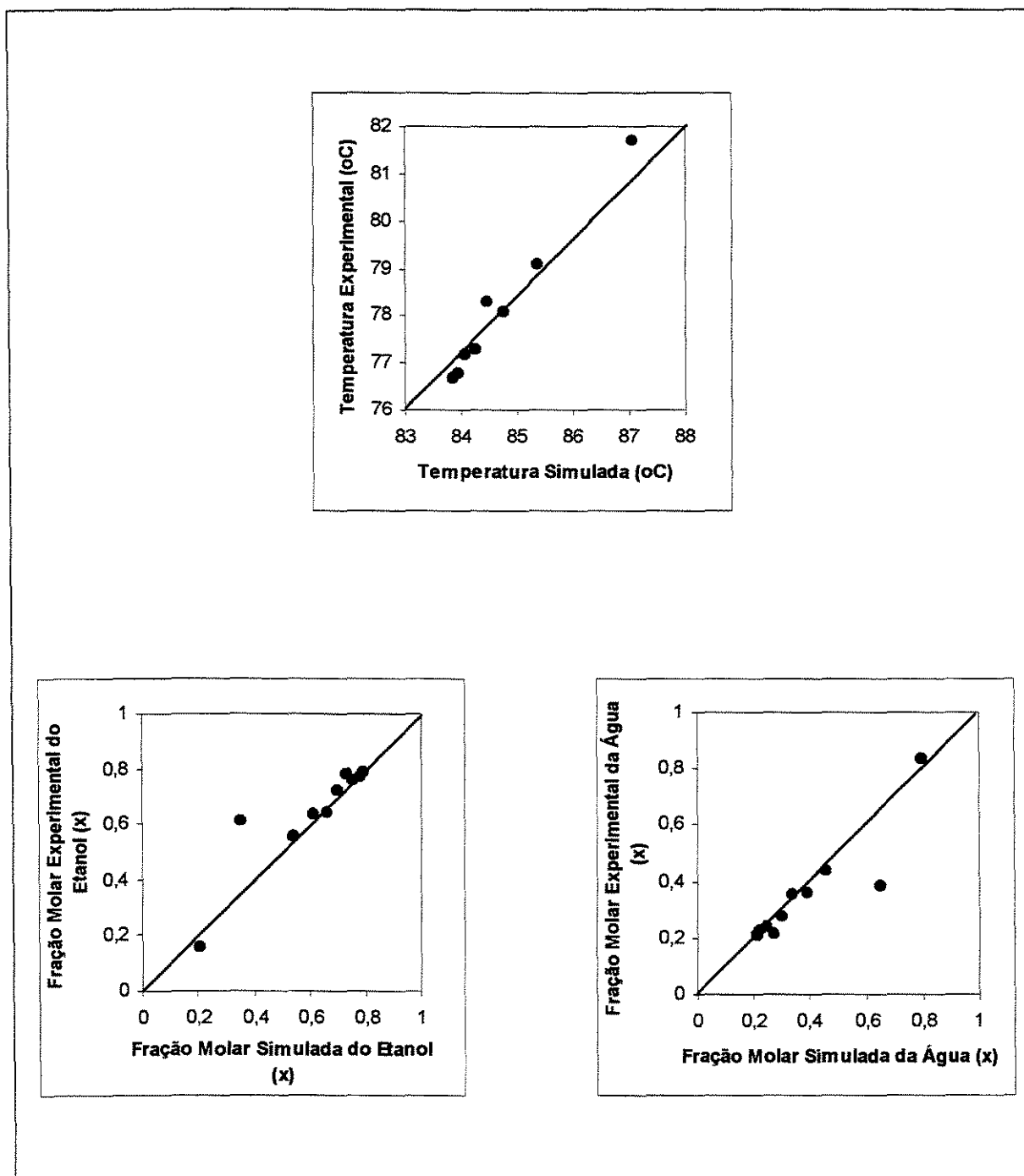


Figura IX.26 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 5 – Especificação 4)

IX.4.2 Avaliação estatística do ensaio 6

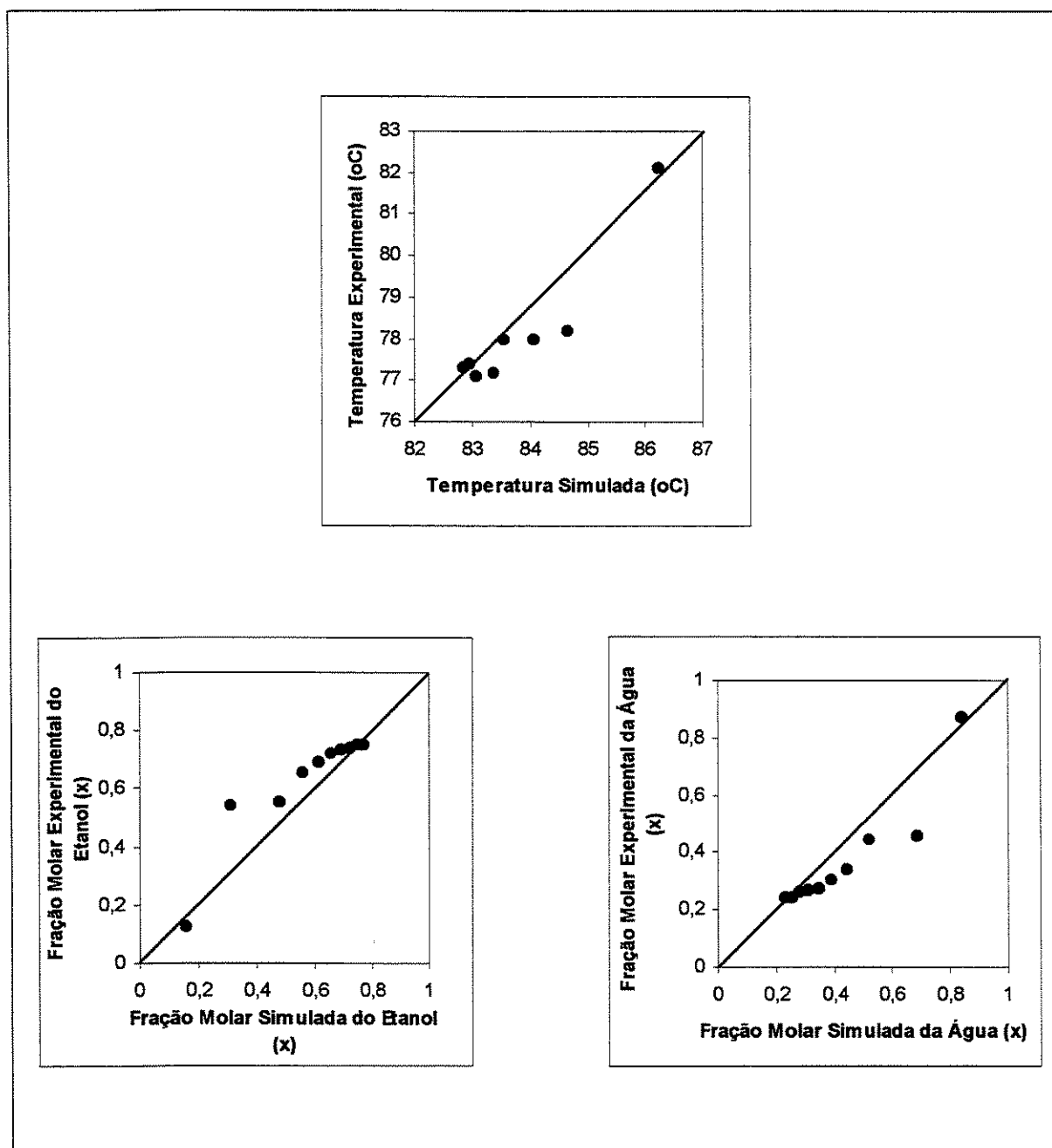


Figura IX.27 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 6 – Especificação 4)

IX.4.3 Avaliação estatística do ensaio 8

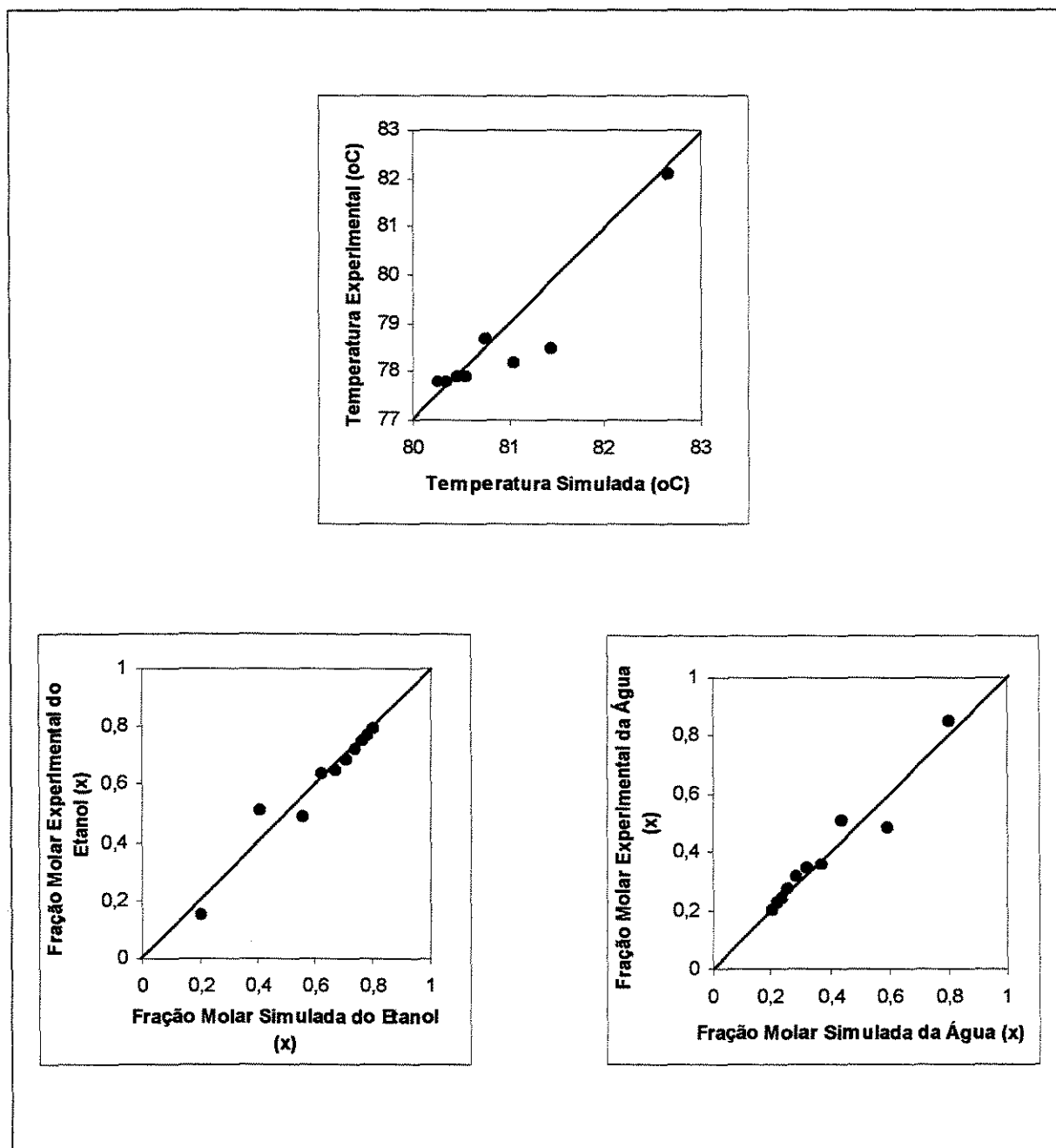


Figura IX.28 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 8 – Especificação 4)

IX.4.4 Avaliação estatística do ensaio 11

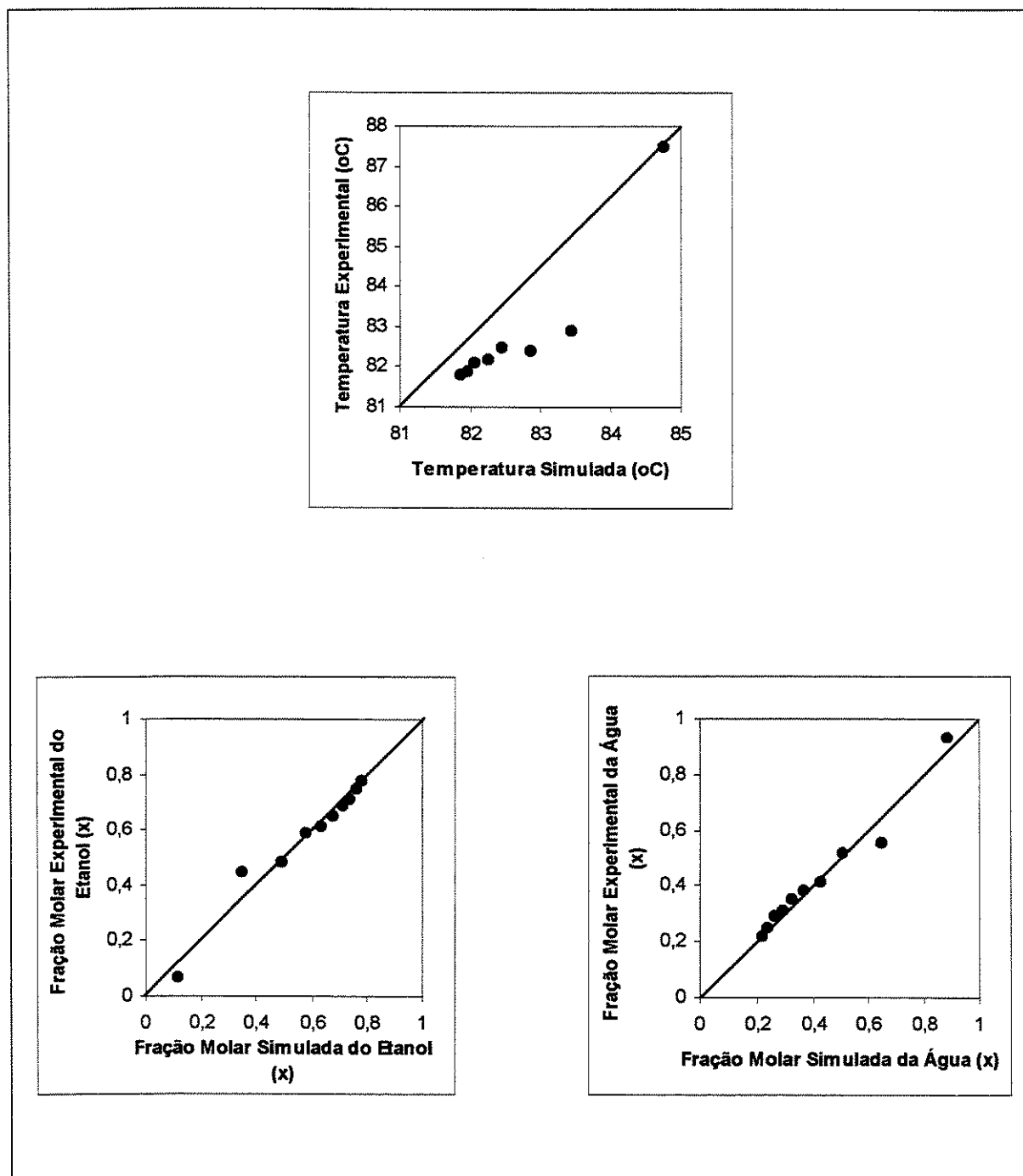


Figura IX.29 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 11 – Especificação 4)

