

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**  
**FACULDADE DE ENGENHARIA QUIMICA**  
*ÁREA DE CONCENTRAÇÃO*  
**DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUIMICOS**

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO DE  
BIOETANOL COM RECHEIOS E PRATOS VISANDO  
OTIMIZAÇÃO NAS DIMENSÕES**

**Autor: Felipe Abirached**

**Orientador: Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Maria Regina Wolf Maciel**

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  
Novembro de 2011

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

Ab59s      Abirached, Felipe  
Simulação do processo de destilação de bioetanol  
com recheios e pratos visando otimização nas dimensões  
/ Felipe Abirached. --Campinas, SP: [s.n.], 2011.

Orientador: Maria Regina Wolf Maciel.  
Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de  
Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Bioetanol. 2. Destilação. 3. Simulação de  
processos. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II.  
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de  
Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Simulation of distillation process with packings and trays  
in order to optimize the dimensions

Palavras-chave em Inglês: Bioethanol, Distillation, Process simulation

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestrado em Engenharia Química

Banca examinadora: Mario Eusébio Torres Alvarez, Otavio Cavalett

Data da defesa: 25-10-2011

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Felipe Abirached e aprovada em 25 de outubro de 2011 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



---

Prof.ª Dr.ª Maria Regina Wolf Maciel



---

Dr. Mario Eusebio Torres Alvarez



---

Dr. Otávio Cavalett

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



Profª. Drª. Maria Regina Wolf Maciel



## **Agradecimentos**

À Deus por sempre me guiar e me ajudar em todos os momentos de minha vida.

À Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Maria Regina Wolf Maciel pelo voto de confiança, por ter me ajudado tanto e por ter me incentivado a enfrentar este desafio.

Aos meus Pais por tanta dedicação, preocupação e zelo que sempre tiveram comigo e com meus irmãos.

À minha avó Maria Albana Marçon Abirached que sempre me acolheu e me ajudou em muitos momentos da minha vida.

À minha namorada Mara pelo carinho e compreensão.

Ao Jaiver pela ajuda fundamental neste trabalho.

Aos meus grandes amigos Daniel Seino e Luiz Fausto Vasques pelo apoio.

À CLARK-KOCH, em especial ao Hernan Waibel e ao Nelson Clark pelo incentivo e apoio.

## Resumo

Nesta dissertação serão apresentados resultados de simulações de uma coluna de destilação de bioetanol com tecnologias de recheios e pratos visando obter uma configuração otimizada que possa reduzir as dimensões das colunas, tanto na altura quanto no diâmetro. Uma análise técnica e comparativa das tecnologias de pratos calotados, pratos valvulados, recheios estruturados e recheios randômicos serão apresentadas neste trabalho, bem como a comparação com a configuração de uma coluna de destilação convencional de pratos calotados com produção de bioetanol de 600 m<sup>3</sup>/d. As colunas B e B1 de destilarias convencionais serão consideradas.

**Palavras-chave:** Bioetanol, Destilação, Recheios, Pratos, Não Equilíbrio, Simulação

## **Abstract**

In this work, many simulations results of bioethanol distillation columns with packings and trays technologies are presented in order to obtain an optimal configuration that can reduce the size of the columns, both in height and in diameter. A technical and comparative analysis of bubble cap trays, valve trays, structured packing and random packing will be presented, as well the comparison with the configuration of a conventional distillation column of bubble cap trays with bioethanol production of 600 m<sup>3</sup>/d. The columns B and B1 of conventional distilleries will be considered.

Keywords: Bioethanol, Distillation, Packings, Trays, Nonequilibrium, Simulation

# Sumário

<b>Resumo</b> .....	iv
<b>Abstract</b> .....	v
<b>Lista de Figuras</b> .....	ix
<b>Lista de Tabelas</b> .....	xvi
<b>Nomenclatura</b> .....	xix
<b>Capítulo 1</b>	
<b>Introdução e Objetivos</b> .....	<b>1</b>
1.1. Introdução .....	1
1.2. Objetivos .....	1
<b>Capítulo 2</b>	
<b>Revisão da Literatura</b> .....	<b>3</b>
2.1. Introdução .....	3
2.2. Perspectivas da Produção de Bioetanol .....	3
2.3. Descrição do Processo de Produção do Bioetanol. ....	4
2.3.1 Destilação para obtenção do bioetanol hidratado .....	6
2.3.2. Vapor na Destilação.....	8
2.4. Modelagem de Colunas de Destilação.....	8
2.4.1. Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio .....	9
2.5. Relações de Transferência de Massa e Calor .....	10
2.5.1 Fluxo e coeficientes de Transferência de Massa .....	10
2.5.1.1. Coeficiente de transferência de massa binário na fase vapor .....	13
2.5.1.2 Coeficiente de transferência de massa binário na fase líquida.....	13
2.5.2. Fluxo e coeficientes de Transferência de Calor .....	14
2.5.2.1. Coeficientes de transferência de calor na fase Vapor .....	16
2.5.2.2. Coeficientes de transferência de calor na fase líquida .....	17
2.6. Internos de torres de destilação: Pratos e recheios .....	18
2.6.1 Introdução .....	18
2.6.2 Torres com Pratos .....	18
2.6.2.1. Definição da configuração .....	19
2.6.2.2. Considerações básicas sobre hidráulica .....	22
2.6.2.2.1. Regime de operação de torre com pratos .....	22

2.6.2.2.2. Perda de carga em torres com pratos .....	24
2.6.2.3. Pratos calotados .....	25
2.6.2.4. Pratos Valvulados .....	25
2.6.3. Torres com Recheios .....	27
2.6.3.1. Definição da configuração .....	28
2.6.3.2. Considerações básicas sobre hidráulica .....	32
2.6.3.2.1. Regime de operação de torre com recheios .....	32
2.6.3.2.2. Perda de carga em torres com recheios .....	33
2.6.3.3. Recheios Randômicos .....	34
2.6.3.4. Recheios Estruturados .....	37
2.6.4. Conclusão .....	39
<b>Capítulo 3</b>	
<b>Caracterização do Processo e Metodologia Utilizada nas Simulações .....</b>	<b>40</b>
3.1. Introdução .....	40
3.2. Caracterização Termodinâmica do Processo .....	40
3.3. Metodologia de cálculo da simulação (Estágio de não equilíbrio) .....	41
3.3.1. Pratos Calotados .....	42
3.3.2. Pratos Valvulados .....	44
3.3.3. Recheios Randômicos .....	45
3.3.4. Recheios Estruturados .....	48
3.4. Características dos internos considerados nas simulações .....	51
3.4.1. Pratos Calotados .....	51
3.4.2. Pratos Valvulados .....	51
3.4.3. Recheios Randômicos .....	52
3.4.4. Recheios Estruturados .....	53
3.4.4. Conclusão .....	54
<b>Capítulo 4</b>	
<b>Resultados e Discussão .....</b>	<b>55</b>
4.1. Introdução .....	55
4.2. Definição dos dados de processo e premissas da coluna de destilação convencional com pratos calotados .....	55
4.3. Simulações de otimização .....	59
4.3.1. Coluna de destilação com pratos calotados .....	60

4.3.1.1 Variação da posição de alimentação de pratos calotados .....	64
4.3.1.2 Variação do número de pratos calotados .....	72
4.3.1.3. Coluna otimizada: variação do diâmetro e número de pratos calotados .....	75
4.3.2. Coluna de destilação com pratos valvulados .....	78
4.3.2.1. Comparação com a simulação da coluna convencional .....	78
4.3.2.2. Variação da posição de alimentação (Pratos valvulados) .....	82
4.3.2.3. Variação do número de pratos (pratos valvulados) .....	90
4.3.2.4. Coluna otimizada: variação do diâmetro e número de pratos valvulados.....	94
4.3.3. Coluna de destilação com recheios randômicos.....	96
4.3.3.1. Simulação da coluna com o diâmetro de 3800 mm .....	96
4.3.3.2. Simulação da coluna com diâmetro otimizado.....	101
4.3.4. Coluna de destilação com recheios estruturados .....	105
4.3.4.1. Simulação da coluna com o diâmetro de 3800 mm .....	106
4.3.4.2. Simulação da coluna com o diâmetro de 2896 mm .....	108
4.4. Comparação entre as colunas simuladas .....	111
4.5. Conclusão .....	115
<b>Capítulo 5</b>	
<b>Conclusões e Sugestões .....</b>	<b>116</b>
5.1. Conclusões .....	116
5.2. Sugestões Para Trabalhos Futuros.....	117
Referências Bibliográficas.....	118

## **Lista de Figuras**

Figura 2.1 - Fluxograma do processo convencional de produção de bioetanol a partir de cana-de-açúcar (Figuerola, 2011)

Figura 2.2 - Configuração convencional da destilação para obtenção bioetanol hidratado - adaptação (MECATRÔNICA, 2011)

Figura 2.3 - Configuração típica de uma coluna com pratos – visão lateral

Figura 2.4 - Configuração típica dos pratos – visão superior

Figura 2.5 - Característica mecânica de um prato

Figura 2.6 - Configuração dos pratos de um passe e dois passes

Figura 2.7 - Configuração dos pratos de três passes e quatro passes

Figura 2.8 - Regime de operação de torres com pratos

Figura 2.9- Pratos calotados (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.10 – Prato com válvula fixa (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.11-Pratos com válvulas V1 e válvulas T<sub>u</sub> “Caged Valve”, (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.12- Configuração de uma torre contendo recheios estruturados e recheios randômicos. (Perry et al., 2008)

Figura 2.13- Modelo 186 INTALOX Trough Distributor with Drip Tubes (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.14 - Modelo 943 Spray Nozzle Distributor (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.15 – Modelo 746-Lateral Arm Vapor Distributor (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.16 - Modelo 768 EVENFLOW™ Vane Type Vapor Distributor (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.17 – Modelo 804 Random Packing Gas Injection Support Plate (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.18 – Modelo 802 Structured Packing Support Grid (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.19 – Modelo 805 Random Packing Bed Limiter (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.20 – Modelo 916 Deck Distributor With Bottom Orificies (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.21- Anéis de raschig (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.22- Anéis particionados e bi-partidos (Celene, 2004)

Figura 2.23- Selas Berl (Koch-Knight, 2007)

Figura 2.24 - Selas INTALOX (Koch-Knight, 2007)

Figura 2.25 - Pall Ring (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.26 - IMTP (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.27- Dimensões do Canal triangular dos Recheios Estruturados (Luo et al., 2008)



Figura 2.28- Canais Cruzados dos Recheios Estruturados (Perry et al., 2008)

Figura 2.29 - Recheios Estruturados (Koch-Glistch, 2003)

Figura 2.30- Canais Cruzados dos Recheios Estruturados (Koch-Glistch, 2003)

Figura 3.1-Válvula tipo V-1 (Koch-Glistch, 2003)

Figura 3.2 - Recheio Randômico IMTP (Koch-Glistch, 2003)

Figura 3.3- Recheio estruturado (Koch-Glistch, 2003)

Figura 4.1- Definição das correntes da coluna de destilação

Figura 4.2 – Perfil de Temperatura do líquido, do vapor e da interface

Figura 4.3 – Gráfico de análise da porcentagem de inundação da coluna de Destilação

Figura 4.4 – Gráfico de perda de carga em cada prato calotado

Figura 4.5 – Gráfico fração mássica na fase Líquida de bioetanol e água

Figura 4.6 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 47

Figura 4.7 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 48

Figura 4.8 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 49

Figura 4.9 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 50

Figura 4.10 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 51

Figura 4.11 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 52

Figura 4.12 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 53

Figura 4.13 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 54

Figura 4.14 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 55

Figura 4.15 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 56

Figura 4.16 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 57

Figura 4.17 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 58

Figura 4.18 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 49

Figura 4.19 – Porcentagem de Inundação em Cada Prato Calotado

Figura 4.20 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 46

Figura 4.21 – Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com 63 pratos valvulados

Figura 4.22 – Porcentagem de inundação em cada prato valvulado.

Figura 4.23 – Perda de carga em cada prato valvulado.

Figura 4.24 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 47

Figura 4.25 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 47

Figura 4.26 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 48

Figura 4.27 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 49

Figura 4.28 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 50

Figura 4.29 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 51

Figura 4.30 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 52

Figura 4.31 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 53

Figura 4.32 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 54

Figura 4.33 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 55

Figura 4.34 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 56

Figura 4.35 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 57

Figura 4.36 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 58

Figura 4.37 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 46

Figura 4.38 – Porcentagem de inundação em cada prato valvulado.

Figura 4.39 – Perda de carga em cada prato valvulado.

Figura 4.40 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 45

Figura 4.41– Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios randômicos

Figura 4.42 – Porcentagem de inundação pela altura de recheio.

Figura 4.43 – Perda de carga em Cada Prato por altura de recheio randômico.