IX.4.5 Avaliação estatística do ensaio 12

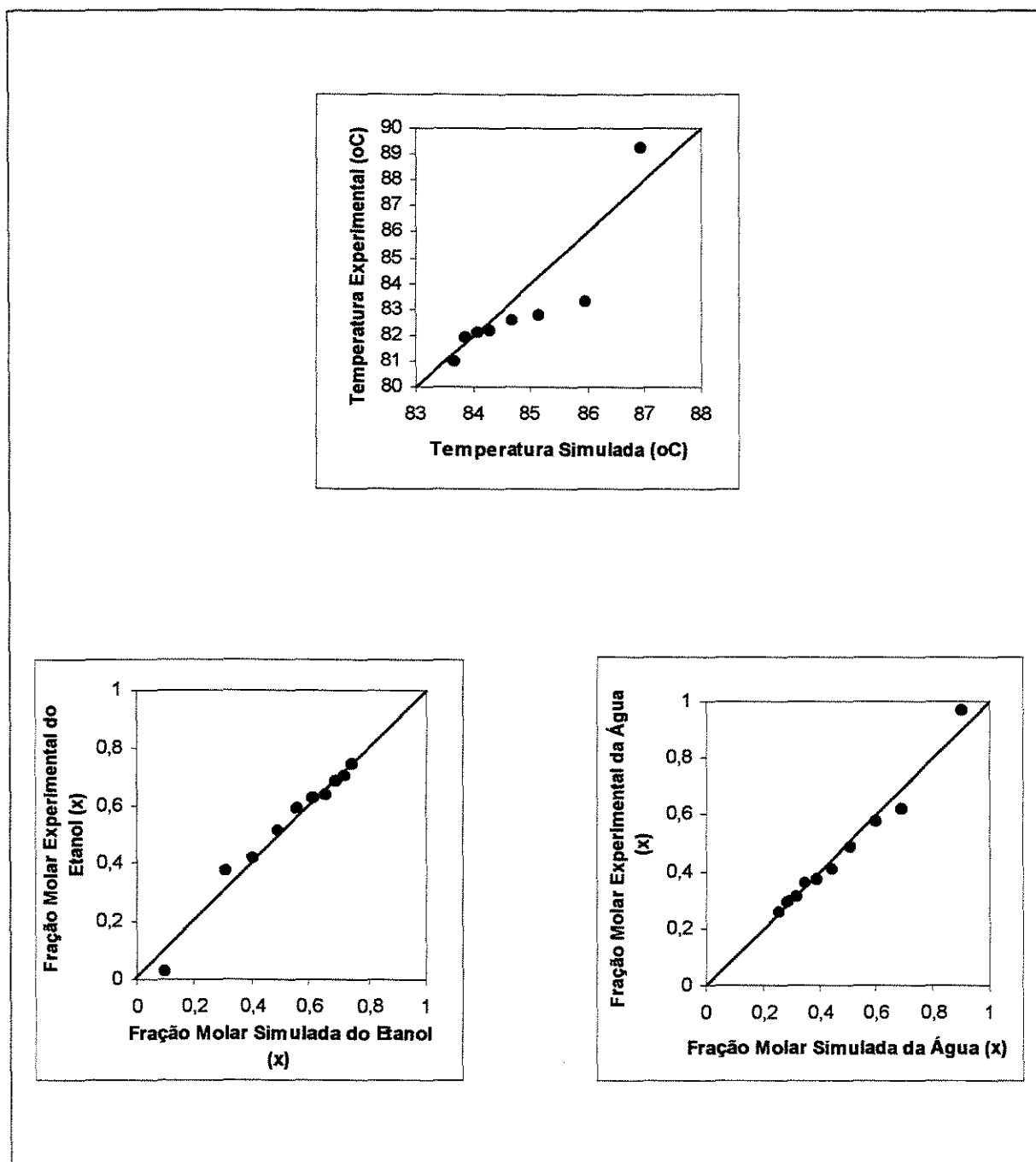


Figura IX.30 – Comparação entre dados simulados e experimentais (Ensaio 12 – Especificação 4)

Com base nos resultados obtidos nas simulações, procedeu-se o cálculo para a determinação dos desvios e das diferenças percentuais entre os dados simulados e experimentais para cada ensaio, cujos resultados são apresentados nas tabelas IX.3 e IX.4.

Tabela IX.3 – Desvios Médios entre os Dados Simulados e Experimentais
(Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio)

Ensaio	Especificação	T (°C)	Fração Molar do Etanol	Fração Molar da Água
5	4	6,562	0,045	0,045
6	4	5,675	0,069	0,069
8	4	2,325	0,033	0,033
11	4	0,500	0,027	0,027
12	4	2,250	0,024	0,024

Na tabela IX.3 nota-se que os maiores desvios de temperatura foram obtidos para os ensaios envolvendo a coluna de destilação sem isolamento térmico, comportamento similar ao obtido com a modelagem de estágios de equilíbrio. Nota-se, também, que a modelagem de estágios de não equilíbrio apresentou menores desvios nas frações molares para os ensaios 5, 11 e 12, comparativamente à modelagem de estágios de equilíbrio nas mesmas condições de operação.

A partir do conhecimento dos desvios médios, procedeu-se a determinação das diferenças percentuais baseadas na equação IX.1. Os resultados obtidos estão apresentados na tabela IX.4.

Tabela IX.4 – Diferenças Percentuais Médias entre os Dados Simulados e Experimentais

(Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio)

Ensaio	Especificação	T (%)	Fração Molar de Etanol (%)	Fração Molar de Água (%)
5	4	8,414	9,000	12,507
6	4	7,276	12,796	18,210
8	4	2,972	8,172	7,533
11	4	0,582	11,038	5,991
12	4	2,707	23,572	4,409

Observa-se que os maiores desvios de temperatura apresentam, consequentemente, maiores diferenças percentuais com relação a este parâmetro, cujos valores situam-se abaixo de 8,5%. As frações molares, apesar de apresentarem menores desvios médios, comparativamente à temperatura, mostram maiores diferenças percentuais em virtude das pequenas variações deste parâmetro, isto é, enquanto a temperatura é um parâmetro cujos valores variam de 78 a 100°C, as frações molares situam-se no intervalo de [0, 1]. Assim, pequenos desvios nas frações molares são mais significativos quando comparados aos desvios nas temperaturas.

Cabe salientar que, ao se excetuar o estágio 2, os desvios médios e as diferenças percentuais mostrariam valores mais reduzidos.

CONCLUSÃO

Neste capítulo foram realizadas as simulações utilizando os programas desenvolvidos por BARROS (1997) e que incluem as modelagens de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio. O objetivo principal foi a corroboração de tais modelos, com base nos dados experimentais obtidos em uma coluna de destilação em escala de laboratório, cujas particularidades estão descritas no Capítulo VII.

Nas avaliações foi utilizada a especificação 4, a qual está relacionada com a fração do componente mais volátil na corrente de destilado (XD) e o calor fornecido ao refeedor (QR), a especificação mais próxima das realidades experimentais, uma vez que envolve dois parâmetros obtidos experimentalmente. É digno lembrar que, apesar de se trabalhar a refluxo total, amostras da corrente de destilado foram coletadas possibilitando, portanto, a simulação do processo com a utilização de dados reais.

Foi constatado que a utilização da coluna de destilação sem isolamento térmico promoveu perdas excessivas de calor para o ambiente, o que foi facilmente identificado quando da comparação entre os perfis de temperatura nos ensaios 5, 6 e 8 (envolvendo coluna sem isolamento térmico) e nos ensaios 11 e 12 (envolvendo a coluna com isolamento térmico) para ambos os modelos. As maiores discrepâncias, com relação a temperatura, foram obtidas com a utilização da modelagem de estágios de não equilíbrio. Com os ensaios 11 e 12, obteve-se resultados mais satisfatórios, uma vez que os perfis de temperatura se aproximaram consideravelmente. Isto é facilmente identificado tanto nos perfis apresentados nas seções IX.1 e IX.3, quanto nas avaliações estatísticas das seções IX.2 e IX.4.

No que concerne a comparação entre os modelos, conclui-se, a partir dos resultados obtidos para os ensaios em questão, que:

- a modelagem de estágios de equilíbrio representou melhor os perfis de temperatura, gerando, portanto, menores desvios e diferenças percentuais quando comparada com a modelagem de estágios de não equilíbrio (com exceção do ensaio 11);
- de um modo geral, as frações molares apresentaram comportamento mais consistente para as duas modelagens. Ao se comparar os dois modelos, observa-se que para os ensaios 5, 11 e 12 os desvios foram menores para a modelagem de estágios de não equilíbrio;
- os dados do estágio 2 apresentam maiores discrepâncias quando comparados com os dados simulados, principalmente no que diz respeito às frações molares devido a proximidade com o refeedor, o qual promove a vaporização de todo o líquido que atinge tal estágio, culminando no aumento da temperatura e da concentração.

As maiores discrepâncias de temperatura na modelagem de estágios de não equilíbrio estão relacionadas às próprias características do modelo. Deve-se ressaltar que o programa utilizado e que engloba a modelagem de estágios de não equilíbrio para a simulação de colunas de destilação, contém inúmeras propriedades físicas calculadas através de correlações apropriadas, a citar: densidade, viscosidade, difusividade, capacidade calorífica e condutividade térmica para os componentes puros e para a mistura, tanto na fase líquida quanto na fase vapor. Uma análise minuciosa de algumas expressões usadas para o cálculo de tais propriedades mostra que as mesmas apresentam margens de erros inclusos, os quais refletem nos resultados finais de temperatura. Com o erro oriundo de tais correlações e a sua utilização na determinação dos perfis de temperatura na coluna de destilação mediante simulação numérica, ocorre a progressão de erro para os perfis deste parâmetro quando comparado com dados experimentais. Os desvios encontrados entre as temperaturas verificadas e as

previstas não estão somente relacionadas a erros sistemáticos de calibração dos sensores de temperatura, mas também das correlações envolvidas nos cálculos de algumas propriedades físicas presentes no modelo, conforme especificado anteriormente.

Como nos modelos o processo adiabático é considerado, como condição de contorno, mesmo operando-se com a coluna com isolamento térmico, não se consegue alcançar adequadamente as condições do modelo. Por este motivo, os desvios estão presentes mesmo com o isolamento térmico. Assim, pode-se concluir também que a coluna foi adequadamente isolada, uma vez que a diferença entre os perfis de temperatura obtidos experimentalmente (coluna com isolamento térmico) se aproximam bastante daqueles oriundos do modelo teórico que considera o processo adiabático.

Um estudo realizado por PESCARINI (1996) mostra a influência dos coeficientes de massa e calor na modelagem de estágios de não equilíbrio. Neste trabalho foram verificadas as influências dos coeficientes de transferência de massa e energia, numa dada separação, através da verificação das mudanças ocorridas nos perfis de composição, de fluxos molares de líquido e vapor e de temperatura. Pelos casos estudados, ficou evidente que um pequeno desvio no cálculo dos coeficientes de transferência de energia na fase líquida não provoca qualquer alteração nos perfis resultantes, quando a resistência à transferência de massa e energia na fase líquida for nula.

Com estes resultados, já se pode validar o modelo de estágios de não equilíbrio proposto e também a correlação de Barros & Wolf embutida no modelo de estágios de equilíbrio. Pode-se afirmar, também, que os modelos conseguem representar com certa fidelidade, qualitativa e quantitativamente, o comportamento real do processo de separação por destilação e podem ser úteis para a predição do comportamento real e permitem a identificação da tendência dos diversos

parâmetros associados ao processo. Com este estudo pode-se afirmar também que a correlação de Barros & Wolf é adequada, uma vez que consegue prever com grande fidelidade o comportamento real do processo quando comparada a modelagem de estágios de não equilíbrio (modelo real).

CAPÍTULO X

AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE BARROS & WOLF

X.1 Análise da Eficiência de Barros & Wolf

Neste seção são apresentados os resultados oriundos das simulações empregando a modelagem de estágios de equilíbrio com a correlação de Barros & Wolf para a determinação da eficiência do prato e dos componentes e a avaliação qualitativa do seu comportamento ao longo da coluna de destilação. Os resultados obtidos são oriundos dos ensaios 5, 6, 8, 11 e 12.

X.1.1 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 5

O ensaio 5 envolve a coluna de destilação sem isolamento térmico e, para a avaliação do comportamento da eficiência de Barros & Wolf, foram realizadas simulações nas condições de operação real do ensaio em questão e os resultados de temperatura e composição foram comparados, conforme demonstrado no

Capítulo IX. A similaridade no comportamento dos perfis destes parâmetros no sistema etanol/água permitiu a utilização do programa no cálculo da eficiência.

Conforme se observa na Figura X.1, a eficiência do prato permanece praticamente constante ao longo do equipamento, situando-se na faixa de 72%. Os componentes apresentam comportamento diferenciado do obtido para o prato.

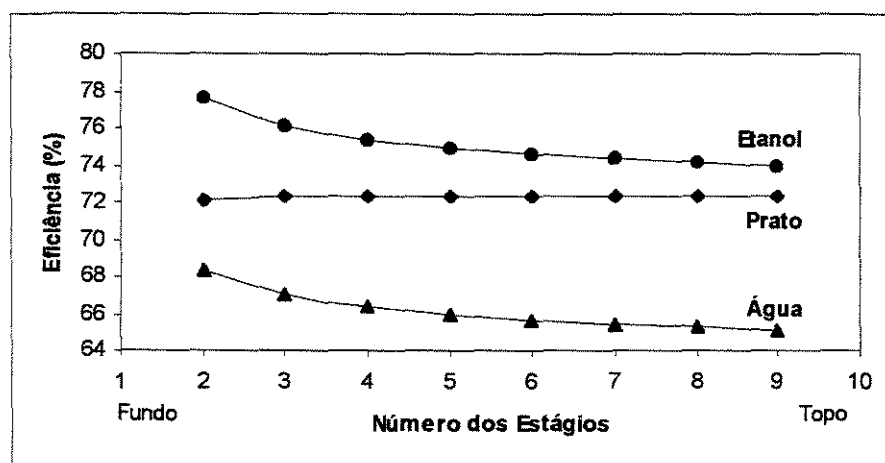


Figura X.1 – Perfis das eficiências do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 5)

A eficiência dos componentes diminui do fundo para o topo da coluna, variando de 73 a 78% para o componente mais volátil e de 65 a 68% para o componente menos volátil. A eficiência do prato situa-se entre os perfis da eficiência dos componentes, aproximando-se mais do perfil do componente mais volátil.

De um modo geral, a eficiência do componente mais volátil é maior que a do componente menos volátil, comportamento similar às constatações e resultados obtidos por COULSON et al. (1983), que na avaliação da eficiência de

componentes de uma mistura binária, observaram que o constituinte mais pesado possui valores menores de eficiência quando comparado com a eficiência do componente mais leve. O mesmo comportamento foi observado quando da avaliação da eficiência de O'Connell (seção VIII.6).

X.1.2 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 6

O ensaio 6 também está relacionado ao emprego da coluna de destilação sem isolamento térmico. Devido à similaridade nas condições operacionais e nos perfis das frações molares dos ensaios 5 e 6, o comportamento da eficiência mostrou-se praticamente idêntica, com a eficiência do prato mantendo-se praticamente constante ao longo da coluna de destilação. Em termos de números, a eficiência de prato variou de 72,1% no fundo para 72,3% no topo da coluna. Para os componentes, a eficiência diminui do fundo para o topo da coluna, mas com valores distintos, como se observa na Figura X.2. Para o etanol a variação de eficiência foi de 74% no topo a 77% no fundo da coluna de destilação. Para a água, estes valores situaram-se entre 65% no topo e 68% no fundo. Logo, se observa que, para o componente mais volátil, os valores de eficiência situaram-se acima dos valores do componente menos volátil. Para a eficiência do prato, os valores situaram-se entre aqueles obtidos para os componentes. Nestas condições de operação, ocorreu variação pouco significativa da eficiência dos componentes e do prato ao longo do equipamento.

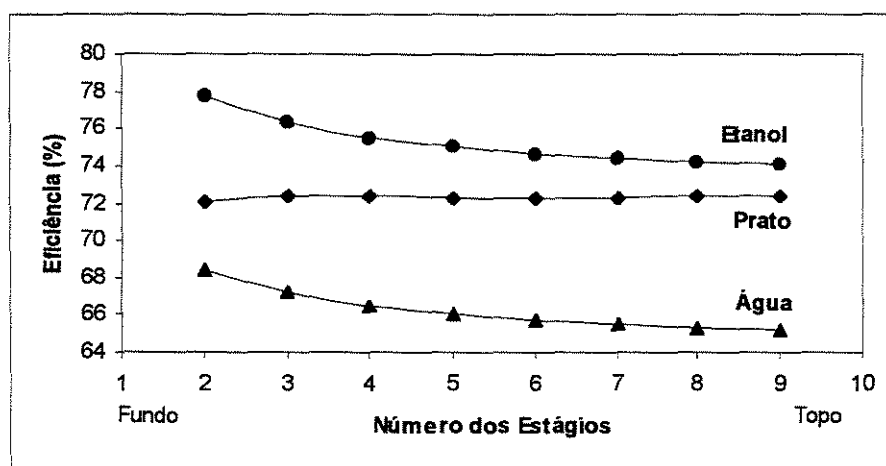


Figura X.2 – Perfis das eficiências do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 6)

X.1.3 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 8

Para a análise do ensaio 8, foram realizadas simulações empregando as condições de operação do devido ensaio e os resultados das frações molares e da temperatura obtidos mostraram-se similares quando comparados com os dados experimentais. Assim, tais resultados foram empregados para o cálculo da eficiência de Barros & Wolf e os perfis da eficiência do prato e dos componentes estão caracterizados na Figura X.3, onde se observa comportamento similar ao obtido na avaliação dos ensaios 5 e 6.

Novamente, a eficiência do prato manteve-se constante ao longo da coluna de destilação, cujo valor não ultrapassou 72,3%. Os componentes apresentaram maiores valores da eficiência na região correspondente ao fundo da coluna, diminuindo em direção ao topo do equipamento. Para o componente mais volátil, a eficiência variou de 74 a 77,5% do topo para o fundo, respectivamente, e para o componente menos volátil situou-se entre 65 e 68%.

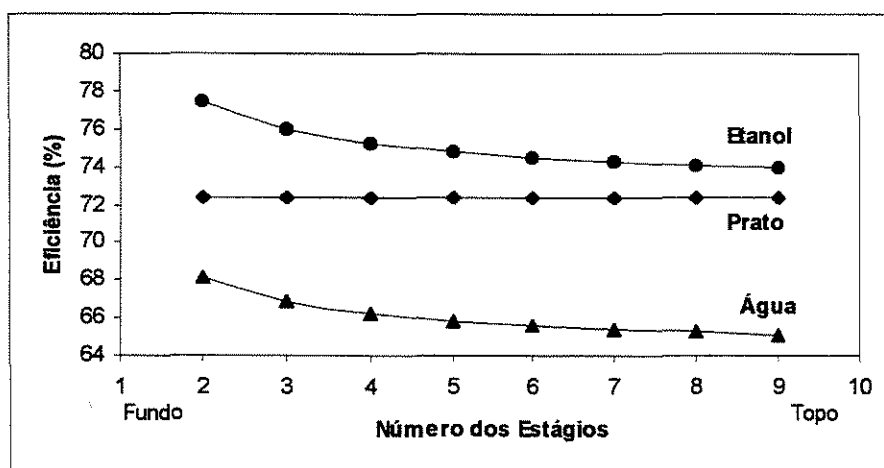


Figura X.3 – Perfis das eficiências do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 8)

Desta forma, fica claro que o componente mais volátil apresentou maiores valores de eficiência quando comparado com o componente menos volátil. A eficiência de prato situou-se entre os perfis de eficiência dos componentes, conforme representação gráfica da Figura X.3.

X.1.4 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 11

O ensaio 11 envolve a coluna de destilação com isolamento térmico, cujo perfil da eficiência de prato, descrito na Figura X.4, mostra a constância deste parâmetro ao longo da coluna, com uma ligeira queda no estágio 2. Para os componentes constituintes do sistema, os perfis de eficiência mostram um ligeiro decréscimo em direção a região de maior concentração do componente mais volátil.

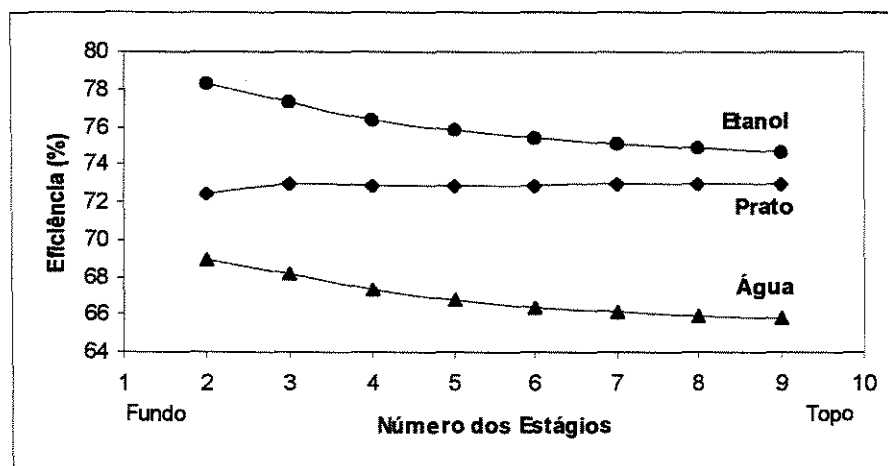


Figura X.4 – Perfis da eficiência do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 11)

O perfil da eficiência de prato situou-se entre os perfis dos componentes, aproximando-se do perfil do etanol, o que identifica a grande influência deste componente sobre a eficiência do prato. O componente mais volátil apresenta maiores valores de eficiência quando comparado com o componente menos volátil, comportamento similar ao observado nos estudos realizados por COULSON et al. (1983). Para o componente mais volátil a eficiência variou de 74,7 a 78,3% do topo para o fundo da coluna, respectivamente, e para o componente menos volátil esta variação foi de 65,7 a 68,9% na mesma direção.

X.1.5 Avaliação da eficiência de Barros & Wolf – Ensaio 12

Assim como no ensaio 11, a coluna de destilação foi operada com isolamento térmico e os resultados obtidos para a eficiência de Barros & Wolf estão descritos na Figura X.5. Conforme se observa, a eficiência do prato apresentou um ligeiro acréscimo em direção ao topo da coluna de destilação, situando-se entre os valores de eficiência dos componentes, na faixa de 71,6 a 72,9%.

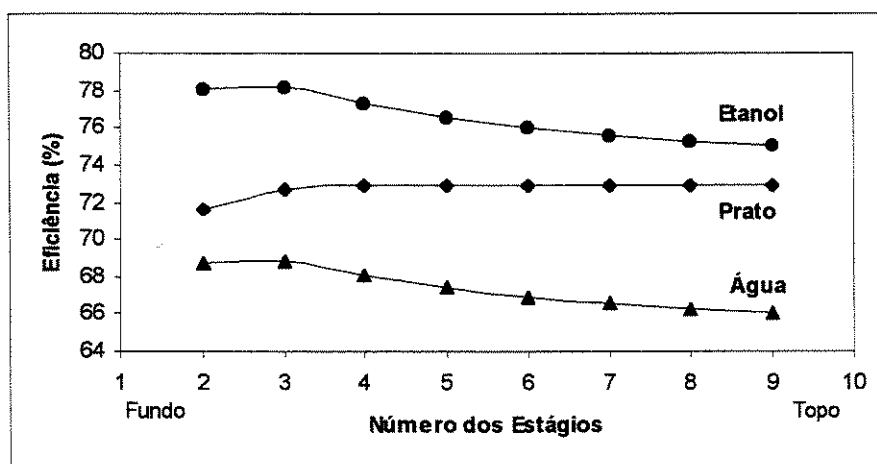


Figura X.5 – Perfis da eficiência do prato e dos componentes baseados na correlação de Barros & Wolf (Ensaio 12)

Para os componentes, as eficiências tendem a diminuir do fundo para o topo da coluna, sendo que o componente mais volátil apresenta maiores valores quando comparados aos valores do componente menos volátil. Para a água as eficiências variaram de 66 a 69% e para o etanol de 75 a 78%.

CONCLUSÃO

De acordo com os resultados obtidos e apresentados nas Figuras X.1 a X.5, as seguintes características em todos os perfis foram observadas:

- a eficiência do prato mantém-se praticamente constante ao longo da coluna de destilação, situando-se entre 71 e 73%;
- os componentes apresentam maiores valores de eficiência na região de maior concentração do componente menos volátil;
- para o componente de maior volatilidade, os valores da eficiência foram relativamente maiores que o de menor volatilidade, variando entre 73 e 78% ao longo do equipamento;

- a eficiência do prato situou-se entre a eficiência dos componentes.

Os perfis obtidos para o sistema binário (etanol/água) estão relacionados com a correlação da eficiência de Barros & Wolf, que é função de propriedades físicas e térmicas dos componentes presentes na mistura. Os resultados oriundos da avaliação dos parâmetros envolvidos na correlação da eficiência de Barros & Wolf para o sistema etanol/água mostram que o peso molecular, a difusividade mássica e a viscosidade da mistura aumentam em direção ao topo da coluna, ao passo que a densidade, a condutividade térmica e a capacidade calorífica da mistura líquida diminuem nesta direção (SOARES et al., 1999). O comportamento dos parâmetros térmicos e físicos utilizados na correlação de Barros & Wolf reflete no comportamento da eficiência do prato e de componentes ao longo da coluna de destilação. O aumento da eficiência dos componentes em direção ao fundo da coluna confirma a teoria de que altos valores de eficiência são obtidos na região de menor concentração do componente mais volátil. Isto é devido ao maior valor da inclinação da curva de equilíbrio nesta região, que promove um aumento no gradiente de concentração no prato (BIDDULPH et al., 1986). Além disto, ao se observar os perfis das frações molares apresentados no Capítulo VIII, verifica-se que as maiores modificações nas frações molares ocorrem na região próxima ao refeedor culminando num maior tempo de contato entre as fases e, conseqüentemente, altos valores dos coeficientes de transferência de massa e calor na fase líquida nesta região, cuja abordagem do comportamento destes parâmetros é feita no Capítulo XI.

Ao se comparar os perfis de eficiência obtidos utilizando a correlação de O'Connell e a correlação de Barros & Wolf observa-se que:

- o componente mais volátil apresenta maiores valores de eficiência para ambas as correlações;

- a eficiência do prato situa-se entre a eficiência dos componentes e está mais próxima da eficiência do componente mais volátil, demonstrando a influência deste componente sobre o comportamento dos perfis de eficiência;
- o componente menos volátil apresenta menores valores de eficiência para ambas as correlações;
- as maiores variações nos perfis de eficiência encontram-se na região próxima ao refeedor, região esta com maiores gradientes de composição.

As diferenças de comportamento observadas entre a eficiência de Murphree e as correlações de O'Connell e Barros & Wolf estão relacionadas aos próprios parâmetros das equações. Enquanto a eficiência de Murphree é função apenas das frações dos componentes e da fração de equilíbrio (equação VI.10), a correlação de O'Connell é função da volatilidade relativa e da viscosidade da mistura (equação VI.31) e a correlação de Barros & Wolf é função da condutividade térmica, capacidade calorífica, densidade, viscosidade, difusividade mássica e peso molecular médio. Todos estes parâmetros variam de forma distinta ao longo da coluna de destilação e este comportamento se reflete nas diferentes expressões. Das equações apresentadas, a que mostra maior sensibilidade à modificações é a eficiência de Murphree, conforme observado na seção VIII.5. Qualquer variação nas frações molares dos componentes promove grandes discrepâncias nos valores da eficiência.

CAPÍTULO XI

AVALIAÇÃO DOS COEFICIENTES DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA E CALOR

A ausência de um estudo sobre o comportamento dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo de uma coluna de destilação com pratos perfurados, parâmetros de extrema importância na avaliação dos processos de separação difusionais, foi a motivação para o desenvolvimento deste capítulo. Fez-se um estudo do comportamento dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo da coluna de destilação operando a refluxo total no estado estacionário, empregando-se o sistema etanol/água. Estas análises permitiram uma compreensão mais adequada do comportamento dos coeficientes de transferência de massa e calor e a influência de alguns parâmetros do processo.

XI.1 Coeficientes Binários de Transferência de Massa

Para avaliar os coeficientes binários de transferência de massa utilizou-se o programa computacional desenvolvido por BARROS (1997) que inclui a modelagem de estágios de não equilíbrio para a simulação de colunas de

destilação. Nele estão inclusos subprogramas para o cálculo dos parâmetros de transferência de massa. Para a fase vapor utilizou-se o método do AIChE (1958) para coluna de pratos (equação XI.1) e para a fase líquida a equação XI.2:

$$k_{b,i,j,k}^V \cdot a_i = \frac{(0,776 + 0,04567 \cdot HW - 0,2377 \cdot 10^{-1/2} \cdot F_i^F + 87,319 \cdot 10^{-6} \cdot L_i^F) \cdot F_i^V}{\left(\frac{10^{-2} \cdot \mu_i^{mist,V}}{\rho_i^{mist,V} \cdot DIF_{i,j,k}^V} \right)^{0,5}} \quad (XI.1)$$

$$k_{b,i,j,k}^L \cdot a_i = (4,124 \cdot 10^4 \cdot DIF_{i,j,k}^L)^{0,5} \cdot (0,21313 \cdot 10^{-1/2} \cdot F_i^F + 0,15) \cdot t_{L,i} \cdot F_i^L \quad (XI.2)$$

onde:

a	área interfacial (cm ²)
DIF	difusividade binária (cm ² /s)
F	fluxo mássico total (mol/s)
F ^F	fator F definido como o produto do fluxo volumétrico de vapor e a raiz quadrada da densidade do vapor
HW	altura da represa (cm)
kb	coeficiente binário de transferência de massa (mol/cm ² .s)
L ^F	fluxo volumétrico do líquido por unidade de espaçamento médio (cm ² /s)
t _L	tempo de residência médio do líquido sobre o prato (s)
μ	viscosidade (g/cm.s)
ρ	densidade (g/cm ³)
i	estágio

j, k	componente
V	fase vapor
L	fase líquida

Conforme se observa nas equações XI.1 e XI.2, muitos dos parâmetros relacionados não são de fácil obtenção experimental, tais como a área interfacial, o fator F e o tempo de residência médio do líquido sobre o prato. Assim, para a determinação dos coeficientes de transferência de massa, foram realizadas simulações com base nas condições de operação dos ensaios experimentais. Os perfis de temperatura e composição foram, então, comparados com os obtidos a partir dos modelos (Capítulo IX) e, devido aos bons resultados, foram utilizados no cálculo dos coeficientes de transferência de massa. Portanto, neste item, é avaliado o comportamento dos coeficientes binários de transferência de massa nas fases líquida e vapor ao longo da coluna de destilação a partir de simulações com os dados experimentais, bem como a fase que oferece maior resistência à transferência de massa. Para esta avaliação foram selecionados os ensaios 5, 6, 8, 11 e 12, ou seja, os mesmos ensaios utilizados na corroboração da modelagem de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio.

Nos processos de separação difusionais, a presença de misturas de fluidos interfaciais envolvendo duas fases com frações molares distintas e a forte interação entre elas proporciona a transferência de massa e calor. À medida que uma substância leve evapora, desenvolve-se uma região de maior densidade próximo à interface, tendo, como consequência, a geração de uma região líquida de baixa densidade. A instabilidade gerada deste fenômeno tende ao equilíbrio através do movimento das moléculas, onde o líquido interfacial pesado desce e o leve ascende. Esta circulação aumenta o coeficiente de transferência de massa da fase líquida e, analogamente, a ação da convecção natural na transferência de calor. Por conseguinte, o líquido próximo à interface tem a tensão superficial superior quando comparado com o líquido interior. Portanto, as

moléculas circulam e eliminam o líquido da região próxima à superfície e o substituem por um líquido interior que é favorecido energeticamente, pois diminui a energia superficial do sistema. Como consequência, os coeficientes de transferência de massa na fase líquida aumentam (KING, 1980).

Dados experimentais obtidos por LIANG e SMITH (1962) mostram que a eficiência de prato e da coluna aumentam com a composição quando a temperatura é alta; assim, o aumento da eficiência é interpretado como uma função da transferência simultânea de massa e calor. Quando a força motriz térmica é grande, os gradientes da tensão superficial são grandes também devido ao efeito da viscosidade. Por isso, nos processos de destilação a tensão superficial afeta a transferência de massa e calor.

Na Figura XI.1 está descrito o comportamento dos coeficientes binários de transferência de massa dos componentes do sistema etanol/água na qual se observa que estes parâmetros aumentam do topo para o fundo da coluna, com os valores praticamente similares para a interação etanol-água e água-etanol. Este comportamento decorre das fortes interações entre as fases na região próxima ao fundo da coluna e que contribuem no aumento da área interfacial, uma vez que favorecem a turbulência, além do aumento do tempo de contato entre as fases, efetivando, assim, o processo de transferência de massa. Tal comportamento se reflete nos perfis das frações molares e, conseqüentemente, nos perfis de eficiência. Conforme caracterizado no Capítulo X, as eficiências dos componentes também apresentaram valores mais acentuados nesta região e os perfis das frações molares apresentaram maiores variações na região próxima ao fundo da coluna. Assim, pode-se afirmar que a região próxima ao refeedor apresenta maiores valores de eficiência e dos coeficientes de transferência de massa na fase líquida.

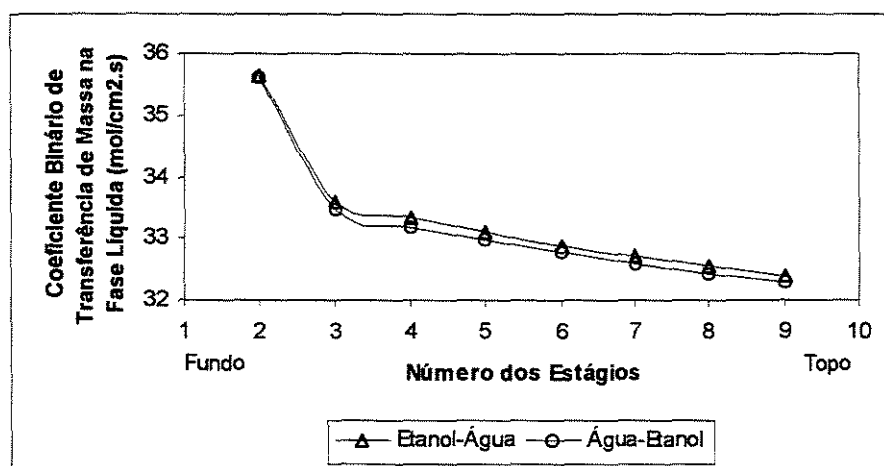


Figura XI.1 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 5)

Na região próxima ao topo nota-se uma certa estabilidade, tanto com relação a eficiência quanto com as frações molares. Este comportamento tende a diminuir a transferência de massa, afetando, assim, os coeficientes de transferência de massa que aumentam com o aumento dos gradientes de concentração entre as fases.