Figura 4.44 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função da altura de recheio considerando a alimentação na posição 24,360m

Figura 4.45 – Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios randômicos

Figura 4.46 – Porcentagem de inundação pela altura e recheio.

Figura 4.47 – Perda de carga por altura de recheio randômico.

Figura 4.48 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função da altura de recheio considerando a alimentação na posição 26,880 m

Figura 4.49 – Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios estruturados

Figura 4.50 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água pela altura de Recheio com alimentação na posição equivalente a 10,032 m

Figura 4.51– Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios estruturados

Figura 4.52 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água pela altura de Recheio com alimentação na posição equivalente a 11,685 m

## **Lista de Tabelas**

Tabela 2.1. Valores de produção, consumo e exportação de bioetanol em bilhões de litros

Tabela 3.1- Correlações utilizadas no cálculo do Aspen RateFrac®

Tabela 4.1 – Coluna de destilação convencional

Tabela 4.2 – Variação de vazão de vapor de escape

Tabela 4.3 – Premissas e especificações de operação do processo

Tabela 4.4- Perfil geral das correntes (pratos calotados)

Tabela 4.5 – Perfil de temperatura na coluna (pratos calotados)

Tabela 4.6 – Concentração de bioetanol no topo pela variação do prato de alimentação

Tabela 4.7 – Composição em fração Mássica de Bioetanol e água nos pratos

Tabela 4.8 – Perfil geral das correntes (variação do número de pratos calotados)

Tabela 4.9 - Resultados da variação do número de pratos calotados

Tabela 4.10 - Resultados da composição de bioetanol e água nos pratos calotados

Tabela 4.11 – Perfil geral das correntes (coluna otimizada com pratos calotados)

Tabela 4.12 - Resultados da coluna otimizada com pratos calotados

Tabela 4.13 - Resultados da composição em fração mássica e água nos pratos calotados

Tabela 4.14 – Perfil geral das correntes (comparação com a coluna convencional)

Tabela 4.15 – Posição de alimentação pela concentração de bioetanol no Topo

Tabela 4.16 – Composição em fração mássica nos pratos valvulados

Tabela 4.17 – Perfil geral das correntes (variação do número de pratos valvulados)

Tabela 4.18 - Resultados da coluna com variação do número de pratos valvulados

Tabela 4.19 - Resultados da composição nos pratos valvulados

Tabela 4.20 – Perfil geral das correntes (coluna otimizada com pratos valvulados)

Tabela 4.21 - Resultados da coluna otimizada com pratos valvulados

Tabela 4.22 - Resultados da composição nos pratos valvulados

Tabela 4.23 – Perfil geral das correntes (coluna de 3800 mm de diâmetro com recheios randômicos)

Tabela 4.24 - Resultados da coluna de 3800mm de diâmetro com recheios randômicos

Tabela 4.25 – Perfil geral das correntes (coluna otimizada com recheios randômicos)

Tabela 4.26 - Resultados da coluna otimizada com recheios randômicos

Tabela 4.27 – Perfil geral das correntes (coluna de 3800 mm com recheios estruturados)

Tabela 4.28 - Resultados da coluna de 3800 mm de diâmetro com recheios estruturados

Tabela 4.29 – Perfil geral das correntes (coluna de 2896 mm com recheios estruturados)

Tabela 4.30 - Resultados da coluna de 2896 mm de diâmetro com recheios estruturados

Tabela 4.31 - Resultados das colunas simuladas de diâmetro de 3800 mm em comparação com os parâmetros de uma usina convencional

Tabela 4.32 - Resultados das colunas simuladas de diâmetro otimizado em comparação com os parâmetros de uma usina convencional



# Nomenclatura

Letras Latinas:

$a_e$	Área efetiva ( $m^{-1}$ )
$a_p$	Área do recheio da superfície ( $m^{-1}$ )
$a_P$	Área superficial específica do recheio ( $m^{-1}$ )
$a_\omega$	Área interfacial molhada ( $m^2$ de área interfacial/ $m^2$ de volume de recheio)
$a$	Área interfacial ( $m^2$ de área interfacial/ $m^2$ de área ativa da torre)
$a$	Área interfacial ( $m^2$ área interfacial / $m^2$ torre da área ativa)
$C_E$	Fator de correção para a renovação da superfície
$D_g$	Coeficiente de difusão na fase gasosa ( $m^3.s^{-1}$ )
$D_L$	Coeficiente de difusão na fase líquida
$d$	Diâmetro (m)
$d$	Parâmetro geométrico da unidade de comprimento (m)
$D_{in}^L$	Coeficiente binário de difusão de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $m^2.s^{-1}$ )
$d_P$	Diâmetro nominal do recheio ou tamanho do recheio (m)
$D_{in}^L$	Coeficiente binário de difusão de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $m^2.s^{-1}$ )
$D_{in}^g$	Coeficiente de difusão binário de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $m^2.s^{-1}$ )
$F$	Fator $F = \mu_g \rho_g^{1/2}$ ( $kg^{1/2} m^{-0.5}.s^{-1}$ )
$Fr_L$	Número de Froude para o líquido
$F_{SE}$	Fator de aprimoramento para a superfície
$g$	Aceleração da gravidade ( $m.s^{-2}$ )
$G$	Velocidade da massa do gás - Velocidade baseada na área da torre ativa ( $kg.m^{-2}.s^{-1}$ )

G	Velocidade da massa superficial do gás ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
G	Velocidade de molar do gás ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$h_L$	Coeficiente de transferência de massa na fase líquida ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$h_L$	“holdup” do líquido = $0,04191 + 0,19h_W + 2,4545Q_L - 0,0135F$ (m)
$h_W$	Tomada de altura da saída (m)
$k_g$	Coeficiente de transferência de massa na fase gasosa ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$K_L$	Coeficiente de transferência de massa na fase líquida ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$k_{in}^L$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase líquida ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$k_{in}^L$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase líquida ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$k_{in}^L$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase líquida ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$k_{in}^g$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase vapor ( $\text{kgmol.atm}^{-1}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$K_{in}^g$	Coeficiente binário de transferência de massa por par binário i e n na fase vapor ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$K_{in}^g$	Coeficiente binário de transferência de massa por par binário i e n na fase vapor ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
L	Velocidade da massa líquida superficial ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
L	Velocidade de massa do líquido - Velocidade é baseada na área da torre ativa ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
L	Velocidade molar do líquido ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$Q_L$	Fluxo do líquido por largura de caminho médio ( $\text{m}^3.\text{s}^{-1}.\text{m}^{-2}$ )
R	Constante universal do gás ( $\text{m}^3.\text{atm.kgmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )

$Re_L$	Número de Reynolds para o líquido
$S$	Comprimento da ondulação (m)
$Sc_{in}^L$	Número de Schmidt para o par binário i e n na fase líquida $= \mu_L / (\rho_L D_{in}^L)$
$Sc_{in}^g$	Número de Schmidt para o par binário i e n da fase gasosa $n = \mu_g / (\rho_g D_{in}^g)$
$Sc_{in}^g$	Número de Schmidt para o par binário i e n da fase gasosa $gasosa = n = \mu_g / (\rho_g D_{in}^g)$
$T^g$	Temperatura da fase gasosa (K)
$t_L$	Tempo de residência do líquido = $0,9998 h_L Z_L / Q_L$ (s)
$t_e$	Tempo de exposição (s)
$U_{ge}$	Velocidade efetiva do gás ( $m.s^{-1}$ )
$U_{gs}$	Velocidade superficial do gás ( $m.s^{-1}$ )
$U_{Lc}$	Velocidade efetiva do líquido ( $m.s^{-1}$ )
$U_{Le}$	Velocidade efetiva do líquido ( $m.s^{-1}$ )
$U_{Ls}$	Velocidade superficial do líquido ( $m.s^{-1}$ )
$We_L$	Número de Weber para o líquido
$W$	Altura do vertedouro (m)
$Z_L$	Comprimento do caminho do fluxo líquido (m)

#### Letras Gregas:

$\mu_g$	Viscosidade do gás ( $kg. s^{-1} m^{-1}$ )
$\mu_L$	Viscosidade da mistura do líquido ( $N.s.m^{-2}$ )
$\rho_g$	Densidade do gás ( $kg.m^{-3}$ )
$\rho_L$	Densidade do líquido ( $kg.m^{-3}$ )
$\mu_L$	Viscosidade do líquido ( $N.s.m^{-2}$ )
$\mu_g$	Viscosidade da mistura do gás ( $N.s.m^{-2}$ )
$\rho_L$	Densidade da mistura do líquido ( $kg.m^{-3}$ )

$\rho_L$	Densidade do líquido (kg.m <sup>-3</sup> )
$\rho_g$	Densidade da mistura do gás (kg.m <sup>-3</sup> )
$\rho m_L$	Densidade molar do líquido (kgmol.m <sup>-3</sup> )
$\rho m_g$	Densidade molar da mistura de gás (kgmol.m <sup>-3</sup> )
$\sigma_c$	Tensão superficial crítica no material de recheio (N.m <sup>-1</sup> )
$\epsilon$	Fração de espaços vazios do recheio
$\mu_g$	Fluxo de gás volumétrico por unidade de área ativa (m <sup>3</sup> .s <sup>-1</sup> m <sup>-2</sup> )
$\gamma$	Ângulo de contato (deg)
$\theta$	Ângulo com a horizontal pelo declínio da lâmina ou ondulação do canal (deg)
$\rho_g$	Densidade da mistura de gás (kg. m <sup>-3</sup> )
$\sigma$	Tensão superficial (N.m <sup>-1</sup> )

# **Capítulo 1**

## **Introdução e Objetivos**

### **1.1. Introdução**

Atualmente, o Brasil é o maior exportador mundial de bioetanol e o segundo maior produtor, atrás apenas dos Estados Unidos. Neste contexto, com a introdução dos motores bicom bustíveis no Brasil, o consumo de bioetanol aumentou nos últimos anos devido à demanda do mercado interno. Assim, para atender ao crescente aumento na demanda do mercado interno e mundial, o Brasil necessita aumentar a produção, diminuir os custos de produção e aumentar investimentos no setor sucroenergético.

As plantas de produção de bioetanol hidratado desenvolvidas na década de 70 são muito parecidas com as plantas projetadas atualmente, isto é, as tecnologias de transferência de massa aplicadas no processo de destilação para obtenção do bioetanol hidratado são praticamente as mesmas, pratos calotados e valvulados. Assim, o desafio do aumento de produção requisitado pela crescente demanda de mercado tem movido a área de pesquisa e desenvolvimento do setor sucroenergético por busca de novas tecnologias.

### **1.2. Objetivos**

Este trabalho tem como principal objetivo simular as colunas de destilação de obtenção do bioetanol hidratado com diferentes tecnologias de pratos e recheios, considerando como parâmetro uma coluna convencional com produção de 600 m<sup>3</sup>/d. Assim, é realizada uma análise comparativa das dimensões das colunas obtidas nas simulações, baseadas principalmente no parâmetro de porcentagem de inundação e posição de alimentação carga.

Para tornar as simulações mais próximas da realidade, o simulador Aspen Plus® foi utilizado e a modelagem de estágios de não equilíbrio foi empregada.

Como objetivos específicos deste trabalho, são realizadas simulações com as seguintes tecnologias de pratos e recheios:

- Simulação com pratos calotados;
- Simulação com pratos valvulados;
- Simulação com recheios randômicos;
- Simulação com recheios estruturados;

Dessa forma, uma comparação dos resultados, tanto no diâmetro da coluna quanto no número de pratos ou altura de recheios, é realizada com uma coluna convencional de produção de 600 m<sup>3</sup>/d

## **Capítulo 2**

### **Revisão da Literatura**

#### **2.1. Introdução**

Este capítulo visa revisar os conceitos teóricos que servirão de embasamento para o entendimento das considerações que serão adotadas neste trabalho, bem como demonstrar a importância da otimização de processos na produção de bioetanol.

#### **2.2. Perspectivas da Produção de Bioetanol**

Um crescente interesse em combustíveis alternativos tem sido observado nos últimos anos, como resultado do aumento da demanda energética e da tendência de esgotamento dos recursos fósseis. O aquecimento global e a consequente necessidade de diminuir as emissões de gases estufa tem incentivado o uso de combustíveis produzidos através da biomassa, que é a única fonte de carbono renovável que pode ser eficientemente convertida em combustíveis sólidos, líquidos ou gasosos (Dias, 2010).

O bioetanol é o biocombustível mais importante no mercado mundial. No Brasil ele é usado para substituir parcialmente a gasolina para produzir misturas de gasolina-bioetanol que variam de 15 a 25% de bioetanol. O bioetanol é produzido principalmente a partir da cana-de-açúcar e milho, dependendo das condições climáticas e locais de produção. Em áreas tropicais, como no Brasil e na Colômbia, o bioetanol é produzido principalmente da cana-de-açúcar. Entretanto, em outras áreas como nos Estados Unidos, União Européia e China, a predominância da produção de bioetanol é a partir do milho. (Jay et al., 2010)

As projeções do bioetanol, referentes à produção, consumo e exportação refletem grande dinamismo desse produto devido especialmente ao crescimento do consumo interno. No Brasil, a produção de bioetanol projetada para 2019/2020 é de 62,91 bilhões de litros, mais que o dobro da produção de 2008/09, de 27,76 bilhões de litros. A UNICA – União da Indústria de Cana-de-açúcar projeta para

2020/21, uma produção de bioetanol de 65,3 bilhões de litros, consumo de 49,6 bilhões de litros e exportações de 15,7 bilhões de litros (Age, 2009).

O consumo interno para 2020, representado da Tabela 2.1, está projetado para 47,79 bilhões de litros e as exportações para 15,12 bilhões de litros. A Empresa de Pesquisa Energética –projeta para 2017 que 73,6% dos veículos vendidos no Brasil serão do tipo *flex fuel*. A expansão do setor automobilístico, e o uso crescente dos carros *flex fuel* são atualmente os principais fatores responsáveis pelo crescimento da produção de bioetanol no Brasil (Age, 2009).

Tabela 2.1. Valores de produção, consumo e exportação de bioetanol em bilhões de litros

Ano	Produção	Consumo	Exportação
2008/09	27,67	18,52	4,68
2009/10	25,56	20,19	5,37
2010/11	28,16	22,00	6,15
2011/12	30,75	23,98	6,77
2012/13	33,90	26,14	7,76
2013/14	37,03	28,49	8,54
2014/15	40,45	31,06	9,39
2015/16	44,18	33,85	10,33
2016/17	48,26	36,90	11,36
2017/18	52,72	40,22	12,50
2018/19	57,59	43,84	13,75
2019/20	62,91	47,79	15,12

Fonte: Elaboração da AGE/MAPA com dados do MAPA/SPAE/DCAA e Câmara Setorial.

Nota: O Bioetanol se refere ao álcool anidro e hidratado. Para a realização destas projeções, utilizou-se a taxa de crescimento de 7,2% a.a para o consumo, para exportação foi de 14,63% a.a até a safra de 2010/11, a partir de 2011/12 foi de 10% a.a

## 2.3. Descrição do Processo de Produção do Bioetanol.

A produção de bioetanol anidro proveniente da cana-de-açúcar é composta basicamente pelas seguintes etapas principais: Recebimento e limpeza da cana-de-açúcar, extração do açúcar, tratamento do caldo, concentração e esterilização, fermentação, destilação e desidratação. A Figura 2.1 representa um fluxograma de processo contemplando as etapas principais supracitadas:



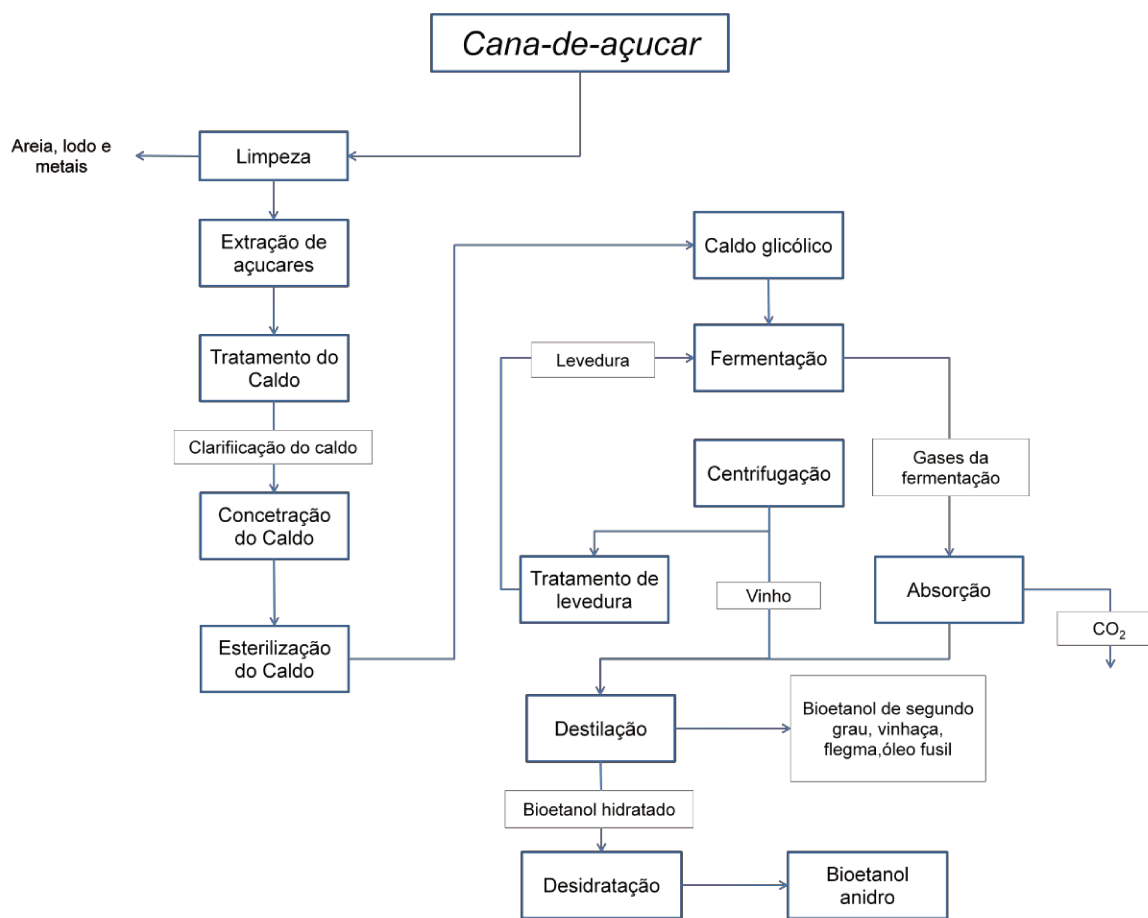


Figura 2.1- Fluxograma do processo convencional de produção de bioetanol a partir de cana-de-açúcar (Figuerola, 2011)

A destilação convencional consiste de uma coluna de destilação composta pelas colunas A, A1 e D, e a coluna de retificação é composta pelas colunas B e B1. O vinho obtido na fermentação é aquecido e alimentado na coluna A1, que está localizada acima da coluna A e abaixo da coluna D. (Dias, 2010) explica que pressão nas colunas de destilação (A, A1 e D) está em uma faixa de 133,8 a 152,5 kPa. A pressão nas colunas de retificação (B e B1) possuem uma faixa de pressão na coluna em torno de 116 kPa no topo e 135,7 kPa no fundo. Na saída das colunas de destilação de bioetanol, são obtidas as correntes chamadas de “flegma”, que contém cerca de 40% em massa de bioetanol, bem como a vinhaça. Na saída das colunas de retificação, bioetanol hidratado, “flegmassa” e óleo fúsil são obtidos. Bioetanol hidratado é produzido no topo da coluna B. Devido ao fato da mistura bioetanol-água formar um azeótropo na concentração mássica 95,6%

de bioetanol a 1 atm, por destilação convencional, não é possível obter uma mistura mais rica em bioetanol (superior à azeotrópica informada anteriormente). Portanto, existem vários processos para a produção de bioetanol anidro, que vem sendo otimizados devido à crescente demanda de quantidade e qualidade do produto. Entre os mais conhecidos e comumente utilizados estão: desidratação química, desidratação por destilação a vácuo, destilação com variação de pressão, destilação azeotrópica, destilação extrativa, pervaporação, adsorção, dentre outros (Figuerola, 2011).

### **2.3.1 Destilação para obtenção do bioetanol hidratado**

A destilação é uma das tecnologias em separação mais utilizada nos processos industriais. No entanto, quando a volatilidade relativa das substâncias consideradas diminui, o tamanho e a energia requerida para a coluna tendem a aumentar e a eficiência do processo de separação tende a diminuir. Na verdade, o ponto fraco da destilação, como operação unitária, é sua eficiência energética relativamente baixa. Devido a este fato, e em resposta às necessidades mundiais de desenvolvimento de processos industriais mais sustentáveis, a destilação se tornou um alvo nos esforços para o aumento de eficiência, através da melhoria de equipamentos ou combinação de uma forma mais eficaz com outras separações ou reações (Olujic, 2009).

Uma mistura azeotrópica existe quando os componentes do sistema considerado possuem a mesma concentração nas fases líquida e vapor, o que impossibilita a separação dos mesmos por destilação convencional. Portanto, nas usinas de açúcar e álcool é possível atingir uma concentração mássica de bioetanol no topo da coluna valores que variam entre 92,6 e 93,8%, isto é, em valores um pouco abaixo da concentração de 95,6% do azeótropo.

A configuração convencional da destilação na produção do bioetanol hidratado de uma usina compreende basicamente em 05 colunas: A, A1, D, B e B1, conforme indicado na Figura 2.2 e cada uma delas possuem as respectivas funções:

Coluna A: Coluna de esgotamento do vinho.

Coluna A1: Coluna de epuração do vinho

Coluna D: Concentração de álcool de segunda

### Coluna B: Retificação do Flegma

### Coluna B1: Esgotamento do Flegma

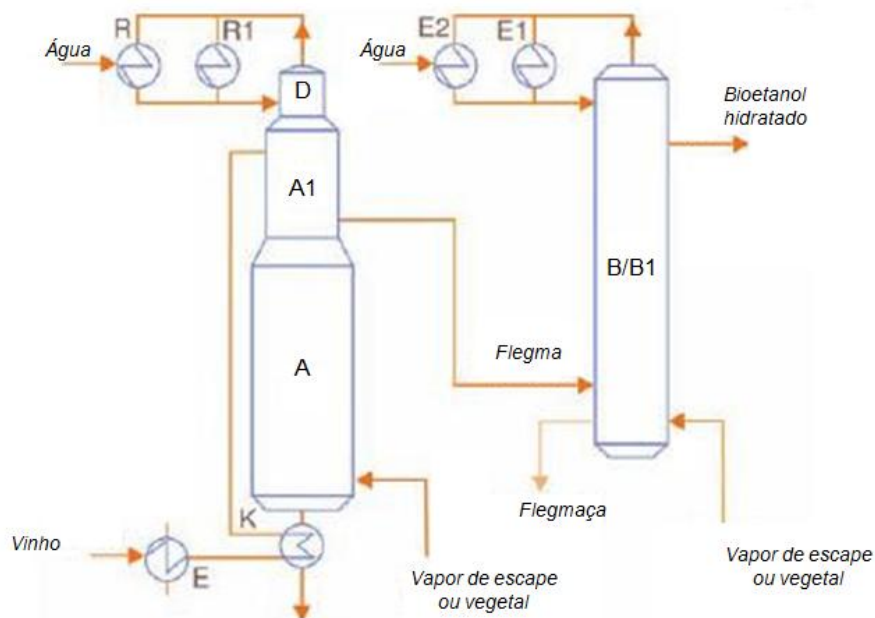


Figura 2.2 - Configuração convencional da destilação para obtenção bioetanol hidratado - adaptação (MECATRÔNICA, 2011)

As colunas B e B1, que são o foco desta dissertação, formam o conjunto de retificação, onde o flegma é alimentado. Estas colunas são tipicamente nomeadas de B e B1, mas fisicamente é apenas uma coluna e possuem o mesmo diâmetro. A composição da alimentação desta coluna possui, em média, uma fração mássica de 0,45 de etanol e 0,55 de água. No fundo da coluna B é obtida a “flegmaça”, uma mistura com alto teor de água e no topo é obtido o bioetanol hidratado, com uma fração mássica média de 0,983 de bioetanol. Nesta dissertação não foi considerada a existência de alcoóis pesados de cadeia longa na alimentação da coluna por compor menos que 0,1% em massa da composição do flegma

### **2.3.2. Vapor na Destilação**

Na destilação do bioetanol de usinas convencionais, a fonte provedora de calor é o vapor de escape que é injetado diretamente nas colunas de destilação (A) e retificação (B). Pode-se estimar a necessidade de vapor em função da massa de vinho a ser aquecida, do teor de bioetanol requerido e das condições térmicas do vapor de escape saturado (normalmente com temperatura próxima de 127 °C e 1.26 Kgf/cm<sup>2</sup>(g),

As taxas médias de uso de vapor são:

- Taxa de vapor de escape (injeção direta na coluna A): 2 a 3,0 kg/L de bioetanol produzido.
- Taxa de vapor de escape (injeção direta na coluna B): 1 a 1,5 kg/L de bioetanol produzido.