Nas Figuras XI.2, XI.5, XI.6 e XI.7, os perfis dos coeficientes binários de transferência de massa são similares para a interação binária etanol-água e água-etanol, com valores mais acentuados para a interação etanol-água decorrentes do fato de a difusão do etanol na água ser facilitada quando comparada com a difusão da água no etanol.

Conforme estabelecido anteriormente, um dos propósitos desta seção é avaliar a fase que oferece maior resistência à transferência de massa. Assim, é necessário identificar a condição de saturação de uma das fases, que, para a fase líquida ocorre quando os coeficientes binários de transferência de massa são muito grandes, conforme se observa nas Figuras XI.1, XI.2, XI.5, XI.6 e XI.7.

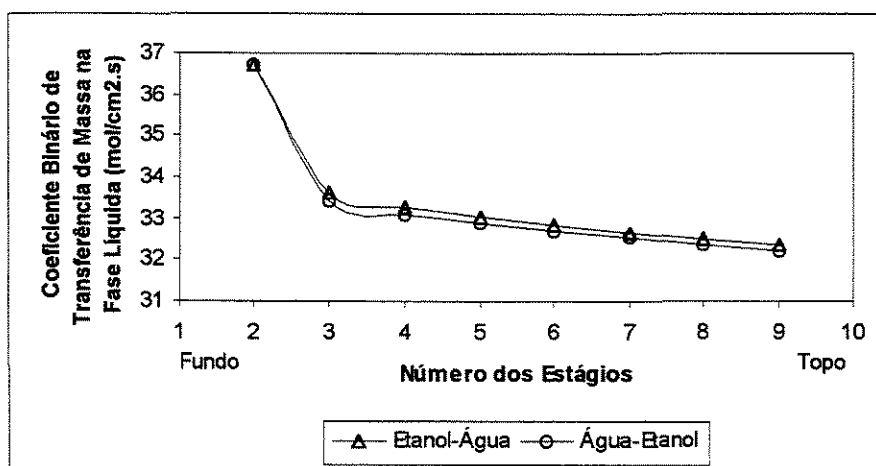


Figura XI.2 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 6)

Nesta condição, a resistência à transferência de massa na fase líquida é baixa (KAYIHAN et al., 1975 a, b), uma vez que a resistência é inversamente proporcional aos coeficientes binários de transferência de massa. Assim, pode-se considerar que quando os valores dos coeficientes tendem ao infinito, as frações molares dos componentes no seio da fase líquida se igualam ao da interface.

A observação da condição de saturação na fase líquida foi constatada por PESCARINI (1996) quando da simulação de sistemas multicomponentes. Pescarini constatou que as frações molares na fase líquida e na interface se sobrepõem ao longo da coluna, o que indica a ausência de resistência à transferência de massa para os processos de destilação na fase líquida.

De acordo com os trabalhos de KAYIHAN et al. (1975 a, b), a fase líquida é considerada saturada quando os valores dos coeficientes de transferência de massa são elevados se comparados aos da fase vapor. Altos coeficientes de transferência de massa significam aumento na facilidade de transferência de massa entre a fase líquida e a interface. Nesta condição, a resistência à

transferência de massa torna-se desprezível, por não existir um gradiente de concentração entre a interface líquida e a fase líquida propriamente dita.

Para ilustrar tal afirmação, foram realizadas simulações utilizando os dados de operação do ensaio 6, cujos resultados, representados na Figura XI.3, mostram inteira sobreposição quando os valores da composição na fase líquida e na interface são comparados, significando que a resistência à transferência de massa é negligenciável na fase líquida e que a fase vapor é a que controla o processo de transferência de massa.

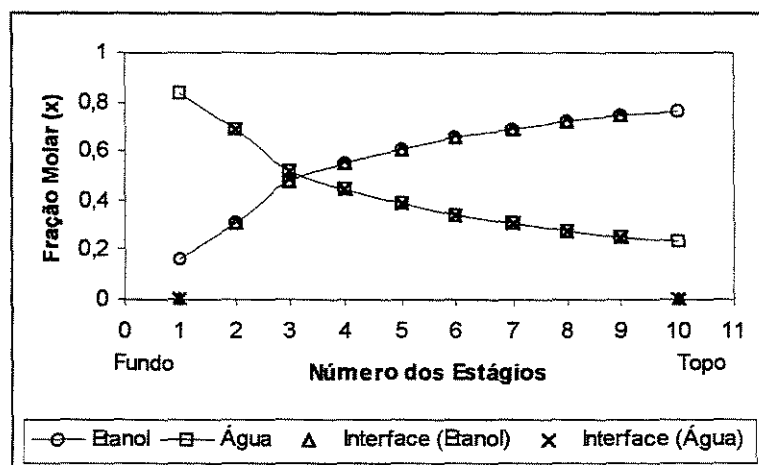


Figura XI.3 – Perfis das frações molares na interface e na fase líquida (Ensaio 6)

É necessário demonstrar, também, que na fase vapor o comportamento dos perfis é diferenciado, ou seja, não ocorre a sobreposição dos perfis das frações molares entre a interface e a fase vapor propriamente dita, conforme indica a Figura XI.4.

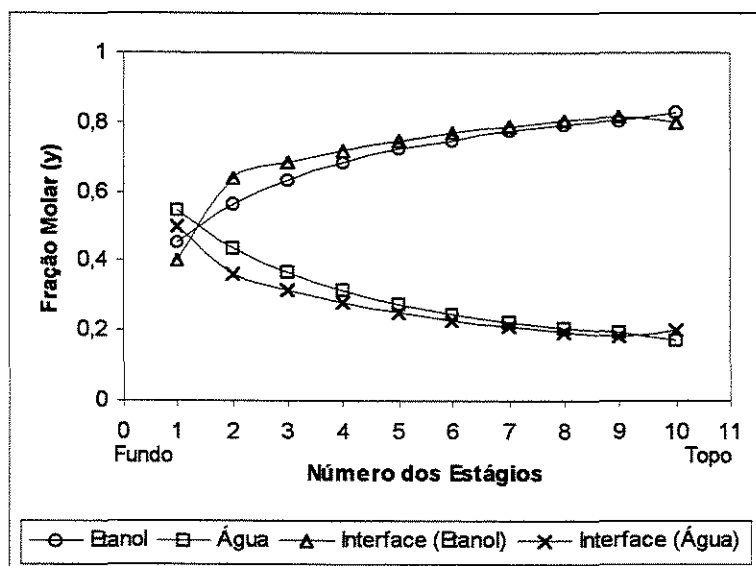


Figura XI.4 – Perfis das frações molares na interface e na fase vapor (Ensaio 6)

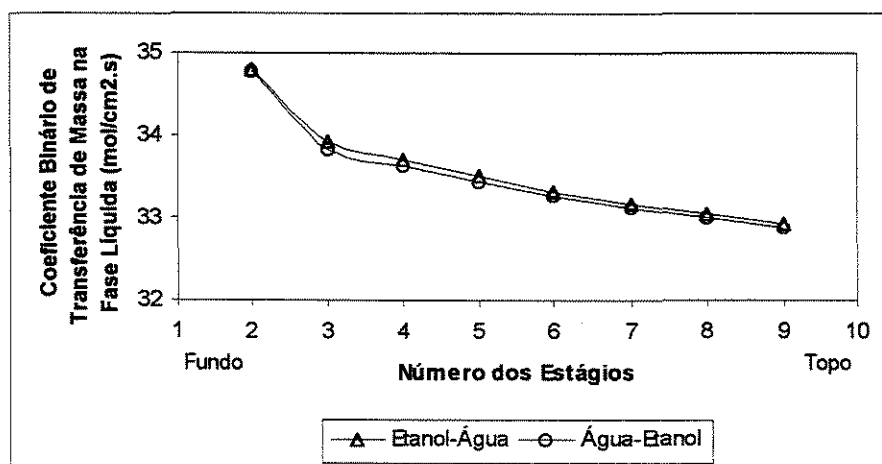


Figura XI.5 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 8)

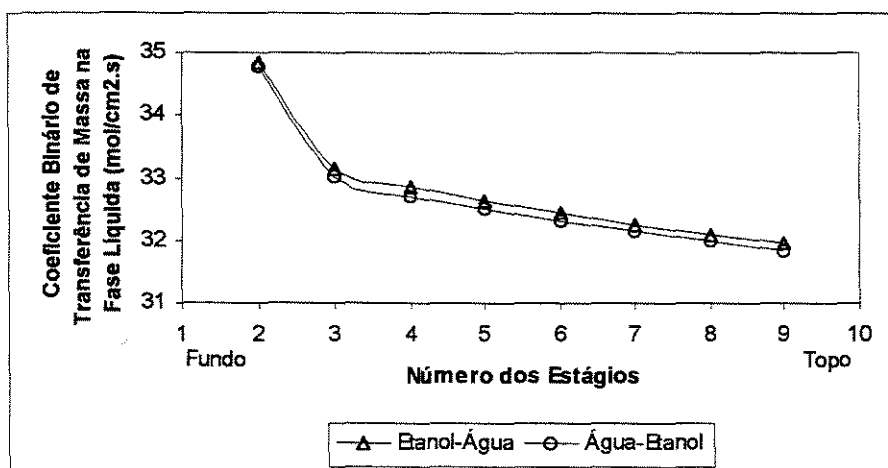


Figura XI.6 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 11)

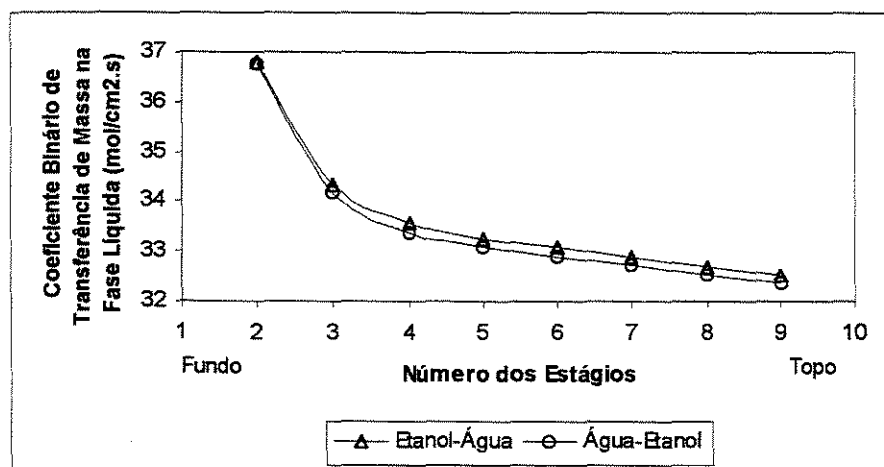


Figura XI.7 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida (Ensaio 12)

Apesar de não se dispor de dados experimentais para a fase vapor, os resultados obtidos para a fase líquida foram utilizados para a simulação, os quais permitiram a obtenção do comportamento dos parâmetros na fase vapor. Nas Figuras XI.8, XI.9, XI.10, XI.11 e XI.12, observa-se que os coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor são, numericamente, menores quando

comparados àqueles obtidos para a fase líquida (Figuras XI.1, XI.2, XI.5, XI.6 e XI.7).

Este comportamento mostra que a resistência à transferência de massa é acentuadamente maior na fase vapor. Nota-se, também, que na fase vapor os coeficientes binários do par etanol/água não diferem dos coeficientes binários do par água-etanol, o que não se observa na fase líquida, pois, nesta fase, ocorre a sobreposição dos perfis para os pares binários etanol-água e água/etanol, conforme Figuras XI.8, XI.9, XI.10, XI.11 e XI.12, devido a facilidade que a água e o etanol possuem em se difundir na fase vapor.

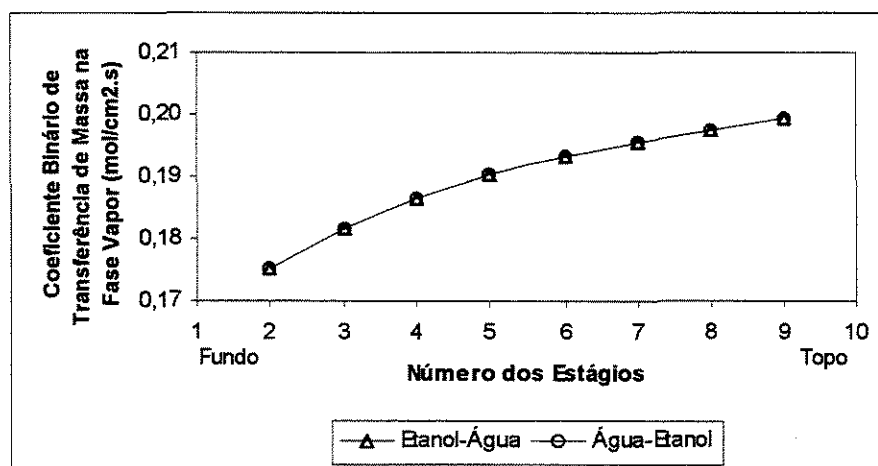


Figura XI.8 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 5)

Além disto, os coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor aumentam em direção ao topo da coluna, mostrando, desta forma, comportamento inverso ao da fase líquida. Assim, é necessário avaliar o comportamento dos parâmetros presentes nas equações envolvidas nos cálculos dos coeficientes binários de transferência de massa ao longo da coluna de destilação.

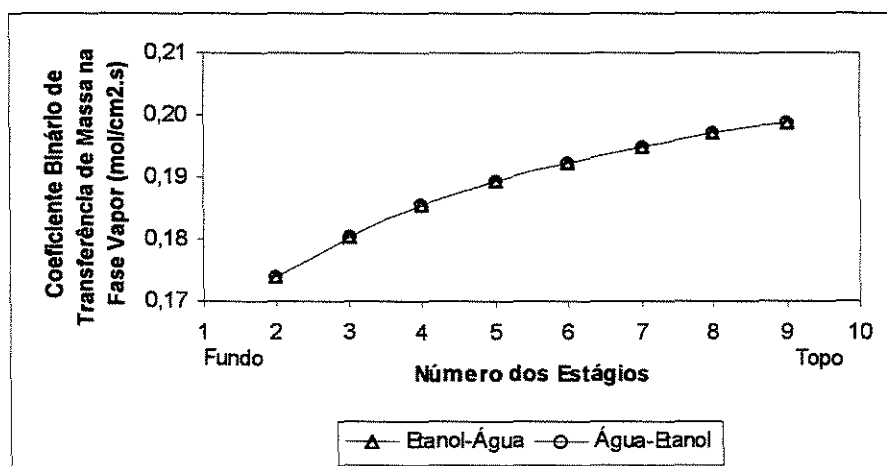


Figura XI.9 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 6)

Conforme se observa na equação XI.2, os coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida são definidos como função da difusividade mássica, do fluxo de líquido e do tempo de contato.

Segundo SOARES et al. (1999), a difusividade mássica da mistura etanol/água na fase líquida aumenta em direção ao topo da coluna, enquanto que o tempo de contato e o fluxo de líquido diminuem neste sentido. Assim, para esta avaliação, a difusividade mássica, apesar de aumentar em direção ao topo, não parece ser o parâmetro de maior influência sobre o comportamento dos coeficientes de transferência de massa nesta fase. Além disto, o comportamento dos coeficientes de transferência de massa binários estão relacionados ao comportamento da eficiência, conforme observações anteriores. Foi observado também que o tempo de contato e o fluxo de líquido são maiores na região próxima ao refeedor. Logo, estes parâmetros tem maior influência sobre o comportamento dos coeficientes de transferência de massa na fase líquida.

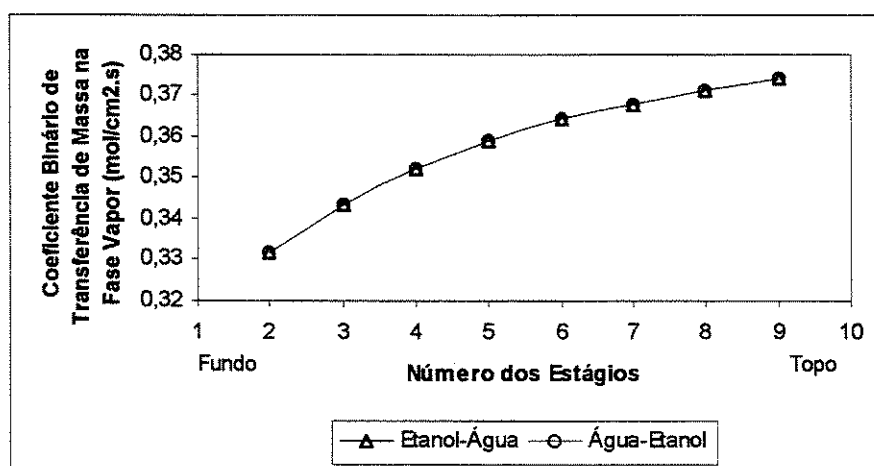


Figura XI.10 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 8)

Para a fase vapor foram obtidos perfis que diferem dos observados na fase líquida. Para a determinação dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor foi empregada a equação XI.1, que envolve, além do fator F e do fluxo de vapor, propriedades físicas e térmicas, como a viscosidade absoluta, a densidade e a difusividade mássica da mistura, todas em relação à fase vapor. A avaliação separada de cada um destes parâmetros mostrou que:

- a viscosidade absoluta da mistura etanol/água na fase vapor diminui em direção ao topo da coluna;
- a densidade e a difusividade mássica da mistura na fase vapor aumentam em direção ao topo;
- o fluxo de vapor aumenta na região de maior concentração do componente mais volátil.