Assim, para a produção de bioetanol hidratado, a taxa de vapor varia de 3 a 4,5 Kg por litro de bioetanol produzido. (Neto et al, 2009)

### **2.4. Modelagem de Colunas de Destilação**

Simulação de processos é uma ferramenta muito importante para prever e avaliar o comportamento de colunas de destilação. Com a evolução dos métodos computacionais, houve um grande avanço na aplicação de modelagem matemática para predição de processos industriais devido aos baixos custos e agilidade na avaliação de um sistema, justamente pelo fato de métodos empíricos e projetos pilotos serem geralmente mais caros e demandarem mais tempo para serem desenvolvidos e aplicados.

Os primeiros métodos desenvolvidos na modelagem de colunas de destilação foram baseados em estágios de equilíbrio, isto é, considera-se que o prato está em equilíbrio termodinâmico entre as correntes de saída deste estágio. Sabe-se que na prática este equilíbrio não ocorreria, pois seria necessária uma área de contato infinita ou até mesmo um tempo de contato infinito entre as fases.

Como os números de pratos calculados pelos primeiros métodos de estágios de equilíbrio eram sempre menores que os necessários, foram introduzidos conceitos de eficiência e correlações de eficiência, empíricas e semi-empíricas, para melhorar a confiabilidade dos cálculos. Algumas destas correlações desenvolvidas levam em consideração a geometria do prato, viscosidade das fases, vazões de líquido e vapor. Todavia, devido a muitas imprecisões nos cálculos utilizando a modelagem de equilíbrio, foram desenvolvidos métodos muito mais complexos e realistas capazes de prever com precisão confiável comportamento de colunas de destilação. A modelagem de não equilíbrio não utiliza o conceito de eficiência nos cálculos e considera o equilíbrio líquido e vapor apenas na interface. A modelagem de não equilíbrio foi o método escolhido para os cálculos das colunas de destilação nesta dissertação por ser um método mais realista e confiável.

#### **2.4.1. Modelagem de Estágios de Não Equilíbrio**

Os modelos de não equilíbrio, originalmente desenvolvidos por (Krishnamurthy et al., 1985), fornecem excelentes resultados de simulação para problemas de processo de separação envolvendo sistemas vapor-líquido que foram confirmados por (Fair, 1977; Seader, 1970; Sivasubramanian et al., 1990; Ryans, 1986; Taylor et al., 1987). Os modelos de não equilíbrio ou *rate based models* consideram que a taxa de transferência de massa governa o processo realmente como elas é e evitam totalmente o conceito de eficiência relacionada aos modelos de estágios de equilíbrio. A modelagem de estágio de equilíbrio considera que o equilíbrio entre as fases ocorre apenas na interface e evita problemas de predição incorreta da direção da transferência de massa devido ao fato das interações de transferência de massa multicomponentes são expressas de forma implícita. Comparadas com os modelos de estágios de equilíbrio, os modelos *rate-based* são muito mais precisos, porém também mais complicados. No modelo proposto por (Krishnamurthy et al., 1985) as equações são escritas separadamente para cada fase e cada interface, onde considera-se que a temperatura, pressão e potencial químico também são iguais em toda interface. (Liang et al, 2006)

Apesar do conceito de estágio de não equilíbrio ser muito superior e mais preciso que o conceito de estágio de equilíbrio, uma desvantagem seria a quantidade de parâmetros necessários no cálculo, como por exemplo: diâmetro da coluna, altura do vertedor, comprimento do vertedor, área ativa do prato, tipo de prato. Não só apenas os parâmetros mecânicos da coluna afetam o cálculo, outros fatores que influenciam e afetam os coeficientes de transferência de massa são as vazões de gás e de líquido. Sabe-se que se a vazão de gás ou de líquido na coluna for inapropriada, fenômenos de inundação excessiva ocorrem e prejudicam a performance do sistema (Lee et al., 1998).

## **2.5. Relações de Transferência de Massa e Calor**

Os modelos de estágio de não equilíbrio consistem basicamente em balanços de massa e energia para cada fase e para cada componente, em equações de transferência de massa e energia na fase líquida e vapor. Segue abaixo as principais equações de transferência de massa e calor que estão envolvidas nos modelos de estágios de não equilíbrio.

### **2.5.1 Fluxo e coeficientes de Transferência de Massa**

A transferência de massa é um processo direcionado pelo potencial químico ou gradiente de concentração, assim, o fluxo de transferência de massa na fase vapor dependerá da diferença de composição no seio da fase vapor ( $y_{i,j}$ ) e na interface ( $VI_{i,j}$ ). O mesmo princípio se aplica para a fase líquida (Barros, 1997).

A determinação do fluxo de transferência de massa na interface é discutida de maneira geral, pois modelos para estimar as taxas de transferência de massa em cada possível regime de fluxo não são disponíveis.

Os fatores que influenciam o fluxo de transferência de massa, além do gradiente de concentração, seriam: Temperatura, propriedades físicas dos componentes, geometria do sistema, hidrodinâmica e os próprios fluxos de transferência de massa. Normalmente, os efeitos dessas variáveis são incluídos nos coeficientes de transferência de massa.

Para realizar o cálculo do 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 estágio  $i$ . As composições e temperaturas das fases também são consideradas constantes no interior de cada estágio e iguais às composições e temperaturas de saída de cada estágio. A integral é igual à taxa pontual média multiplicada pela área interfacial.

$$N_{i,j}^V = \int n_{i,j}^V \cdot da_i = n_{i,j}^V \cdot a_i \quad (2.4)$$

$$N_{i,j}^L = \int n_{i,j}^L \cdot da_i = n_{i,j}^L \cdot a_i \quad (2.5)$$

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.

$$n_{i,j}^V = \sum_{k=1}^{nc-1} k_{i,j,k}^V (y_{i,k} - y_{i,k}^I) + y_{i,j} \cdot N_i^T \text{ onde } j = 1 \text{ a } nc-1 \quad (2.6)$$

$$n_{i,j}^L = \sum_{k=1}^{nc-1} k_{i,j,k}^L (x_{i,k}^I - x_{i,k}) + x_{i,j} \cdot N_i^T \text{ onde } j = 1 \text{ a } nc-1 \quad (2.7)$$

$$n_i^T = \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \quad (2.8)$$

Portanto:

$$n_{i,j}^V = n_{i,j}^V(K_{i,j,k}^V, y_{i,j}^I, y_{i,j}, n_{i,k}, k = 1 \text{ a } nc, ) \quad (2.9)$$

$$n_{i,j}^L = n_{i,j}^L(K_{i,j,k}^L, x_{i,j}^I, x_{i,j}, n_{i,k}, k = 1 \text{ a } nc, ) \quad (2.10)$$

Substituindo-se as equações (2.6) e (2.7) nas equações (2.4) e (2.5), respectivamente:

$$N_{i,j}^V = \sum_{k=1}^{nc-1} K_{i,j,k}^V \cdot a_i (y_{i,k} - y_{i,k}^I) + y_{i,j} \cdot N_i^T \quad \text{onde } j = 1 \text{ a } nc-1 \quad (2.11)$$

$$N_{i,j}^L = \sum_{k=1}^{nc-1} K_{i,j,k}^L \cdot a_i (x_{i,k}^I - x_{i,k}) + y_{i,j} \cdot N_i^T \quad \text{onde } j = 1 \text{ a } nc-1 \quad (2.12)$$

$$N_i^T = \sum_{j=1}^{nc} N_{i,j} \quad (2.13)$$

Portanto,

$$N_{i,j}^V = N_{i,j}^V(K_{i,j,k}^V, a_i, y_{i,j}^I, y_{i,j}, T_i^V, T_i^I, N_{i,k}^V, k = 1 \text{ a } nc, ) \quad (2.14)$$

$$N_{i,j}^L = N_{i,j}^L(K_{i,j,k}^L, a_i, x_{i,j}^I, x_{i,j}, T_i^L, T_i^I, N_{i,k}^L, k = 1 \text{ a } nc, ) \quad (2.15)$$

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

Os coeficientes de transferência de massa, na sua grande maioria, são determinados por correlações obtidas experimentalmente, em determinadas condições. Posteriormente, estas correlações são aplicadas no projeto, e evidentemente que, quanto mais próximas estiverem das condições laboratório-projeto, tanto mais confiável será a utilização destes coeficientes. Algumas



correlações para o cálculo de coeficientes de transferência de massa envolvendo situações simples são apresentadas na literatura e não tem grande interesse para destilação e absorção (Caldas, 2007).

Nesta dissertação, são realizadas simulações com pratos calotados, pratos valvulados, recheios randômicos e recheios estruturados. As equações referentes aos coeficientes de transferência de massa desenvolvidos para cada tecnologia são descritas no Capítulo 4.

### 2.5.1.1. Coeficiente de transferência de massa binário na fase vapor

$$kb_{i,j,k.ai}^V = \frac{(0,776 + 0,04657.HW - 0,2377.10^{-1/2}.F^F + 87,319.10^{-6}.I_i^F).F_i^V}{\left(\frac{10^{-2}.\mu^{mist,V}}{p_i^{mist,V}.DIF_{i,j,k}^V}\right)^{0,5}} \quad (2.16)$$

$$F_i^F = \frac{F_i^V.PM_i^{mist,V}.\sqrt{p_i^{mist,V}}}{p_i^{mist,V}.AREA} \quad (2.17)$$

$$L_i^F = \frac{F_i^L.PM_i^{mist,L}}{p_i^{mist,L}.EM} \quad (2.18)$$

Sendo:

$$PM_i^{mist,V} = \sum_{j=1}^{nc} y_{i,j}.PM_j \quad (2.19)$$

$$PM_j^{mist,L} = \sum_{i=1}^{nc} x_{i,j}.PM_j \quad (2.20)$$

### 2.5.1.2 Coeficiente de transferência de massa binário na fase líquida

$$kb_{i,j,k}^L \cdot a_i = (4,124 \cdot 10^4 DIF_{i,j,k}^L)^{0,5} (0,21313 \cdot 10^{-1/2} F_i^F + 0,15) t_i^L F_i^L \quad (2.21)$$

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

O tempo de contato médio do líquido é dado por:

$$t_i^L = 1,2002 \cdot HU_i \cdot \frac{Z_L}{L_i^F} \quad (2.22)$$

Onde  $HU_i$  é o “Holdup” do líquido no prato e é dado por:

$$HU_i = 0,0254(1,65 + 7,4803HW + 80,478 \cdot L_i^F - 0,5328F_i^F) \quad (2.23)$$

## 2.5.2. Fluxo e coeficientes de Transferência de Calor

De forma análoga ao fluxo molar, o fluxo de calor ( $\xi_i$ ) é igual à integração das taxas pontuais ( $e_i$ ):

$$\xi_i^V = \int e_{i,}^V \cdot da_i = e_{i,}^V \cdot a_i \quad (2.24)$$

$$\xi_i^L = \int e_{i,}^L \cdot da_i = e_{i,}^L \cdot a_i \quad (2.25)$$

A taxa pontual de calor é constituída pela taxa condutiva e convectiva devido ao transporte de entalpia na interface.

### Fase Vapor:

$$e_i^V = \int q_i^V + \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \cdot H_{i,j}^{-V} \quad (2.26)$$

A taxa condutiva ( $q_i^V$ ) é dependente do gradiente de temperatura no fluido:

$$q_i^V = hc_i^V \cdot (T_{i,}^V - T_{i,}^I) \quad (2.27)$$

Introduzindo as equações (2.26) e (2.27) na equação (2.24)

$$.e_i^V = hc_i^V \cdot a_i \cdot (T_{i,}^V - T_{i,}^I) + \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \cdot H_{i,j}^{-V} \quad (2.26)$$

### Fase Líquida:

$$e_i^L = \int q_i^L + \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \cdot H_{i,j}^{-L} \quad (2.28)$$

$$q_i^L = hc_i^L \cdot (T_{i,}^I - T_{i,}^L) \quad (2.29)$$

Introduzindo as equações (2.28) e (2.29) na equação (2.25)

$$.e_i^L = hc_i^L \cdot a_i \cdot (T_{i,}^I - T_{i,}^L) + \sum_{j=1}^{nc} n_{i,j} \cdot H_{i,j}^{-L} \quad (2.30)$$

Portanto:

$$\xi_i^L = \xi_i^L(hc_i^L, a_i, x_{i,j}, T_{i,}^I, T_{i,}^L, N_{i,k}, k = 1 \text{ a } nc) \quad (2.31)$$

$$\xi_i^V = \xi_i^V(hc_i^V, a_i, x_{i,j}, T_i^L, T_i^V, N_{i,k}, k = 1 \text{ a } nc) \quad (2.32)$$

$hc_i^V$  e  $hc_i^L$  São os coeficientes de transferência de calor na fase vapor e líquida, respectivamente, e podem ser estimados por uma correlação, analogia ou expressão teórica.