Desta forma, pode-se concluir que os parâmetros de maior influência nos perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor são a difusividade mássica, a densidade e o fluxo de vapor.

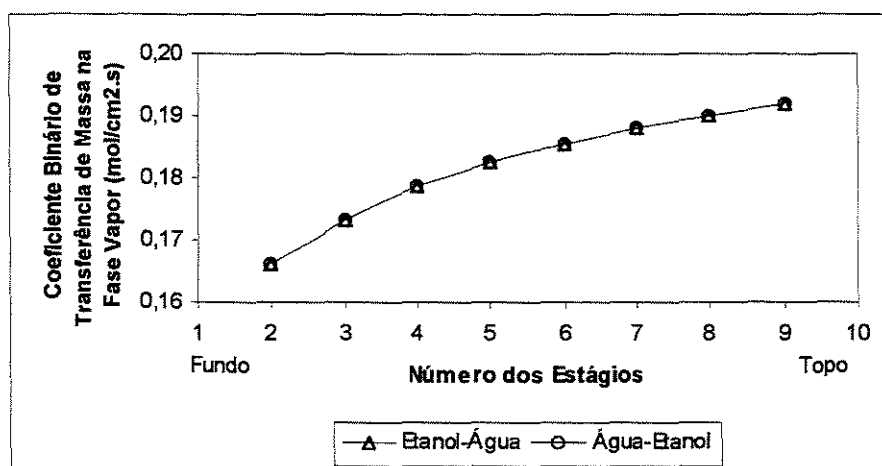


Figura XI.11 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 11)

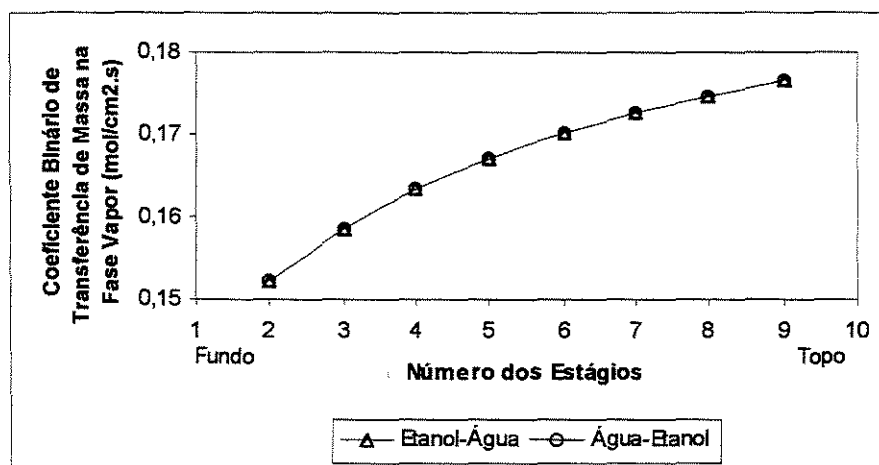


Figura XI.12 – Perfis dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor (Ensaio 12)

XI.2 Coeficientes de Transferência de Calor

De maneira similar aos coeficientes de transferência de massa, para a determinação dos coeficientes de transferência de calor foram realizadas simulações nas mesmas condições experimentais dos ensaios 5, 6, 8, 11 e 12. No cálculo dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor foi utilizada a analogia de Chilton-Colburn (equação XI.3) e, para a fase líquida, a analogia da penetração (XI.4):

$$hc_i^V \cdot a_i = \left(kb_{i,j,k}^V \right)^{\text{médio}} \cdot Cp_i^{\text{mist},V} \cdot \left(Le_i^V \right)^{2/3} \quad (\text{XI.3})$$

$$hc_i^L \cdot a_i = \left(kb_{i,j,k}^L \cdot a_i \right)^{\text{médio}} \cdot Cp_i^{\text{mist},L} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_i}{\left(DIF_{i,j,k}^L \right)^{\text{médio}}}} \quad (\text{XI.4})$$

onde:

hc	coeficiente de transferência de calor ($\text{J}/\text{cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}$)
Cp	capacidade calorífica a pressão constante ($\text{J}/\text{mol} \cdot \text{K}$)
Le	número de Lewis
α	difusividade térmica (cm^2/s)

De uma maneira geral, as correntes no interior de uma coluna de destilação diferem entre si pela temperatura e composição e, portanto, tendem ao equilíbrio mediante fenômenos de transferência de massa e calor. Estudos mostram que o vapor que chega ao prato está necessariamente a uma temperatura superior àquela do líquido proveniente do prato superior. Devido a

este gradiente de temperatura, ocorre a transferência global de calor da fase vapor para a fase líquida no decorrer do processo de transferência de massa.

Os efeitos da transferência de calor, normalmente, são negligenciados quando da análise da transferência de massa segundo a modelagem de estágios de equilíbrio. Este fato pode ser observado no AIChE (1958). KIRSCHBAUM (1940) sugeriu a avaliação da eficiência do prato de destilação como função da transferência de calor entre as fases líquida e vapor. LIANG e SMITH (1962) consideraram a interação entre a transferência de massa e calor como possibilidade para excluir o superaquecimento na fase líquida ou o subresfriamento na fase vapor. Segundo os autores, os termos relacionados ao fluxo de massa podem ser associados à equação do fluxo difusional para levar em conta a condensação da fase vapor e a vaporização da fase líquida. A relação de equilíbrio no processo de destilação causado pela evaporação e condensação resultam da transferência simultânea da massa e calor e o efeito observado é devido, geralmente, ao elevado valor do calor latente de vaporização. Na ausência de transferência de calor, a composição interfacial tende a valor cujo fluxo de massa é o mesmo em cada fase, para evitar o acúmulo na interface. Analogamente, na ausência de transferência de massa, a temperatura interfacial tende a valores que permitam iguais velocidades de transferência de calor naquela direção e deste à interface. A temperatura na interface é, por conseguinte, a média das temperaturas das duas fases multiplicada pelo coeficiente de transferência de calor de cada fase (KING, 1980), conforme a equação XI.5.

$$T^I = \frac{hc^V \cdot T^V + hc^L \cdot T^L}{hc^V + hc^L} \quad (XI.5)$$

onde:

T^I temperatura na interface (K)

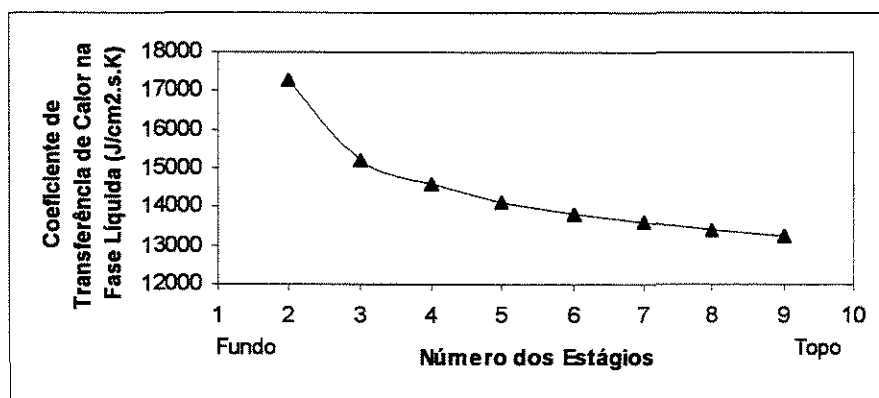


Figura XI.13 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 5)

Como se observa nas Figuras XI.13, XI.15, XI.18, XI.20 e XI.22, os coeficientes de transferência de calor na fase líquida são, substancialmente, maiores que os coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Figuras XI.14, XI.17, XI.19, XI.21 e XI.23) devido à elevada condutividade térmica da fase líquida (KING, 1980).

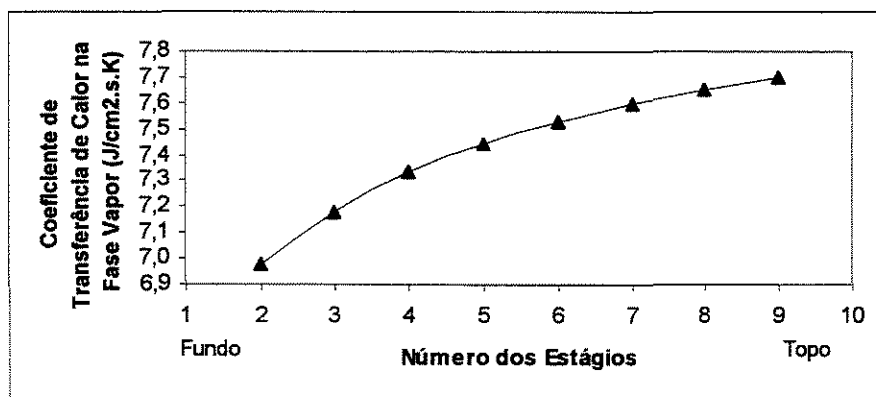


Figura XI.14 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 5)

Desde que o espaçamento intermolecular no estado vapor é maior que no estado líquido, e que o movimento das moléculas é mais caótico no primeiro do que no segundo estado, o transporte de energia térmica no estado vapor é menos efetivo. Logo, a condutividade térmica na fase vapor tende, em geral, a ser menor que na da fase líquida. Como consequência, a temperatura na interface estará mais próxima da temperatura da fase líquida.

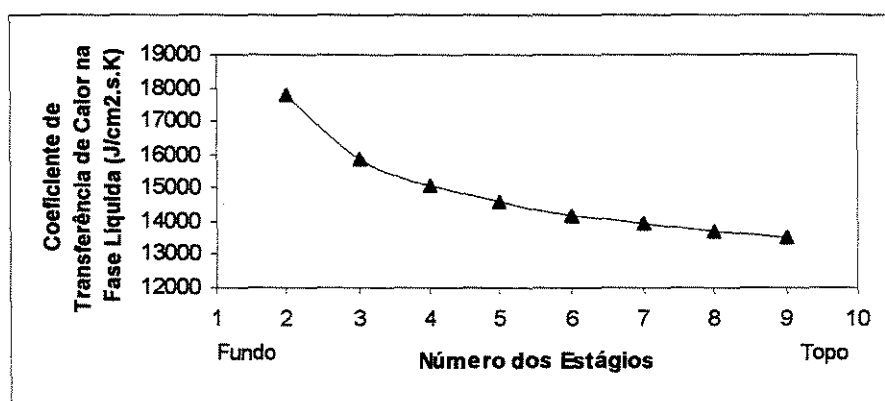


Figura XI.15 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 6)

A partir da Figura XI.16 é possível observar que as temperaturas na fase líquida e na interface são basicamente as mesmas. Logo, pode-se afirmar que a resistência à transferência de calor na fase líquida é negligenciável. A temperatura da fase vapor é maior que a da fase líquida e, devido a diferença de temperatura com a interface, a fase vapor é a que controla o processo de transferência de calor nos processos de separação por destilação.

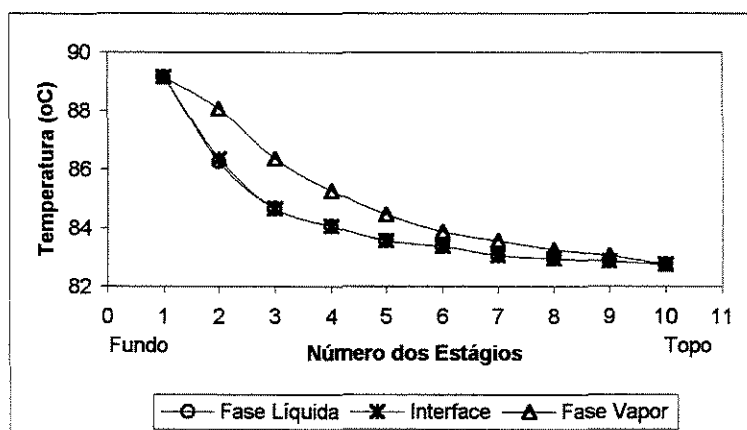


Figura XI.16 – Perfis de temperatura nas fases líquida e vapor e na interface líquido/vapor (Ensaio 6)

PESCARINI (1996) demonstrou que as temperaturas da fase líquida e interface tendem também a se sobrepor, conforme a Figura XI.16, obtida com base nas simulações utilizando-se a modelagem de estágios de não equilíbrio.

Quando a transferência de calor e massa têm lugar simultaneamente, a composição e a temperatura interfacial atingem o equilíbrio de acordo com o diagrama de equilíbrio de fases. Com o objetivo de manter esta condição, ocorre a evaporação ou a condensação na interface de modo a permitir fluxos de calor entre as fases.

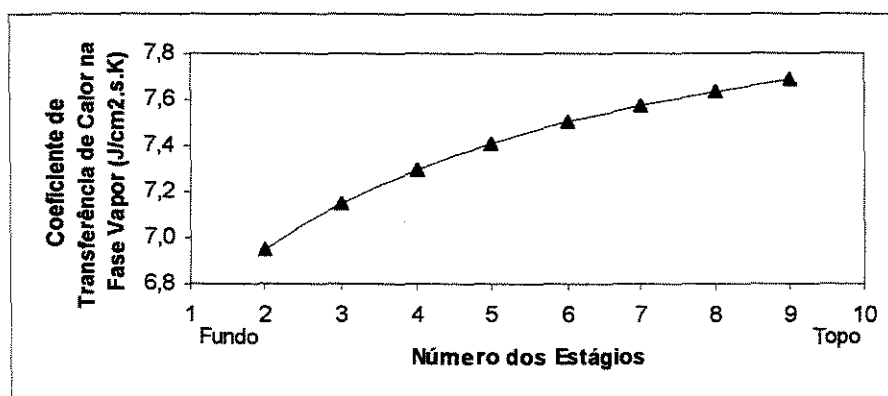


Figura XI.17 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 6)

Como os coeficientes de transferência de calor na fase líquida são maiores que na fase vapor, ocorrem fluxos maiores de calor na interface líquida quando comparados com os fluxos na interface gasosa.

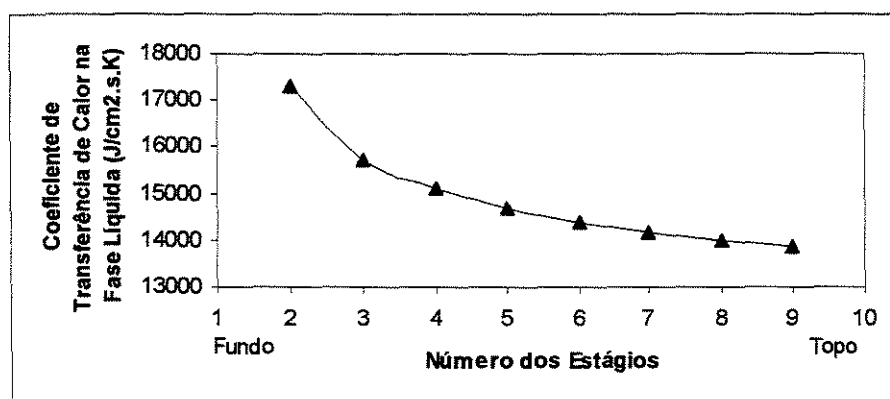


Figura XI.18 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 8)

Portanto, surge a condensação na interface permitindo a liberação do calor através do líquido. Esta condensação afeta os coeficientes de transferência

de massa e calor no vapor e no líquido e tende a produzir a supersaturação do líquido.

Analogamente aos coeficientes de transferência de massa, é fundamental identificar as causas da diminuição dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida e do seu aumento na fase vapor em direção ao topo da coluna. Para tanto, é necessário avaliar as correlações utilizadas no cálculo dos coeficientes de transferência de calor para as fases líquida e vapor.

Para expressar os coeficientes de transferência de calor na fase líquida foi utilizada a analogia da penetração descrita como função dos coeficientes de transferência de massa binários na fase líquida, da capacidade calorífica, do parâmetro alfa (definido no Capítulo IV) e da difusividade mássica, todos em relação a fase líquida. Analisando, qualitativamente, o comportamento destes parâmetros isoladamente observou-se que:

- o comportamento dos coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida, de acordo com os perfis obtidos na seção XI.1, diminuem em direção ao topo da coluna;
- a capacidade calorífica da mistura na fase líquida diminui em direção ao topo;
- a difusividade mássica aumenta. Entretanto, os coeficientes de transferência de calor são inversamente proporcionais a este parâmetro (equação XI. 4).

Logo, conclui-se que os perfis dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida são fortemente influenciados pelo comportamento das propriedades e parâmetros identificados acima.