### 2.5.2.1. Coeficientes de transferência de calor na fase Vapor

A sub rotina RateFrac® Aspen Plus® calcula os coeficientes de transferência de calor, usando a analogia de Chilton-Colburn, que relaciona a média dos coeficientes de transferência de massa binários com  $hc_i^V$

O coeficiente de transferência de calor é dado por:

$$hc_i^V = (kb_{i,j,k}^V)^{médio} (Cp_i^{mist,V}). (Le_i^V)^{2/3} \quad (2.33)$$

Inserindo a área interfacial ( $a_i$ ) na equação (2.33), tem-se:

$$hc_i^V . a_i = (kb_{i,j,k}^V)^{médio} (Cp_i^{mist,V}). (Le_i^V)^{2/3} \quad (2.34)$$

Onde  $Le_i$  é número de Lewis, determinado assim

$$Le_i^V = \frac{ct_i^{mist,V} . PM_i^{mist,V} .}{\rho_i^{mist,V} . Cp_i^{mist,V} . (DIF_{i,j,k}^V)^{médio}} \quad (2.35)$$

Onde  $ct_i^{mist,V}$  é a condutividade térmica da mistura no estágio  $i$  e  $\rho_i^{mist}$  é a densidade da mistura no mesmo estágio.

$$(kb_{i,j\ k}^V \cdot a_i)^{m\u00e9dio} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} kb_{i,j\ k}^V \cdot a_i \cdot y_{i,j} \cdot y_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} y_{i,j} \cdot y_{i,k}} \quad (2.36)$$

onde  $k \neq j$

$$(DIF_{i,j,k}^V)^{m\u00e9dio} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} DIF_{i,j,k}^V \cdot y_{i,j} \cdot y_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} y_{i,j} \cdot y_{i,k}} \quad (2.37)$$

onde  $k \neq j$

Onde  $PM_i^{mist,V}$  \u00e9 calculado pela equa\u00e7\u00e3o (2.19):

### 2.5.2.2. Coeficientes de transfer\u00eancia de calor na fase l\u00edquida

O c\u00e1lculo dos coeficientes de transfer\u00eancia de calor na fase l\u00edquida  $hc_i^L$  \u00e9 realizado pela seguinte equa\u00e7\u00e3o:

$$hc_i^L = (kb_{i,j\ k}^L)^{m\u00e9dio} Cp_i^{mist,L} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_i}{(DIF_{i,j,k}^L)^{m\u00e9dio}}} \quad (2.38)$$

Da mesma maneira que na fase vapor, introduz-se a \u00e1rea interfacial:

$$hc_i^L \cdot a_i = (kb_{i,j\ k}^L \cdot a_i)^{m\u00e9dio} Cp_i^{mist,L} \cdot \sqrt{\frac{\alpha_i}{(DIF_{i,j,k}^L)^{m\u00e9dio}}} \quad (2.39)$$

Onde  $\alpha_i$  \u00e9 a difusividade t\u00e9rmica, determinada pela equa\u00e7\u00e3o:

$$\alpha_i = \frac{ct_i^{mist,L} \cdot PM_i^{mist,L}}{\rho_i^{mist,L} \cdot Cp_i^{mist,L}} \quad (2.40)$$

$$(kb_{i,j,k}^L \cdot a_i)^{médio} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} kb_{i,j,k}^L \cdot a_i \cdot x_{i,j} \cdot x_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} x_{i,j} \cdot x_{i,k}} \quad (2.41)$$

$$(DIF_{i,j,k}^L)^{médio} = \frac{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} DIF_{i,j,k}^L \cdot x_{i,j} \cdot x_{i,k}}{\sum_{j=1}^{nc} \sum_{k=1}^{nc} x_{i,j} \cdot x_{i,k}} \quad (2.42)$$

Onde  $PM_i^{mist,L}$  é calculado pela equação (2.20):

$$PM_i^{mist,L} = \sum_{j=1}^{nc} x_{i,j} \cdot PM_j \quad (2.43)$$

## 2.6. Internos de torres de destilação: Pratos e recheios

### 2.6.1 Introdução

Os internos de torres são todos os dispositivos instalados no interior de torres de separação responsáveis pelas trocas de massa e calor. Na destilação, a variedade de dispositivos de contato líquido-gás utilizados é muito grande. Assim, neste item, são descritas as principais tecnologias de internos: pratos calotados, pratos valvulados, recheios randômicos e recheios estruturados, bem como um descritivo das características específicas de cada tecnologia e os principais fenômenos de hidráulica.

### 2.6.2 Torres com Pratos

Os pratos são os mais comuns dispositivos de transferência de massa utilizados na destilação. Os pratos são basicamente chapas com furos. Esses furos podem estar descobertos (pratos perfurados), podem estar cobertos com uma calota (pratos calotados) ou dispositivos móveis que se movimentam de acordo com a vazão de vapor (pratos valvulados). Existem diversos tipos de válvulas (tanto móveis quanto fixas) e calotas desenvolvidas por diversos

fabricantes. Segue abaixo o descritivo da configuração básica de torres com pratos.

### **2.6.2.1. Definição da configuração**

A configuração normalmente encontrada para os pratos, independentemente do tipo de dispositivo para borbulhamento da fase vapor na fase líquida, é composta por:

- Área ativa ou de borbulhamento;
- *Downcomer*;
- Zonas de acalmção;
- Zonas mortas;

A área ativa ou de borbulhamento é a área do prato na qual o líquido e o gás entram em contato. Nesta região é onde a maioria da troca de massa e calor ocorre e é onde ficam os dispositivos (válvulas, borbulhadores ou orifícios) que promovem o borbulhamento da fase vapor na fase líquida.

A região de *downcomers* é composta pela área de entrada de líquido que chega ao prato e pela área de saída de líquido do prato. Estas áreas podem ser iguais ou não, já que dependem do tipo de prato empregado.

As zonas de acalmção se localizam entre o *downcomer* de entrada e a primeira fileira de dispositivos de borbulhamento e entre a última fileira destes dispositivos e o vertedor de saída do prato.

A região do prato que fica diretamente sobre os anéis de suportaço, onde são colocados os atracadores para fixaço das bandejas ao costado pode-se denominar de zona morta. Nesta região não existe dispositivos que promovem o contato líquido-vapor (Caldas, 2007). A figura 2.3 representa as zonas e regiões do prato supracitadas e a configuraço dos anéis de suporte pode ser visto na Figura 2.4.

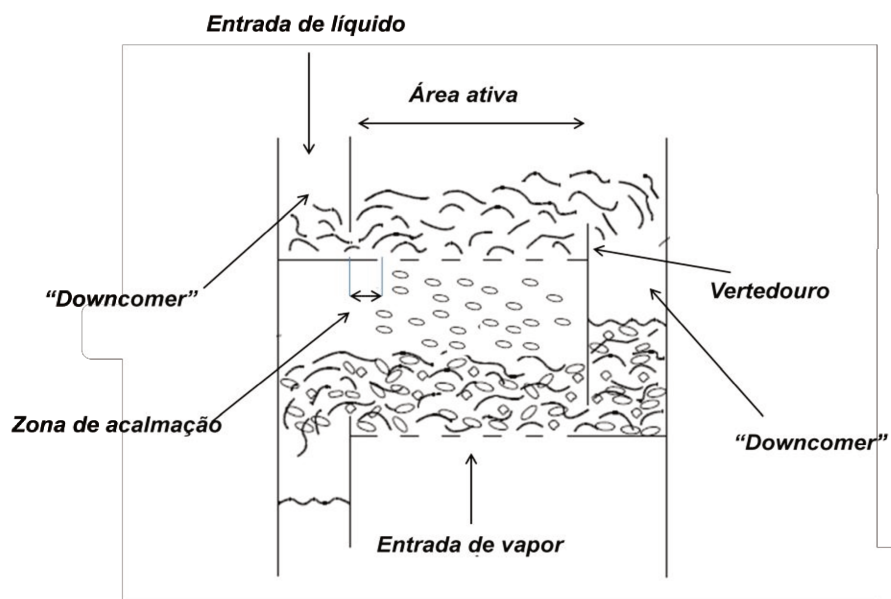


Figura 2.3.- Configuração típica de uma coluna com pratos – visão lateral

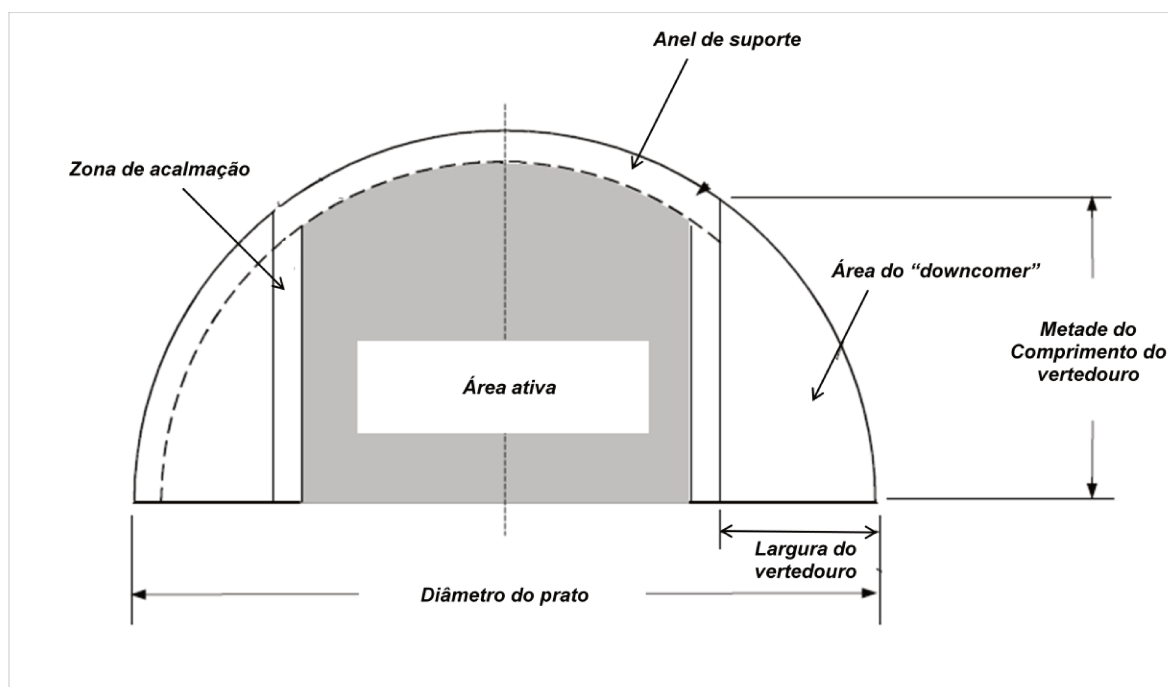


Figura 2.4. - Configuração típica dos pratos – visão superior

Segue abaixo na Figura 2.5 as principais características mecânicas e construtivas de um prato.



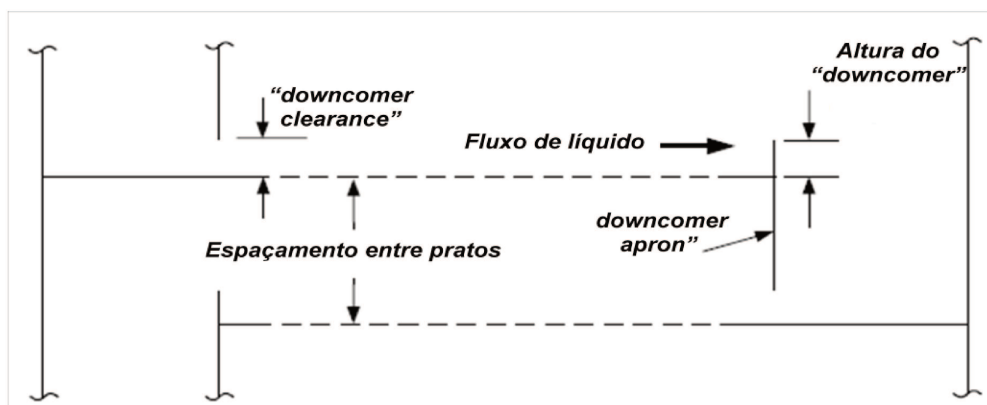


Figura 2.5. – Características mecânicas de um prato

Existem basicamente quatro tipos de configuração de prato: um passe, dois passes, três passes e quatro passes. As Figuras 2.6 e 2.7 demonstram a configuração básica destes tipos de pratos

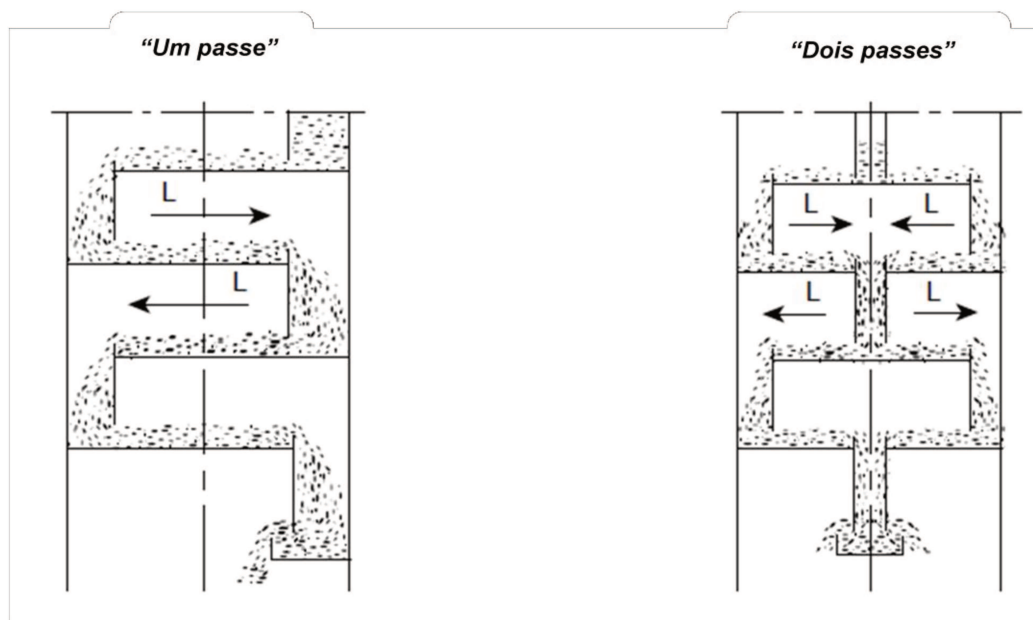


Figura 2.6- Configuração dos pratos de um passe e dois passes

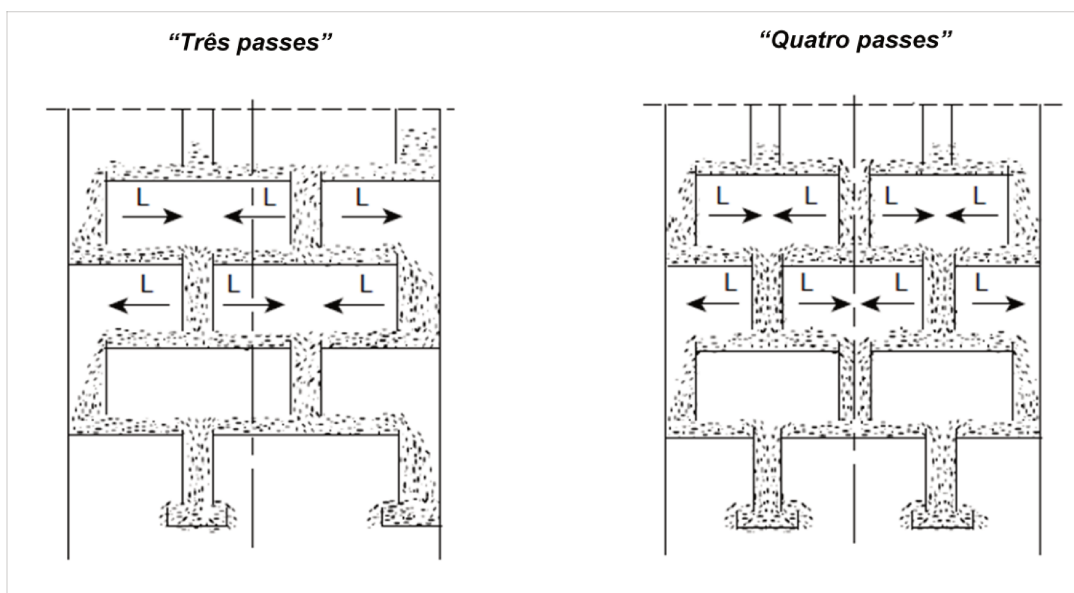


Figura 2.7- Configuração dos pratos de três passes e quatro passes

## 2.6.2.2. Considerações básicas sobre hidráulica

### 2.6.2.2.1. Regime de operação de torre com pratos

Considerando uma operação estável de um prato, três regiões são formadas com características distintas.

**Região 01:** Esta região é caracterizada pela formação de espuma (dependendo do processo) e altura variável. É a região que representa o escoamento do líquido no vertedor de saída.

**Região 02:** Esta região é formada por grandes gotas, resultado da forte transferência de quantidade de movimento da fase vapor para a fase líquida. A maioria destas gotas coalescem e retornam para a região 01.

**Região 03:** Esta região possui apenas gotas pequenas que são geralmente arrastadas pelo vapor para o prato de cima. Caso este arraste de gotículas for muito intenso, o líquido transportado pelo vapor se juntará com o líquido do prato superior causando um fenômeno chamado de dispersão axial (*back-mixing*).

A Figura 2.8 detalha as três regiões de uma coluna de destilação, considerando uma operação estável.

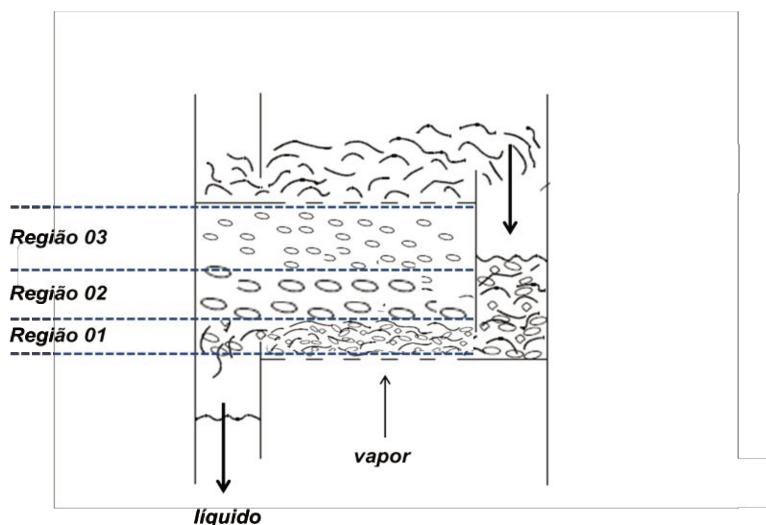


Figura 2.8 - Regime de operação de torres com pratos

As alturas das regiões supracitas variam de acordo com a as condições de operação da coluna e com o tipo de fluido envolvido na separação. Nesta dissertação, o fenômeno da inundação será descrito devido à importância na caracterização deste conceito nos resultados deste trabalho.

### Inundação em colunas

O fenômeno da inundação pode ser considerado como o principal limitante da capacidade máxima de um prato de destilação. O diâmetro de uma coluna é geralmente determinado de modo que a coluna atinja a máximo rendimento requerido sem inundar. As torres de destilação geralmente são projetadas para operar com o limite de inundação máximo de 80 a 90% (Perry et al, 2008).

A inundação é definida como o acúmulo excessivo de líquido dentro de uma coluna. Sintomas da inundação podem ser verificados por aumento repentino da perda de carga, isto é, uma quantidade excessiva de líquido pode ser verificada no topo da coluna e o mesmo não consegue alcançar o fundo da coluna. O acúmulo de líquido pode ser induzido, principalmente, pela inundação por arraste.

O *Jet flooding* ou inundação por arraste ocorre quando o líquido é, literalmente, projetado para o prato superior. Esta projeção se deve principalmente ao aumento da velocidade do gás pelo prato. Quando esta velocidade aumenta substancialmente, o líquido no prato começa a operar em regime de spray, o que pode causar até formação de espuma, assim, o prato quando opera continuamente neste regime, uma quantidade enorme de líquido é projetada e acumulada no prato superior.

#### **2.6.2.2.2. Perda de carga em torres com pratos**

Devido ao fato do vapor fluir através da zona de contato em um dado prato, o vapor deve superar duas resistências em série. A primeira é a perda de carga seca  $h_{dry}$  e a segunda resistência a altura de líquido  $h_{liq}$ . A perda de carga total no prato  $h_t$  é a soma  $h_{dry} + h_{liq}$ . A perda de carga no prato é um assunto crítico em dimensionamentos de pratos, principalmente em sistemas a vácuo onde uma mínima perda de carga é requerida.

A perda de carga seca  $h_{dry}$  representa a energia gasta para o vapor atravessar o dispositivo de contato (válvula, calota, furo etc.) quando não há líquido presente. Para aumentar a perda de carga seca, o tamanho do furo no prato deve diminuir. Para diminuir a perda de carga seca, deve-se aumentar o tamanho do furo. A perda de carga seca deve ser alta o bastante para promover um ótimo contato entre o líquido e o vapor, entretanto, deve ser baixa o suficiente para não causar arraste excessivo, regime em spray ou elevada carga de líquido no downcomer.

A altura de líquido  $h_{liq}$  é a segunda resistência que o vapor deve enfrentar para passar pelo prato. A altura de líquido é uma função da taxa de líquido e a altura do vertedouro. A altura de líquido deve ser alta o suficiente para promover a transferência de massa, entretanto, alturas de líquido excessivas devem ser evitadas pois podem causar inundação no *downcomer* e *weeping*.

### 2.6.2.3. Pratos calotados

Os pratos com borbulhadores são conhecidos como pratos calotados, representados na Figura 2.9. Estes modelos são basicamente pratos perfurados com tampas em formato de copo invertido ao redor dos furos. Os *caps* podem ter formato redondo ou retangular e geralmente possuem ranhuras ao seu redor onde o gás pode passar. O líquido e a espuma são aprisionados no prato a uma profundidade de pelo menos até a altura do vertedouro, o que fornece aos pratos calotados um alto *turndown*, isto é, os pratos calotados possuem a habilidade de operar também em vazões muito baixas de gás e de líquido (Bird al.,1960).



Figura 2.9- Pratos calotados (Koch-Glistch, 2003)

### 2.6.2.4. Pratos Valvulados

Os pratos valvulados podem ser considerados como a junção entre os pratos calotados e pratos perfurados. A construção é semelhante aos tipos calotados, entretanto, não existem ranhuras. Os pratos valvulados podem ser divididos basicamente em duas categorias: Pratos com válvulas fixas e pratos com válvulas móveis (Coulson et al., 2002).

Pratos com válvulas fixas: As perfurações no prato são cobertas por uma válvula fixa que pode ser de muitos formatos diferentes. O desempenho deste tipo de prato é semelhante aos pratos perfurados. A Figura 2.10 demonstra um prato com válvula fixa.



Figura 2.10 – Prato com válvula fixa (Koch-Glistch, 2003)

Pratos com válvulas móveis: Estes pratos possuem as perfurações cobertas por dispositivo em formato de disco (válvulas móveis), representados na Figura 2.11. A movimentação da válvula é controlada através de uma restrição inferior (pernas de travamento) no próprio corpo da válvula ou pode ser controlada por uma estrutura fixa no prato (“cage”) que controla o limite de movimentação da válvula. Se a velocidade do gás decresce, algumas válvulas fecham-se completamente, prevenindo o “weeping”. Esta característica promove um ótimo “turndown” (Bird et al., 1960).

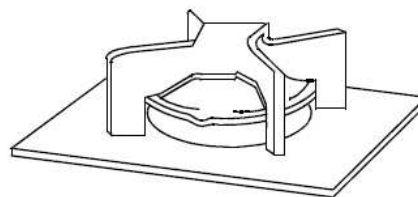
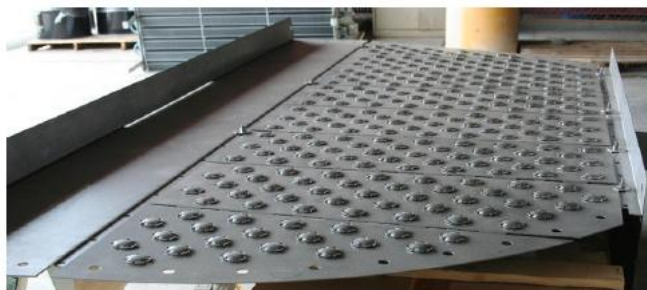


Figura 2.11-Pratos com válvulas V1 e válvulas T<sub>u</sub> “Caged Valve”, (Koch-Glistch, 2003)

### 2.6.3. Torres com Recheios

Em torres recheadas, a fase líquida é dispersa através da seção de um distribuidor líquido, escoando na forma de um filme líquido na superfície dos elementos de recheio. A seção transversal da torre é completamente ocupada por estes elementos, formando um leito poroso no qual o líquido e o gás escoam em contracorrente. O contato entre o líquido e o gás é feito de forma contínua. O recheio tem a função de sustentar o filme da fase líquida da mesma forma que permite um adequado contato entre as fases (Caldas, 2007).

Os recheios mais utilizados são os recheios randômicos e os recheios estruturados. A Figura 2.12 representa uma torre com recheios randômicos, recheios estruturados e distribuidores. Segue abaixo a descrição destes equipamentos.