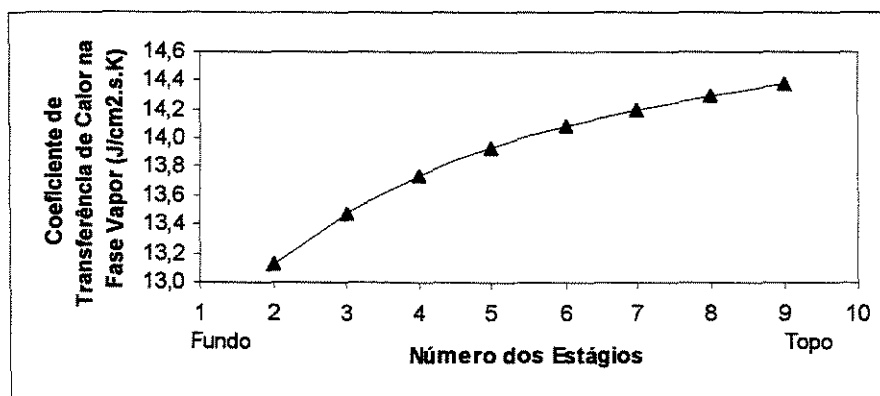


Figura XI.19 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 8)

No cálculo dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor foi utilizada a analogia de Chilton-Colburn, que relaciona a média dos coeficientes de transferência de massa binários na fase vapor, a capacidade calorífica e o número de Lewis.

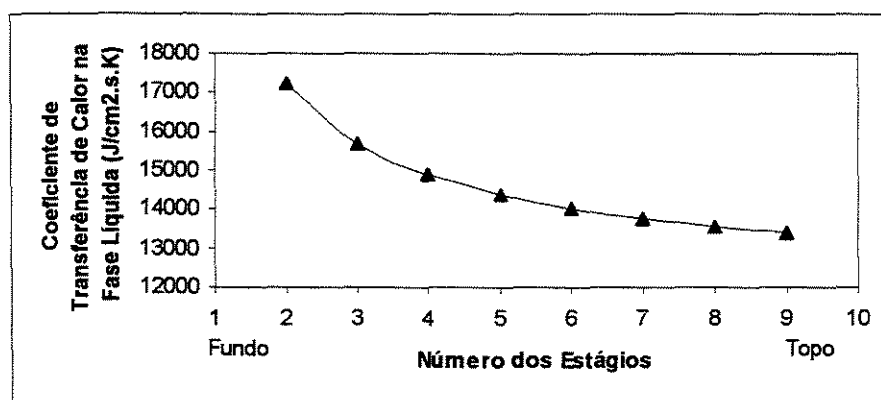


Figura XI.20 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 11)

A verificação do comportamento dos parâmetros presentes na equação mostra que:

- os coeficientes de transferência de massa apresentam comportamento similar aos coeficientes de transferência de calor, ou seja, aumentam em direção ao topo do equipamento. Este comportamento é observado também para a capacidade calorífica da mistura na fase vapor;
- o número de Lewis, para a fase vapor, aumenta em direção ao topo da coluna na fase vapor.

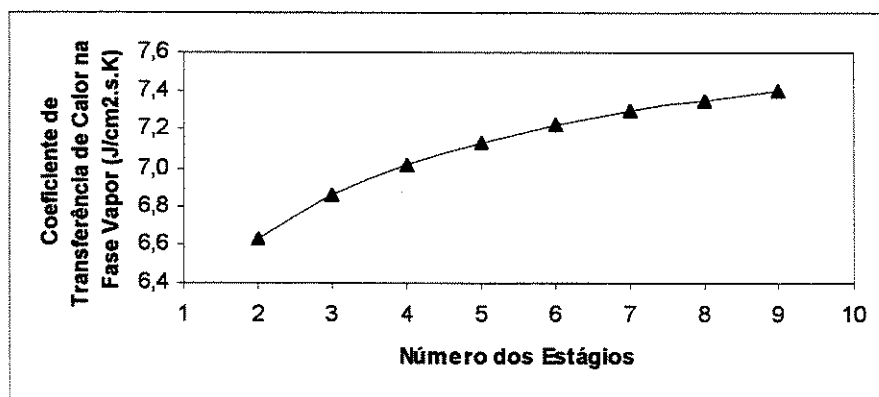


Figura XI.21 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 11)

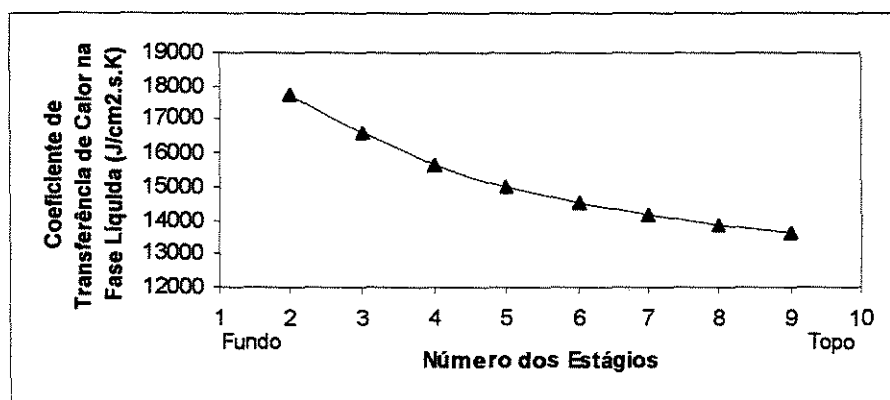


Figura XI.22 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase líquida (Ensaio 12)

Sendo assim, os coeficientes de transferência de calor na fase vapor possuem seu comportamento regido pelo comportamento dos parâmetros envolvidos na equação.

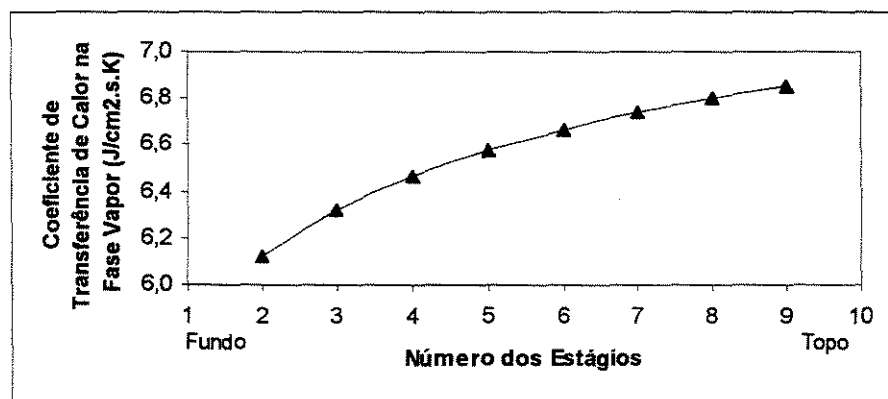


Figura XI.23 – Perfil dos coeficientes de transferência de calor na fase vapor (Ensaio 12)

CONCLUSÃO

Neste capítulo foram apresentados os resultados obtidos da avaliação do comportamento dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo da coluna de destilação. Resumidamente observou-se que:

- os coeficientes binários de transferência de massa na fase líquida diminuem em direção ao topo da coluna de destilação;
- os valores dos coeficientes binários de transferência de massa para a interação etanol-água e água-etanol diferem, o que não se observa na fase vapor;
- na fase vapor os coeficientes binários de transferência de massa aumentam em direção ao topo da coluna de destilação;
- para a fase líquida os coeficientes de transferência de massa são substancialmente maiores que os obtidos na fase vapor, comprovando que a fase líquida encontra-se saturada e que toda a resistência à transferência de massa se encontra na fase vapor;
- os coeficientes de transferência de calor apresentam comportamento similar aos coeficientes de transferência de massa, ou seja, diminuem em direção ao topo para a fase líquida e aumentam na mesma direção para a fase vapor;
- os coeficientes de transferência de calor da fase líquida são maiores quando comparados aos da fase vapor; e,
- a sobreposição dos perfis da temperatura da fase líquida e da interface demonstra que a fase vapor é a que controla o processo de transferência de calor no processo de destilação.

CAPÍTULO XII

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

XII.1 Conclusões

Com o desenvolvimento deste trabalho descreveu-se, de forma detalhada, uma metodologia experimental para a obtenção e o estudo dos perfis de concentração e temperatura em uma coluna de destilação com pratos perfurados e com vertedor. A coluna, com dez estágios, foi inteiramente projetada e construída para operar com o sistema etanol/água em diversas condições de operação. Nesta dissertação, trabalhou-se em condições de refluxo total, sem alimentação e sem retiradas de produto de topo e de fundo. Os resultados experimentais obtidos foram utilizados para o cálculo das eficiências de Murphree, O'Connell e para a validação da modelagem de estágios de equilíbrio, com a correlação de eficiência desenvolvida por Barros (correlação de Barros & Wolf), e da modelagem de estágios de não equilíbrio, que permitiu obter os perfis dos coeficientes de transferência de massa e calor ao longo da coluna de destilação.

Com base nos resultados experimentais, e considerando as diversas análises realizadas, conclui-se que:

- a utilização do isolamento térmico influencia diretamente nos dados experimentais obtidos e no tempo necessário para o alcance do estado estacionário;
- a carga térmica utilizada no processo exerce uma forte influência sobre os perfis de temperatura e composição e é fator preponderante na otimização energética dos processos de separação por destilação;
- as frações molares da alimentação e as cargas térmicas utilizadas nos experimentos influenciam diretamente na capacidade de separação da coluna;
- a eficiência não é constante ao longo do equipamento, podendo atingir valores negativos e até mesmo maiores que 1, decorrente de erros experimentais quando a eficiência de Murphree é utilizada;
- quando a correlação de O'Connell é utilizada a eficiência tende a aumentar do fundo para o topo da coluna e é maior para o componente mais volátil quando comparada com o componente menos volátil, com as eficiências de prato situadas entre as eficiências dos componentes;
- a eficiência de O'Connell apresenta comportamento diferenciado da correlação de Barros & Wolf, decorrente dos parâmetros relacionados nas equações;
- a correlação de Barros & Wolf para os processos de separação por destilação convencional mostra bom desempenho, uma vez que reproduz o comportamento do processo de maneira tão realista quanto a modelagem de estágios de não equilíbrio;
- ao se utilizar a correlação de Barros & Wolf, a eficiência do prato mantém-se praticamente constante ao longo da coluna de destilação;
- a eficiência dos componentes é maior na região de maior concentração do componente menos volátil decorrente da forte interação entre as fases na

superfície do prato e do elevado gradiente de concentração entre o líquido e o vapor nesta região quando a eficiência de Barros & Wolf é utilizada;

- os componentes constituintes da mistura apresentam valores de eficiência que diferem entre si, sendo a eficiência do componente mais volátil maior que a do componente menos volátil, para o caso em estudo, quando as correlações de O'Connell e de Barros & Wolf são utilizadas;
- os valores da eficiência de prato situam-se entre os valores da eficiência dos componentes para as correlações de O'Connell e de Barros & Wolf;
- pequenas variações na eficiência do etanol promovem maiores variações na eficiência do prato, o que não se observa com o componente água. Assim, pode-se afirmar que a eficiência do etanol exerce maior influência sobre os valores da eficiência do prato quando a correlação de O'Connell e de Barros & Wolf são utilizadas;
- o modelo de estágios de não equilíbrio mostra-se ideal para o projeto e a simulação de colunas de destilação convencional, uma vez que permite a obtenção de perfis de concentração e temperatura nas fases líquida e vapor de maneira mais realista;
- os perfis das frações molares e da temperatura oriundos da simulação, tanto para a modelagem de estágios de equilíbrio quanto para a de não equilíbrio, aproximam-se dos experimentais, mostrando grande concordância nos resultados obtidos;
- para as frações molares, as diferenças percentuais foram mais acentuadas para a modelagem de estágios de não equilíbrio quando os valores simulados são comparados com os dados experimentais;
- as diferenças percentuais relacionadas à temperatura são menores para a modelagem de estágios de equilíbrio, se comparados com dados experimentais;
- a saturação da fase líquida indica a ausência da resistência à transferência de massa nesta fase. Isto está de acordo com observações experimentais de

KAYIHAN et al. (1975a, b), que trabalhou com o sistema metanol/água em uma coluna de parede molhada e, posteriormente, por HONORAT et al. (1978) usando o sistema tolueno/tricloroetileno. Assim, o processo de transferência de massa para o processo de destilação pode ser descrito em termos dos coeficientes de transferência de massa na fase vapor, pois a saturação da fase líquida indica que a resistência à transferência de massa pode ser negligenciada nesta fase;

- a influência dos coeficientes binários de transferência de massa na fase vapor é mais acentuada do que na fase líquida, isto porque, em geral, é a fase vapor que controla os processos de transferência de massa e calor;
- os coeficientes binários de transferência de massa e os coeficientes de transferência de calor na fase líquida são numericamente maiores que na fase vapor; este comportamento reflete a condição de saturação da fase líquida, caracterizada pela sobreposição dos perfis das frações molares e da temperatura na interface e na fase líquida propriamente dita;
- a região com maiores valores da eficiência, baseada na correlação de Barros & Wolf, é aquela com maiores valores dos coeficientes de transferência de massa na fase líquida;
- os coeficientes binários de transferência de massa e os coeficientes de transferência de calor na fase líquida aumentam em direção ao fundo da coluna, ocorrendo o inverso para a fase vapor;
- os dados referentes ao estágio 2 apresentam maiores desvios quando comparados com os dados simulados. Tal comportamento se deve a maior proximidade do estágio com o refeedor, acarretando um aumento na temperatura e na composição do etanol por tratar-se de amostras de vapor;
- o isolamento térmico da coluna mostra-se eficiente, uma vez que a comparação os perfis de temperaturas experimentais e simulados praticamente se sobrepõem quando da suposição de processo adiabático.

XII.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Os trabalhos destacados a seguir estão sendo ou passarão a ser realizados, dando continuidade a esta dissertação de mestrado. A necessidade de se avaliar microscopicamente o comportamento das fases na superfície de cada prato na coluna de destilação poderá indicar fenômenos dificilmente identificáveis utilizando modelos macros. A incorporação de modelos microscópicos na modelagem de estágios de não equilíbrio poderá constituir um novo estado de arte neste tipo de avaliação dos processos reais.

De uma forma resumida são apresentadas, a seguir, as seguintes sugestões:

- avaliação do regime transiente mediante o acompanhamento progressivo da variação do parâmetro selecionado com o tempo até o alcance do estado estacionário e comparação dos resultados obtidos com os resultados do programa DISNON (transiente) desenvolvido por PESCARINI (1999);
- avaliação das correlações utilizadas para a predição dos parâmetros físicos e de projeto contidos no programa desenvolvido para a modelagem de estágios de não equilíbrio e implementação de modificações que permitam aumentar a precisão dos dados simulados;
- avaliação da sensibilidade paramétrica do modelo;
- caracterização fenomenológica dos escoamentos nos pratos de colunas de destilação baseada nas equações constitutivas e nos balanços microscópicos de conservação do movimento, de massa e de energia, de forma a se identificar as regiões críticas da eficiência de transferência de massa;
- adaptação do programa da modelagem de estágios de equilíbrio e de não equilíbrio para a simulação de colunas de destilação sem alimentação e retiradas no topo e no fundo e sem a incorporação da suposição de equilíbrio mecânico;

-
- modificação da unidade de destilação de forma a operar com refluxo variável, com retiradas dos produtos do topo e do fundo e a avaliação do seu desempenho utilizando metodologia experimental.

CAPÍTULO XIII

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AIChE, ***Bubble tray design manual – Prediction of fractionation efficiency.*** New York: AIChE, 1958.

BARKER, P. E. , SELF, M. F. The evaluation of liquid mixing effects on a sieve plate using unsteady and steady state techniques. ***Chem. Eng. Sci.***, v.17, p. 541, 1962.

BARROS, Antônio André Chivanga. ***Desenvolvimento de modelo de estágios de não equilíbrio e proposição de correlações de eficiência para os processos de destilação convencional e extrativa.*** Campinas, SP, 1997. 246p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP.

BARROS, A. A. C., PESCARINI, M. H. e WOLF-MACIEL, M. R. Profiles of the nonequilibrium stage model and the equilibrium stage model using Murphree global efficiency in a multicomponent distillation. In: CONGRESO INTERAMERICANO DE COMPUTACIÓN APLICADA A LA INDUSTRIA DE PROCESOS, 3., 1996, Villa Maria – Cordoba – Republica Argentina. Anais do 3rd Congreso Interamericano de Computación Aplicada a La Industria de Procesos. Villa Maria: Facultad Regional Villa Maria, 1996. p. 129-132.

- BARROS, A. A. Chivanga, WOLF-MACIEL, M. R., FOSSY, M. F. Estudo da hidrodinâmica dos pratos de destilação. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 10., 1994, São Paulo. Anais do X Congresso Brasileiro de Engenharia Química. São Paulo: Associação Brasileira de Engenharia Química, 1994. v. 1, p. 363-368.
- BARROS, A. A. Chivanga. ***Avaliação da hidrodinâmica de um prato misto (perfurado e valvulado)***. Campina Grande, PB, 1992. 159p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Departamento de Engenharia Química, UFPB.
- BIDDULPH, M. W., KALBASSI, M. A., DRIBIKA, ***AIChE Journal***, v. 34, p. 618, 1988.
- BIDDULPH, M. W., DRIBIKA, M. M. Distillation efficiencies on a large sieve plate with small diameter holes. ***AIChE Journal***, v. 32, n. 8, p. 1383-1388, 1986.
- BIDDULPH, M. W. Predicted comparisons of the efficiency of large valve trays. ***AIChE Journal***, v. 23, n. 5, p. 770-771, 1977.
- BIRD, R. B., STEWART, W. E., LIGHTFOOT, E. ***Transport phenomena***. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1960. 780p.
- CASTELLS, P.F., BUGAREL, R., MORA, J. C., ***Rev. Inst. Franc. Petrole***, v.29, p. 849, 1974.
- CHAN, Hong, FAIR, James R. Prediction of point efficiencies on sieve trays. 1. Binary systems. ***Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.***, v. 23, n. 4, p.814-819, 1984.
- CHAVES, P. M. Dimensionamento de pratos perfurados. (Notas de aula), FDTE, 1980.
- CHILTON, T. H., COLBURN, A. P. Mass transfer coefficients – Prediction from data on heat transfer and fluid friction. ***Ind. Eng. Chem.***, v. 26, p.1183-1187, 1934.

CHU, J. C. Plate efficiency correlation in distilling columns and gas absorbers. **J. Appl. Chem.**, vol. 1, n. 12, p. 529-541, 1951.

COLBURN, A. P. Effect of entrainment on plate efficiency in distillation. **Ind. Eng. Chem.**, v. 28, n. 5, p. 526-530, 1936.

COULSON, J. M., RICHARDSON, J. F. Colunas de separação (destilação e absorção). In: COULSON, J. M., RICHARDSON, J. F. **Tecnologia química: uma introdução ao projecto em tecnologia química**. 1. ed. Tradução R. K. Sinnott. Fundação Calouste Gulbenkian, 1983. Cap. 11, p. 469-609.

DANCKEWERTS, P. V. **Gas-liquid reactions**. London: McGraw-Hill, 1970.

DRIBIKA, M. M., BIDDULPH, M. W. Scaling-up distillation efficiencies. **AIChE Journal**, v. 32, n. 11, p. 1864-1875, Nov., 1986.

DRICKAMER, H. G., BRADFORD, J. R. Overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity. **AIChE Journal**, v. 39, p. 319-360, 1943.

DUHNE, C. R. **Chem. Eng.**, v. 86, n. 15, p.83, 1979.

DUTKAI, E., RUCKENSTEIN, E., **Chémie et Industrie – Génie Chimique**, v. 104, p.351, 1971.

FAIR, J. R. Distillation: whither, not whether. **Chem. Eng. Res. Des.**, v. 66, p. 363-370, 1988.

FAIR, James R., NULL, Harold R., BOLLES, William L. Scale-up of plate efficiency from laboratory Oldershaw data. **Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.**, v. 22, n. 1, p. 53-58, 1983.

FAIR, J.R. Design of equilibrium stage process. In FAIR, J. R. **Tray hydraulics – Perforated trays**. New York: McGraw-Hill, 1963. Cap. 15.

- FAIR, J. R., MATHEWS, R. L. Better estimate of entrainment from bubble-caps trays. ***Petrol Refiner***, v. 37, n. 4, p. 153-158, 1958.
- FANE, A. G., SAWISTOWSKI, H. Plate efficiencies in the foam and spray regimes of sieve-plate distillation. ***ICHEME Symposium Series***, London, n. 32, p. 1:8-1:18, 1969.
- HAUSEN, H. The definition of the degree of exchange on rectifying plates for binary and ternary mixtures. ***Chem. Ing. Tech.***, v. 25, p. 595, 1953.
- HAY, J. M., JOHNSON, A. I. A study of sieve-tray efficiencies. ***AIChE Journal***, v. 6, n. 3, p. 373-381, Sept. 1960.
- HIGBIE, R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short period of exposure. ***Trans. Am. Inst. Chem. Engrs.*** v. 31, p. 365-389, 1935.
- HIGLER, Arnoud, KRISHNA, R. e TAYLOR, Ross. Nonequilibrium cell model for multicomponent (reactive) separation processes. ***AIChE Journal***, v. 45, n. 11, p. 2357-2370, 1999.
- HO, G. E., PRINCE, R. G. H. Trans. Instn. Chem. Engrs., v.48, p.101, 1970. In MEDINA, A. G. et al. Hausen and Murphree efficiencies in binary and multicomponent distillation. ***Chem. Eng. Sci.***, v. 34, p. 1105-1112, 1979.
- HOLLAND, C. D. Computing large negative or positive values for the Murphree efficiencies. ***Chem. Eng. Sci.***, v. 35, n. 10, p. 2235, 1980.
- HONORAT, A., SANDALL, O. C. ***Chem. Engng. Sci.***, v. 33, p. 635, 1978.
- KAYIHAN, Ferhan, SANDALL, Orville C., MELLICHAMP, Duncan A. Simultaneous heat and mass transfer in binary distillation – I Theory. ***Chemical Engineering Science***, v. 30, n. 11-C, p. 1333-1339, 1975a.
- KAYIHAN, Ferhan, SANDALL, Orville C., MELLICHAMP, Duncan A. Simultaneous heat and mass transfer in binary distillation – II Experimental. ***Chemical Engineering Science***. v. 32, n. 7-E, p.747-754, 1975b.

KING, C. Judson. **Separation processes**. New York: McGraw-Hill, 1980. 850p.

KIRSCHBAUM E. **Distillier –und Rektifizertechnik**. 1st. Ed. Berlin: Springer Verlag, 1940.

KRISHNA, R. H. F., MARTINEZ, R. Sreedhar, STANDART, G. L. Murphree point efficiencies in multicomponent systems. **Trans. Inst. Chem. Eng.**, v. 55, p. 178-183, 1977.

KRISHNA, Rajamani, STANDART, G. L. A multicomponent film model incorporating a general matrix method of solution to the Maxwell-Stefan equations. **AIChE Journal**, v. 22, n. 2, Mar. 1976.

KRISHNAMURTHY, R., TAYLOR, R. A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part I: Model description and method of solution. **AIChE Journal**, v. 31, n. 3, p. 449-456, Mar. 1985a.

KRISHNAMURTHY, R., TAYLOR, R. A nonequilibrium stage model of multicomponent separation processes. Part II: Comparison with experiment. **AIChE Journal**, v. 31, n. 3, p. 456-465, Mar. 1985b.

LEWIS, W. K. Rectification of binary mixtures. Plate efficiency of bubble cap columns. **Ind. Eng. Chem.**, v. 28, n. 4, p. 399-402, 1936.

LEWIS, W. K., **Ind. Eng. Chem.**, v. 14, p. 492, 1922.

LIANG, S. Y., SMITH, W., **Chem. Engng. Sci.**, v. 17, p.11-21, 1962.

McCABE, W. L., THIELE, E. W. Graphical design of fractionating columns. **Ind. Eng. Chem.**, v.17, p.605, 1925.

MEDINA, A. G., ASHTON, N., McDERMOTT, C. Hausen and Murphree efficiencies in binary and multicomponent distillation. **Chem. Eng. Sci.**, n. 34, p. 1105-1112, 1979.

MEDINA, A. G., ASHTON, N., McDERMOTT, C. Murphree and vaporization efficiencies in multicomponent distillation. **Chem. Eng. Sci.** v. 33, n. 3, p. 331-339, 1978.

MISKIN, L. G., OZALP, U., ELLIS, R. M. Ternary component efficiencies. **Brit. Chem. Eng. & Proc. Tech.**, v. 17, n. 2, p. 153-155, Feb. 1972.

NEUBURG, Heinz J., PEREZ-CORREA, J. Ricardo. Dynamic and steady state modelling of a pilot binary tray distillation column. **Latin American Applied Research**, 24, p. 1-15, 1994.

NEUBURG, H. J., CHUANG, K. T. Mass transfer modelling for GS heavy water plants – Part I e II. **Can. J. Chem. Eng.**, v. 60, p. 504-515, 1982.

NORD, M. Plate efficiencies of Benzeno-Tolueno-Xylene systems in distillation. **Trans Inst. Chem. Engrs.**, v. 42, p.863, 1946.

O'CONNELL, H. E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers. **Trans. AIChE**, v. 42, n. 3, p. 471-755, 1946.

PERRY, J. H., CHILTON, C. H. **Chemical Engineer's Handbook**. New York: McGraw-Hill, 1973.

PESCARINI, Maria Helena. **Desenvolvimento do algoritmo para a simulação de colunas de destilação multicomponente em estado estacionário utilizando a modelagem de estágios de não equilíbrio**. Campinas, SP, 1996. 220p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP.

PESCARINI, Maria H., BARROS, A. A. Chivanga e WOLF-MACIEL, M. R. Modelagem de estágios de não equilíbrio aplicada à simulação de uma coluna de destilação de pratos multicomponente. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11., 1996, Rio de Janeiro. Anais do XI Congresso Brasileiro de Engenharia Química. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Engenharia Química, 1996. v.1, p.439-444.

PONCHON, M. Application of graphs to the study of commercial fractional distillation. **Tech Moderne**, v.13, p.55, 1921.

PRO / II – SIMULATION SCIENCE INC. Copyright 1997 – Simulations Sciences Inc. Version 5, 1997.

REID, Robert C., PRAUSNITZ, John M., POLING, Bruce E. ***The properties of gases & liquids***. New York: McGraw-Hill, 1987. 742p.

RUCKENSTEIN, E., ***AIChE Journal***, v. 16, p. 144, 1970.

RUSH, F. E., STIRBA, C. Measured plate efficiencies e values predicted from single-phases studies. ***AIChE Journal***, v. 3, n. 3, p. 336-342, 1957.

SEADER, J. D. The rate-based approach for modeling staged separations. ***Chemical Engineering Progress***. v. 85, p. 41-49, Oct. 1989.

SEADER, J. D. Computer modeling of chemical processes. ***AIChE Monograph Series***, v. 15, n. 18, 1985.

SHARMA, M. M., GUPTA, R. K. Mass transfer characteristics of plate columns without downcomer. ***Trans. I. Chem. E.***, v. 45, p. T169-175, 1967.

SHERWOOD, T.K. e PIGFORD, R. L. ***Mass transfer***. New York: McGraw-Hill, 1975.

SOARES, C., CHIVANGA, A. A. C., WOLF-MACIEL, M. R. Avaliação do comportamento de propriedades físicas e térmicas em uma coluna de destilação. In CONGRESSO DE ENGENHARIA DE PROCESSOS DO MERCOSUL, 2., 1999, Florianópolis. Trabalhos Apresentados no II Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul. Florianópolis: Universidade Federal de Santa Catarina, 1999. v. 1, p. T104.

SOREL, E. ***Distillation et rectification industrielle***. Paris: Carrie and Naud, 1899.

SOREL, E., ***La rectification de l'alcool***. Paris, 1893.

- SPAGNOLO, D. A., PLAICE, E. L., NEUBURG, H. J., CHUANG, K. T. Heat transfer modelling of sieve trays. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 66, p. 367-376, June 1988.
- STANDART, G. L., **Chem. Eng. Sci.**, v.26, p. 985, 1971.
- STANDART, G. L., Studies on distillation – V. Generalised definition of a theoretical plate or stage of contacting equipment. **Chem. Eng. Sci.**, v. 20, n. 6, p. 611-622, 1965.
- STEWART, W. E., Forced convection: IV. Asymptotic forms for laminar and turbulent transfer rates. **AIChE Journal**, v. 33, p. 2008, 1987, Errata, v.34, p. 285, 1988.
- TOOR, H. L., BURCHARD, J. K. Plate efficiencies in multicomponent distillation. **AIChE Journal**, v. 6, p. 202, 1960.
- TOOR, H. L., **AIChE Journal**, v. 3, p. 198, 1957.
- van VELZEN D., CARDOZO, R. L., LANGENKAMP, H. Liquid viscosity and chemical constitution of organic compounds: a new correlation and a compilation of literature data. **Euratom**, 4735e, Joint Nuclear Research Centre, Ispra Establishment, Italy, 1972.
- WALTER, J. F., SHERWOOD, T. K. Gas absorption in bubble-cap columns. **Ind. Eng. Chem.**, v. 33, n. 4, p. 493-501, 1941.
- WESSELINGH, J. A. Non-equilibrium modelling of distillation. **Trans. IChemE**, v. 75, Part A, n. 529-538, Sept. 1997.
- WINKLE, Matthew Van, UMHOLTZ, C. L., Effect of hole free area, hole diameter, hole spacing, weir height, and downcomer area. **Industrial and Engineering Chemistry**, v. 49, n. 2, p. 226-232, Feb. 1957.
- YAWS, C. L., MILLER, J.W., SHAH, P. N., SCHORR, G. R., PATEL, P. M. **Chem. Eng.**, v.83, n.25, p.153, 1976.

YOUNG, Thomas C., STEWART, Warren E. Concise correlation of sieve-tray heat and mass transfer. ***AIChE Journal***, v. 41, n. 5, p. 1319-1320, May 1995.

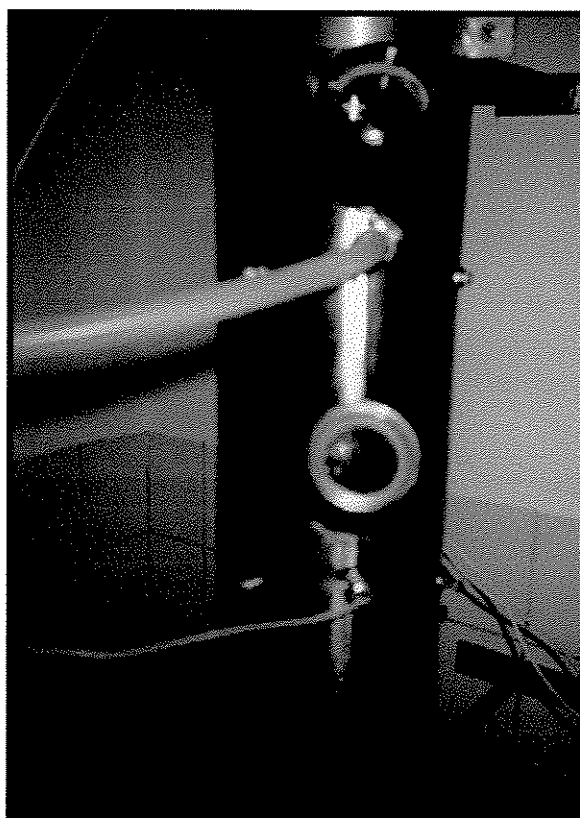
YOUNG, Thomas C., STEWART, Warren E. Correlation of fractionation tray performance via a cross-flow boundary-layer model. ***AIChE Journal***, v. 38, p. 592, Errata p. 1302, 1992.