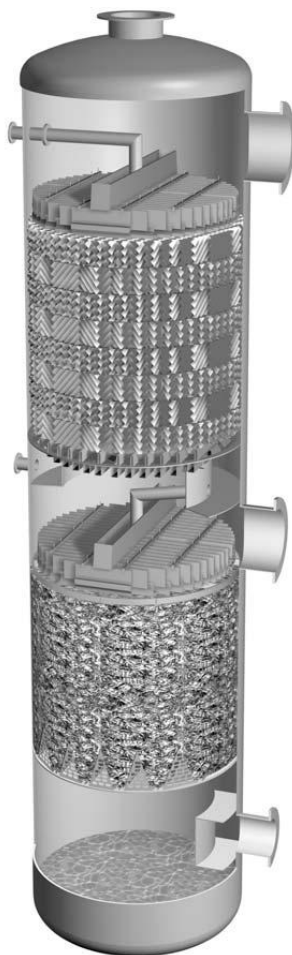


Figura 2.12- Configuração de uma torre contendo recheios estruturados e recheios randômicos. (Perry et al., 2008)



### 2.6.3.1. Definição da configuração

Devido à grande importância da distribuição do líquido e do gás pelos recheios, alguns internos que compõem a configuração de torres recheadas são de extrema importância para promover a transferência de calor e massa entre correntes de líquido e vapor associadas aos recheios. Assim seguem os principais equipamentos que compõem uma torre recheada.

#### Distribuidores de líquido

Os distribuidores de líquido são de grande importância para o funcionamento de uma torre recheada. Pode-se dizer que o sucesso ou o fracasso da implantação de uma torre recheada depende do bom funcionamento do sistema de distribuição de líquido. Existem diversos tipos de distribuidores específicos para cada aplicação, entretanto, todos eles devem ser dimensionados para uma distribuição homogênea de líquido. As Figuras 2.13 e 2.14 representam distribuidores de líquido:

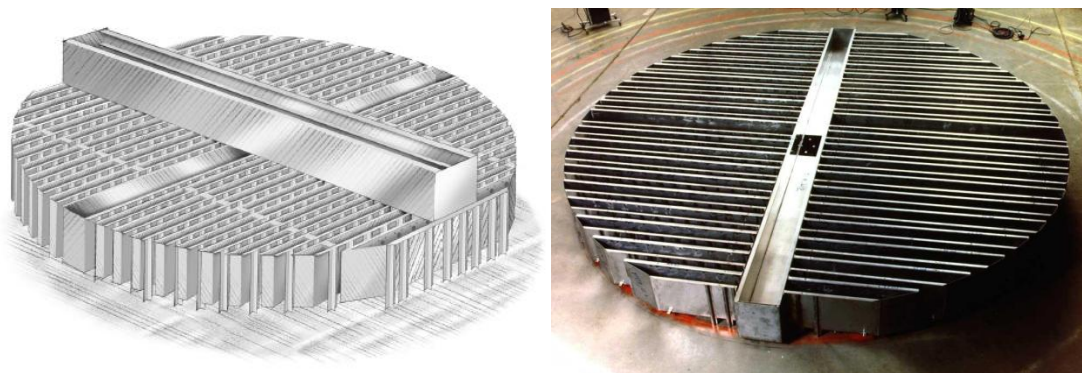


Figura 2.13 - Modelo 186 INTALOX Trough Distributor with Drip Tubes (Koch-Glitsch, 2003)



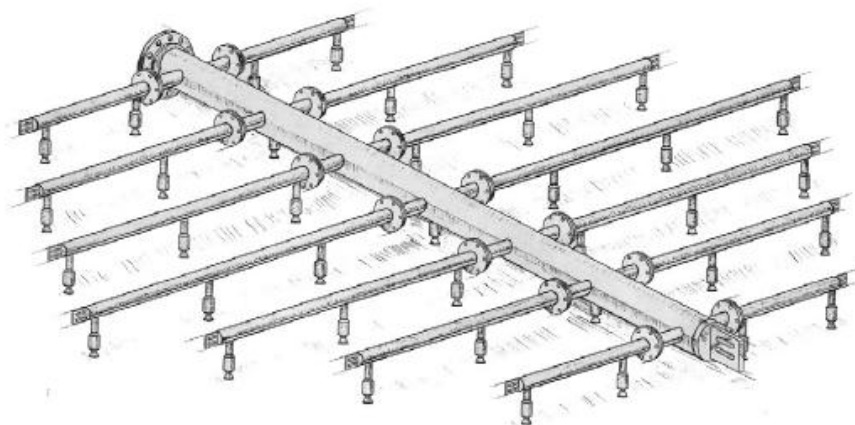


Figura 2.14 - Modelo 943 Spray Nozzle Distributor (Koch-Glitsch, 2003)

### Distribuidores de vapor

Os problemas associados à má distribuição do vapor não são frequentes, entretanto, as consequências da má distribuição do vapor podem ser tão problemáticas quanto aos efeitos da má distribuição do líquido. (Strigle et al., 1982) associa os problemas da má distribuição como uma função da energia cinética do gás no bocal de entrada, sempre que o gás for introduzido radialmente e perpendicular ao eixo vertical da torre. O problema da má distribuição é ainda pior em torres pressurizadas onde a densidade do gás é mais alta. Existem vários tipos de distribuidores específicos para cada aplicação. As Figuras 2.14 e 2.15 são exemplos de distribuidores de vapor:

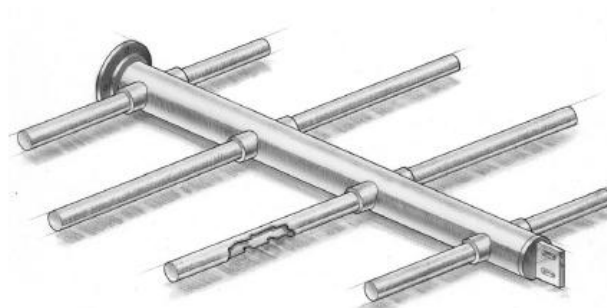


Figura 2.15 – Modelo 746-Lateral Arm Vapor Distributor (Koch-Glistch, 2003)

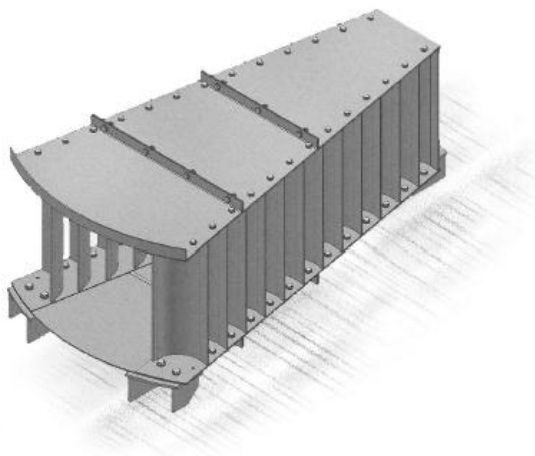


Figura 2.16 - Modelo 768 EVENFLOW™ Vane Type Vapor Distributor (Koch-Glistch, 2003)

### Suportadores de leitos

A principal função dos suportes de leito é sustentar o leito recheado sem impedir a passagem de líquido e de gás. Os primeiros projetos de torres recheadas utilizavam pratos perfurados para sustentar o leito. Estes pratos não podiam ser muito perfurados para não perderem a resistência mecânica, entretanto, em muitos casos ocorria a inundação prematura da torre devido à porcentagem de área livre ser muito baixa. Com o desenvolvimento de recheios com tecnologias mais eficientes, houve necessidade de desenvolvimento de suportes com maior resistência mecânica e maior porcentagem de área aberta. As Figuras 2.17 e 2.18 são exemplos de suportes de leitos:



Figura 2.17 – Modelo 804 Random Packing Gas Injection Support Plate (Koch-Glistch, 2003)

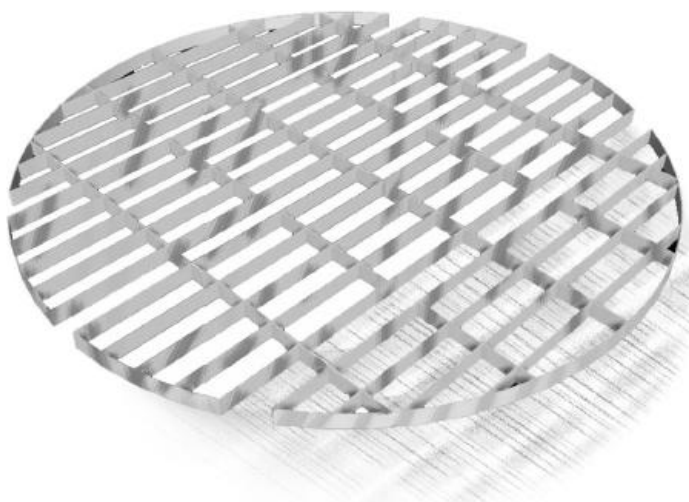


Figura 2.18 – Modelo 802 Structured Packing Support Grid (Koch-Glistch, 2003)

#### Limitadores de leitos e redistribuidores de líquido

A principal função destes equipamentos é evitar a suspensão do leito ou o arraste de alguma peça individualmente. Em torres onde são utilizados recheios plásticos, durante a operação, pode ocorrer o amolecimento do material polimérico. Assim, os limitadores geralmente são equipamentos leves e fixos ao costado da torre. A Figura 2.19 representa um limitador de leito:

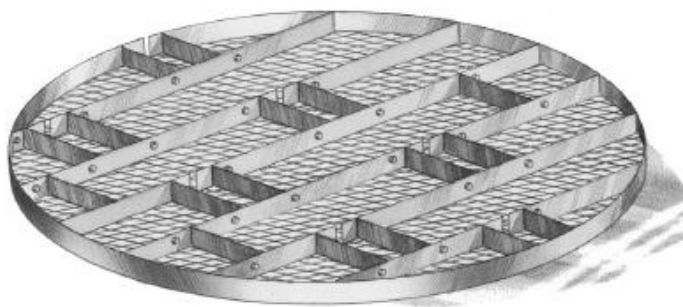


Figura 2.19 – Modelo 805 Random Packing Bed Limiter (Koch-Glistch, 2003)

A utilização de redistribuidores de líquido é importante mesmo quando se está utilizando um recheio de alta eficiência. A principal função de um redistribuidor é garantir a otimização da distribuição do líquido pelo recheio. O projeto para redistribuidores é similar ao de distribuidores de líquido. A Figura 2.20 é um exemplo de redistribuidor.

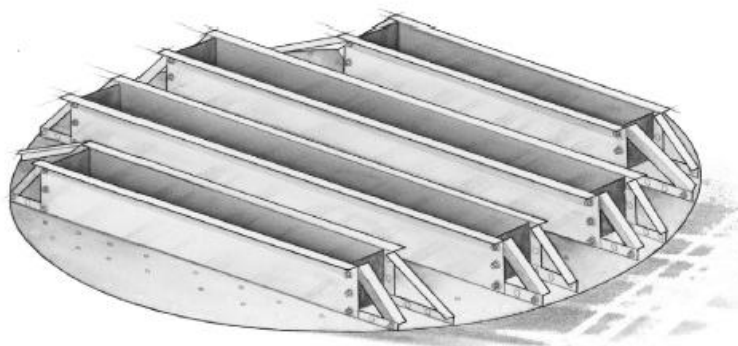


Figura 2.20 – Modelo 916 Deck Distributor With Bottom Orificies (Koch-Glistch, 2003)

## **2.6.3.2. Considerações básicas sobre hidráulica**

### **2.6.3.2.1. Regime de operação de torre com recheios**

Um dos principais fenômenos que ocorre em recheios estruturados é o holdup. O Holdup de líquido é o líquido presente nos espaços vazios do recheio. Uma quantidade razoável de líquido nos espaços vazios é necessária para uma boa transferência de massa e uma operação eficiente da coluna, contudo, ele deve ser mantido baixo. Um alto holdup aumenta a perda de carga na torre e o

peso dos recheios, consequentemente, aumenta a carga de suportaão na parte inferior do recheio e no fundo da coluna e diminui o tempo de drenagem.

Geralmente o Holdup independe da velocidade do gs, entretanto, tem uma forte relaão com a vazão de líquido e o tamanho do recheio. Recheios de pequenas dimensões e altas vazões de líquido tendem a proporcionar um alto holdup.