ANEXO 01

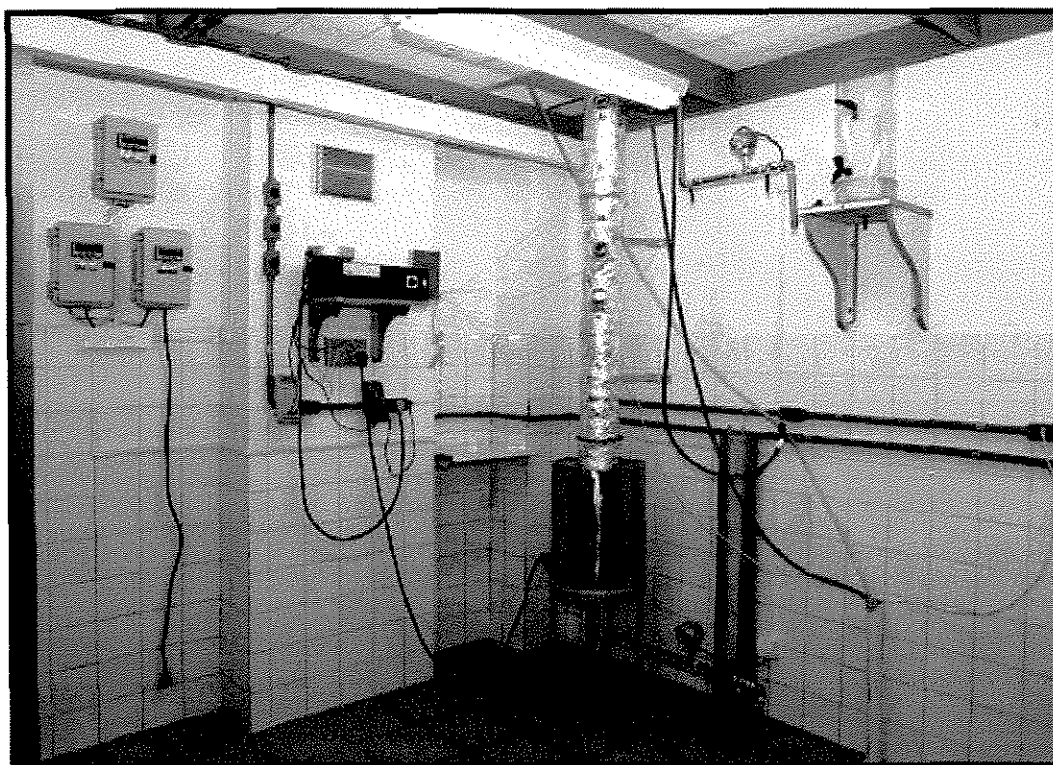


**Vista Frontal da Coluna de Destilação
(Sem Isolamento)**

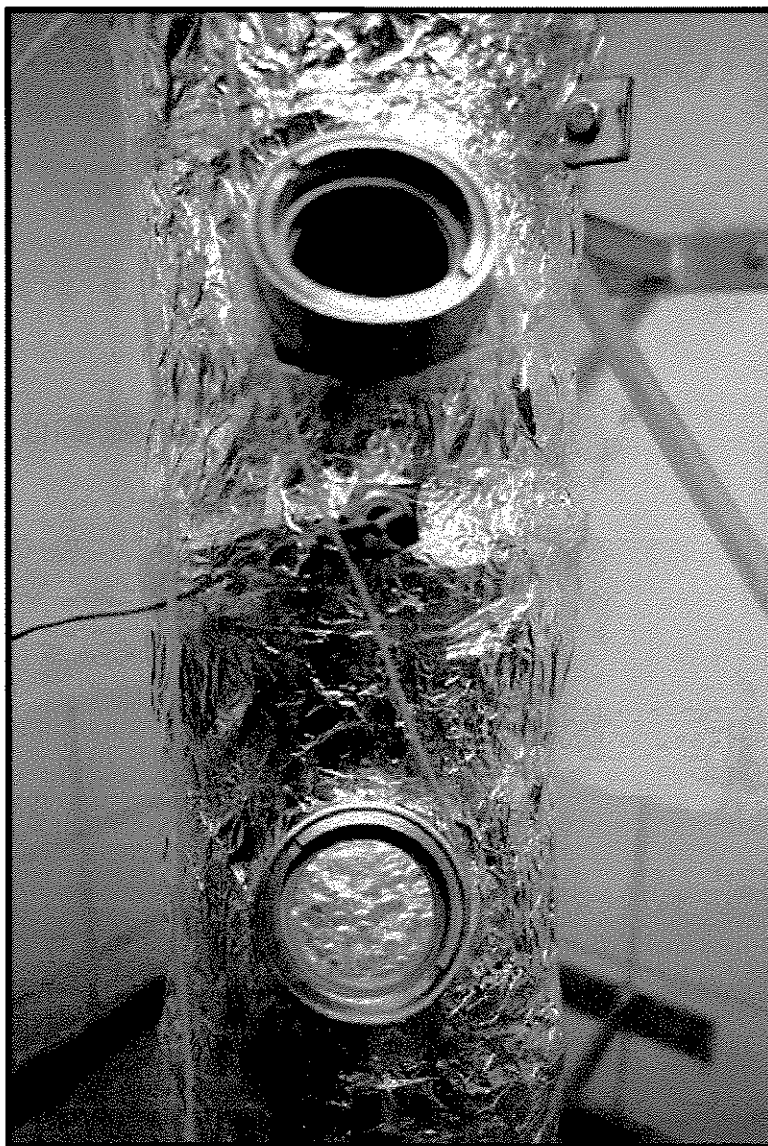
ANEXO 02



Vista dos Visores Dispostos ao Longo da Coluna de Destilação

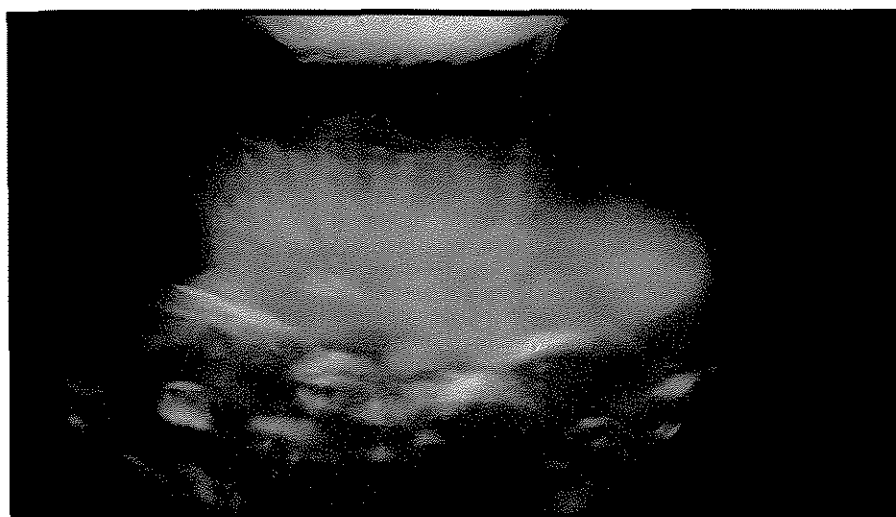
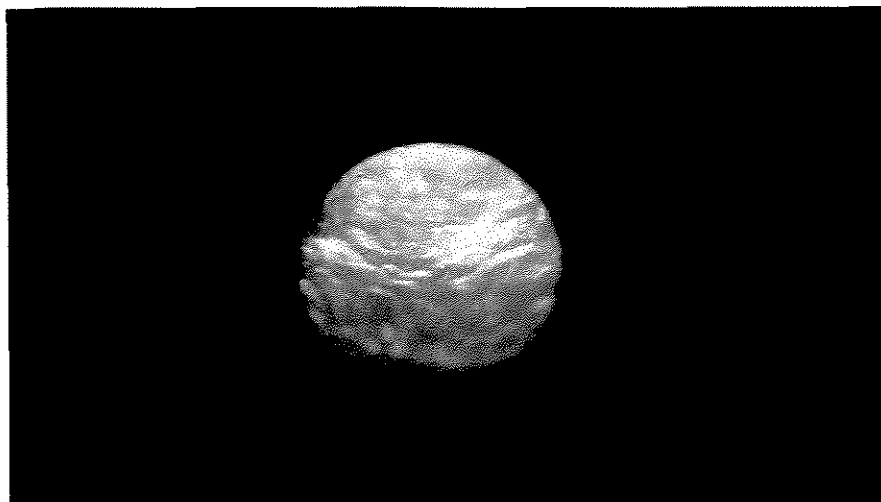
ANEXO 03

**Vista da Coluna de Destilação e Acessórios
(Coluna Isolada)**

ANEXO 04

Vista da Coluna de Destilação Isolada e das Fases em Contato

ANEXO 05



Fases em Contato sobre o Prato Visualizadas a Partir dos Visores

APÊNDICE A

TABELAS DOS DADOS EXPERIMENTAIS

ENSAIO 01

Alimentação: 24% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,387E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	-	-	-	-
2	99	-	-	-	-
3	98	-	-	-	-
4	94	-	-	-	-
5	-	-	-	-	-
6	83	-	-	-	-
7	79	-	-	-	-
8	79	-	-	-	-
9	79	-	-	-	-
10 (Condensador)	-	-	-	-	-

Os dados de temperatura referentes ao refeedor e condensador não foram obtidos, entretanto, aparecem nas tabelas para indicar que o estágio 1 se refere ao refeedor e o estágio 10 ao condensador.

ENSAIO 02

Alimentação: 21,16% em fração mássica de etanol

Calor no refulvedor: 0,256E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvedor)	-	16,4	7,1	83,6	92,9
2	85,4	-	-	-	-
3	80	-	-	-	-
4	79,5	-	-	-	-
5	-	-	-	-	-
6	78,4	-	-	-	-
7	77,2	-	-	-	-
8	77,4	-	-	-	-
9	77	-	-	-	-
10 (Condensador)	-	88,7	75,4	11,3	24,6

ENSAIO 03

Alimentação: 18,06% em fração mássica de etanol

Calor no fervedor: 0,238E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refervedor)	-	12,3	5,2	87,7	94,8
2	86,7	52,5	30,2	47,5	69,8
3	80,6	68,1	45,5	31,9	54,5
4	78,4	74,0	52,7	26	47,3
5	-	-	-	-	-
6	77	80,4	61,7	19,6	38,3
7	77	83,3	66,1	16,7	33,9
8	76,8	82,6	64,9	17,4	35,1
9	76,8	83,6	66,5	16,4	33,5
10 (Condensador)	-	95,8	89,9	4,2	10,1

ENSAIO 04

Alimentação: 15,31% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,259E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	11,7	4,9	88,3	95,1
2	86,2	56,1	33,3	43,9	66,7
3	79,8	58,8	35,8	41,2	64,2
4	78,4	76,0	55,3	24,0	44,7
5	-	73,0	51,4	27,0	48,6
6	76,8	85,6	64,9	14,4	30,1
7	76,6	85,9	70,5	14,1	29,5
8	76,4	86,0	70,6	14,0	29,4
9	76,2	87,4	73,1	12,6	26,9
10 (Condensador)	-	89,0	76,0	11,0	24,0

ENSAIO 05

Alimentação: 35,4% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,230E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	32,9	16,1	67,1	83,9
2	81,7	80,1	61,2	19,9	38,8
3	79,1	76,5	56,0	23,5	44,0
4	78,1	81,7	63,6	18,3	36,4
5	78,3	82,4	64,7	17,6	35,3
6	77,3	87,1	72,5	12,9	27,5
7	77,2	90,3	78,4	9,7	21,6
8	76,8	88,9	75,8	11,1	24,2
9	76,7	89,6	77,1	10,4	22,9
10 (Condensador)	-	90,7	79,2	9,3	20,8

ENSAIO 06

Alimentação: 34,2% em fração mássica de etanol

Calor no refulvedor: 0,237E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvedor)	-	27,4	12,9	72,6	87,1
2	82,1	75,1	54,1	24,9	45,9
3	78,2	76,3	55,7	23,7	44,3
4	78,0	83,0	65,6	17,0	34,4
5	78,0	85,3	69,4	14,7	30,6
6	77,2	87,0	72,4	13,0	27,6
7	77,1	87,5	73,2	12,5	26,8
8	77,4	87,9	74,0	12,1	26,0
9	77,3	88,7	75,4	11,3	24,6
10 (Condensador)	-	88,75	75,5	11,25	24,5

ENSAIO 07

Alimentação: 34,45% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,323E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	25,5	11,81	74,5	88,2
2	82,2	75,8	55,1	24,2	44,9
3	78,2	79,9	60,8	20,1	39,2
4	77,4	88,9	75,8	11,1	24,2
5	78,0	89,2	76,4	10,8	23,6
6	77,1	89,4	76,7	10,6	23,3
7	76,9	92,9	83,6	7,1	16,4
8	76,8	93,8	85,5	6,2	14,5
9	76,6	95,9	90,1	4,1	9,9
10 (Condensador)	-	97,6	94,1	2,4	5,9

ENSAIO 08

Alimentação: 32,8% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,393E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	31,5	15,2	68,5	84,8
2	82,1	73,1	51,5	26,9	48,5
3	78,5	71,0	48,9	29,0	51,1
4	78,2	81,8	63,8	18,2	36,2
5	78,7	82,7	65,1	17,3	34,9
6	77,9	84,7	68,4	15,3	31,6
7	77,9	86,9	72,2	13,1	27,8
8	77,8	88,6	75,2	11,4	24,8
9	77,8	89,7	77,4	10,3	22,6
10 (Condensador)	-	91,0	79,8	9,0	20,2

ENSAIO 09

Alimentação: 30,39% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,198E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	29,3	13,9	70,7	86,1
2	85,8	72,1	50,3	27,9	49,7
3	82,2	73,9	52,6	26,1	47,4
4	82,1	79,7	60,5	20,3	39,5
5	82,2	84,7	68,4	15,3	31,6
6	81,7	85,7	70,1	14,3	29,9
7	81,6	86,2	71,0	13,8	29,0
8	81,3	87,2	72,6	12,8	27,4
9	81,1	88,9	75,9	11,1	24,1
10 (Condensador)	-	89,3	76,5	10,7	23,5

ENSAIO 10

Alimentação: 29,79% em fração mássica de etanol

Refrervedor: 0,226E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refrervedor)	-	24,6	11,3	75,4	88,7
2	86,6	70,3	48,0	29,7	52,0
3	82,7	69,8	47,5	30,2	52,5
4	82,3	77,3	57,1	22,7	42,9
5	82,2	80,4	61,6	19,6	38,4
6	81,6	82,3	64,4	17,7	35,6
7	81,6	83,1	65,7	16,9	34,3
8	81,5	85,2	69,2	14,8	30,8
9	81,4	84,1	67,4	15,9	32,6
10 (Condensador)	-	85,4	69,6	14,6	30,4

ENSAIO 11

Alimentação: 16,94% em fração mássica de etanol

Carga no refulvador: 0,194E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Condensador)	-	15,9	6,9	84,1	93,1
2	87,5	67,2	44,5	32,8	55,5
3	82,9	70,4	48,2	29,6	51,8
4	82,4	78,4	58,7	21,6	41,3
5	82,5	80,2	61,4	19,8	38,6
6	82,2	82,5	64,9	17,5	35,1
7	82,1	84,9	68,7	15,1	31,3
8	81,9	86,2	70,9	13,8	29,1
9	81,8	88,5	75,0	11,5	25,0
10 (Refulvador)	-	90,0	77,9	10,0	22,1

ENSAIO 12

Alimentação: 8,67% em fração mássica de etanol

Calor no refulvedor: 0,193E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvedor)	-	7,8	3,2	92,2	96,8
2	89,3	60,8	37,7	39,2	62,3
3	83,3	65,1	42,2	34,9	57,8
4	82,8	72,8	51,2	27,2	48,8
5	82,6	78,7	59,1	21,3	40,9
6	82,2	81,1	62,6	18,9	37,4
7	82,1	82,0	64,1	18,0	35,9
8	81,9	84,9	68,7	15,1	31,3
9	81,0	86,1	70,7	13,9	29,3
10 (Condensador)	-	88,1	74,3	11,9	25,7

ENSAIO 13

Alimentação: 10,3% em fração mássica de etanol

Calor no refulvedor: 0,192E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvedor)	-	4,3	1,7	95,7	98,3
2	96,6	31,9	15,5	68,1	84,5
3	86,2	40,2	20,8	59,8	79,2
4	83,0	54,1	31,6	45,9	68,4
5	82,9	60,5	37,4	39,5	62,6
6	82,4	72,6	50,9	27,4	49,1
7	82,3	88,1	74,4	11,9	25,6
8	82,3	88,4	74,9	11,6	25,1
9	82,0	90,1	78,1	9,9	21,9
10 (Condensador)	-	91,6	81,0	8,4	19,0

ENSAIO 14

Alimentação: 35,6% em fração mássica de etanol

Calor no refulvador: 0,936E7 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvador)	-	-	-	-	-
2	86,2	-	-	-	-
3	81,9	-	-	-	-
4	81,5	-	-	-	-
5	81,8	-	-	-	-
6	81,1	-	-	-	-
7	81,1	-	-	-	-
8	81,0	-	-	-	-
9	80,9	-	-	-	-
10 (Condensador)	-	-	-	-	-

ENSAIO 15

Alimentação: 35,6% em fração mássica de etanol

Calor no refulvedor: 0,115E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvedor)	-	-	-	-	-
2	87,6	-	-	-	-
3	82,5	-	-	-	-
4	82,3	-	-	-	-
5	82,1	-	-	-	-
6	81,7	-	-	-	-
7	81,6	-	-	-	-
8	81,6	-	-	-	-
9	81,5	-	-	-	-
10 (Condensador)	-	-	-	-	-

ENSAIO 16

Alimentação: 35,6% em fração mássica de etanol

Calor no refeedor: 0,133E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refeedor)	-	-	-	-	-
2	87,4	-	-	-	-
3	83,0	-	-	-	-
4	82,8	-	-	-	-
5	82,6	-	-	-	-
6	82,0	-	-	-	-
7	81,9	-	-	-	-
8	81,8	-	-	-	-
9	81,8	-	-	-	-
10 (Condensador)	-	-	-	-	-

ENSAIO 17

Alimentação: 7,92% em fração mássica de etanol

Calor no refulvedor: 0,147E8 J/h

Estágio	Temperatura (°C)	Concentrações			
		Fração Mássica (% Etanol)	Fração Molar (% Etanol)	Fração Mássica (% Água)	Fração Molar (% Água)
1 (Refulvedor)	-	5,2	2,1	94,8	97,9
2	94,0	57,5	34,6	42,5-	65,4
3	84,4	49,8	27,9	50,2	72,1
4	83,0	76,2	55,6	23,8	44,4
5	82,0	84,1	67,4	15,9	32,6
6	81,0	88,2	74,5	11,8	25,5
7	80,0	89,5	76,9	10,5	23,1
8	80,0	92,6	83,0	7,4	17,0
9	79,8	93,4	84,7	6,6	15,3
10 (Condensador)	-	95,2	88,6	4,8	11,4