### 2.6.3.2.2. Perda de carga em torres com recheios

O conhecimento da perda de carga é muito importante para calcular uma torre com recheios, especialmente em sistemas a vácuo. O mais recente método desenvolvido por Robbins considera que a perda de carga total é a soma da perda de carga seca e a perda de carga dinâmica:

$$\Delta P_t = \Delta P_{dry} + \Delta P_{dyn} \quad (2.44)$$

A perda de carga seca ( $\Delta P_{dry}$ ) é calculada como se não tivesse líquido fluindo através do leito recheado, que pode ser escrita pela equação:

$$\Delta P_{dry} = C_3 \cdot G_f^2 \cdot 10^{(C_4 \cdot L_f)} \quad (2.42)$$

A perda de carga dinâmica ( $\Delta P_{dyn}$ ) é calculada considerando a presença de líquido, o qual efetivamente diminui a seção transversal disponível para o fluxo gasoso.

$$\Delta P_{dyn} = 0,4 [L_f/20000]^{0,1} \cdot [C_3 \cdot G_f^2 \cdot 10^{(C_4 \cdot L_f)}]^4$$

Onde:

$$G_f = 986 F_s (F_{pd}/20)^{0,5}$$

$$L_f = L. (62,4/\rho_L). (F_{pd}/20)^{0,5} \mu_L^{0,2} \text{ para } F_{pd} > 200$$

$$L_f = L. (62,4/\rho_L). (20/F_{pd})^{0,5} \mu_L^{0,1} \text{ para } F_{pd} < 15$$

$$C_3 = 7,4 (10^{-8})$$

$$C_4 = 2,7 (10^{-5})$$

O termo  $F_{pd}$  é o fator de perda de carga seca, específico para cada tipo de recheio e tamanho e estes valores são tabelados. Assim, os termos  $L_f$  e  $G_f$  são avaliados e o  $\Delta P_{dyn}$  é obtido diretamente das tabelas.

### 2.6.3.3. Recheios Randômicos

Os recheios randômicos são dispositivos que visam otimizar as transferências de massa e calor entre as fases líquida e vapor. Os recheios randômicos podem ser de vários formatos e tamanhos diferentes. O primeiro recheio patenteado foi inventado pelo Dr. Raschig, na Alemanha. Os anéis de raschig são cilindros ocos, cuja altura é igual ao diâmetro. Estes recheios podem ser fabricados de material cerâmico, metálico e plástico. A Figura 2.21 ilustra os anéis de raschig.



Figura 2.21- Anéis de raschig (Koch-Glistch, 2003)

Algumas variações dos anéis de raschig foram desenvolvidas para aumentar a área superficial dos recheios. Estes recheios são chamados de anéis de Lessing (bi-partido diametralmente) e os anéis Particionados (tetra-partido diametralmente) e estão representados na Figura 2.22.

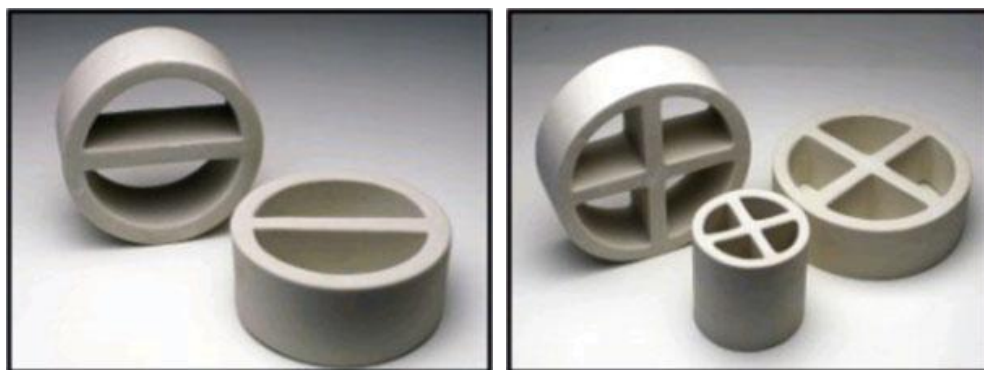


Figura 2.22- Anéis particionados e bi-partidos (Celene, 2004)

As selas de Berl, ilustrado na Figura 2.23, é o segundo recheio mais antigo que foi desenvolvido na década de 30. Este recheio não foi muito difundido, pois suas vantagens sobre os outros recheios não foram suficientemente justificadas para torná-lo viável.



Figura 2.23- Selas Berl (Koch-Knight, 2007)

Na década de 50 foi criada as selas intalox, representado na Figura 2.24, considerada como a nova versão da Sela de Berl. Devido ao seu formato, as selas intalox são mais fáceis de serem produzidas em material plástico e cerâmico e são responsáveis por 90% do mercado de recheios cerâmicos.



Figura 2.24 - Selas INTALOX (Koch-Knight, 2007)

Os anéis de Pall, uma melhoria dos anéis de Raschig, foram introduzidos na década de 50. Os anéis de Pall possuem a mesma dimensão cilíndrica empregando duas fileiras com protuberâncias para a parte interna do cilindro. Essas duas fileiras com protuberâncias promovem um aumento significativo de performance. A Figura 2.25 ilustra os anéis de Pall.

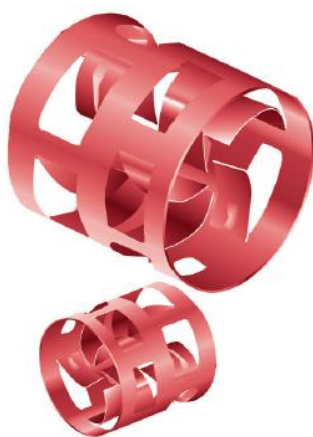


Figura 2.25 - Pall Ring (Koch-Glistch, 2003)



Em 1976, a Norton iniciou um projeto de pesquisa para o aumento de eficiência de torres recheadas de destilação e desenvolveram o recheio IMTP (sigla em inglês para Intalox Metal Tower Packing). Este recheio é considerado mais eficiente que o anel de pall e também disponível em várias dimensões. A Norton foi incorporada pela Koch-Glitsch em 2002. A Figura 2.26 ilustra o IMTP.



Figura 2.26 - IMTP (Koch-Glitsch, 2003)

#### **2.6.3.4. Recheios Estruturados**

Os recheios estruturados são fabricados a partir de placas de metal finas, corrugadas e arranjadas em paralelo entre elas. As superfícies das placas corrugadas podem ter ranhuras, texturas ou ser lisas. Podem ser perfuradas ou não. A placa corrugada é montada em camadas, geralmente entre 8 a 12 polegadas de altura. Os elementos adjacentes são rotacionados mas as camadas de um único elemento possuem um ângulo fixo em relação a camada inferior.

O tamanho da corrugação é o que define a área aberta entre as camadas corrugadas adjacentes. Quanto menores as dimensões  $2b$ ,  $h$  e  $S$ , mais estreita

são as aberturas, mais camadas por unidade de volume, maior área superficial, e consequentemente, mais eficiente é o recheio.

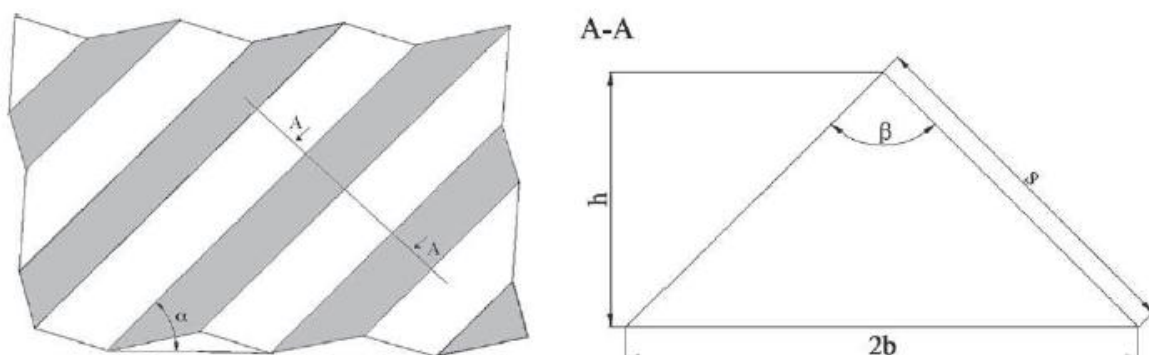


Figura 2.27- Dimensões do Canal triangular dos Recheios Estruturados (Luo et al., 2008)

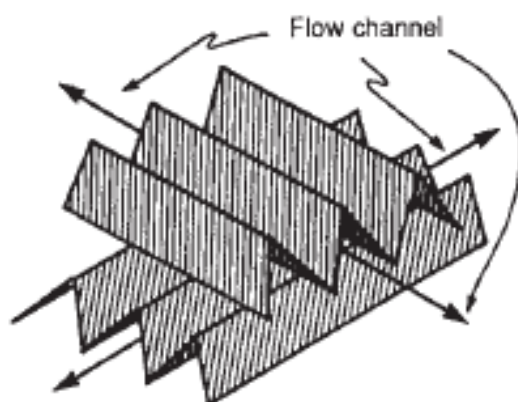


Figura 2.28- Canais Cruzados dos Recheios Estruturados (Perry et al., 2008)

As Figuras 2.29 e 2.30 são exemplos de recheios estruturados. É possível perceber na Figura 2.30 os canais triangulares, a corrugação e a fina espessura na placa. Este tipo de recheio permite um amplo contato gás-líquido pela grande área superficial que este tipo de configuração promove.

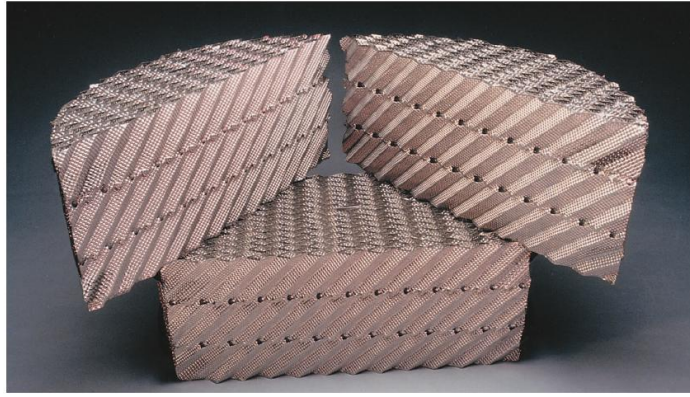


Figura 2.29 - Recheios Estruturados (Koch-Glistch, 2003)

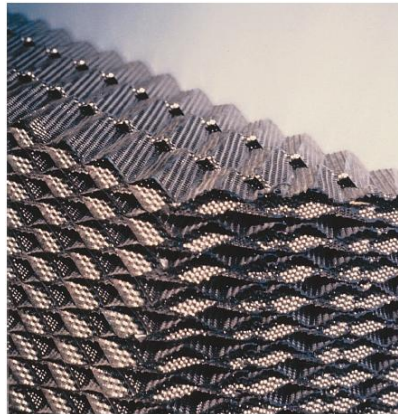


Figura 2.30- Canais Cruzados dos Recheios Estruturados (Koch-Glistch, 2003)

#### **2.6.4. Conclusão**

Este capítulo teve como objetivo revisar os conceitos teóricos básicos de modelagem de simulação de processos, configuração e hidráulica de torres com pratos e recheios. As considerações abordadas neste capítulo são de grande importância para o embasamento teórico dos capítulos posteriores.

## **Capítulo 3**

# **Caracterização do Processo e Metodologia Utilizada nas Simulações**

### **3.1. Introdução**

Neste capítulo serão definidas a caracterização termodinâmica do processo e as metodologias de cálculo de pratos calotados, pratos valvulados, recheios randômicos e recheios estruturados para modelos de não equilíbrio. Além disso, também serão definidas as configurações mecânicas dos internos selecionados para a simulação.

### **3.2. Caracterização Termodinâmica do Processo**

A caracterização do sistema é uma avaliação de suma importância para entender o comportamento dos componentes de uma mistura nas colunas de destilação, portanto a utilização de modelos termodinâmicos adequados para representar o sistema é de suma importância na simulação de processos.

O modelo de coeficiente de atividade é a melhor forma de representar a não idealidade da fase líquida em misturas não ideais a baixas pressões. Parâmetros binários para o modelo de Wilson, NRTL e UNIQUAC estão disponíveis no banco de dados do Aspen para uma grande quantidade de pares de componentes (Aspen, 2001).

Os parâmetros binários são válidos somente para as faixas de pressão e temperatura dos dados. Os parâmetros binários que estiverem fora da faixa de temperatura e pressão validados, deverão ser utilizados com cuidado.

Alguns trabalhos foram realizados para caracterizar o melhor modelo termodinâmico de coeficiente de atividade que descreve o sistema bioetanol-água, assim, (Junqueira, 2010) concluiu que os modelos UNIQUAC e NRTL predizem de forma satisfatória o equilíbrio neste sistema. Devido à ótima predição do modelo NRTL para o sistema bioetanol-água, neste trabalho resolveu-se adotar este método.

### 3.3. Metodologia de cálculo da simulação (Estágio de não equilíbrio)

A metodologia de cálculo utilizada no dimensionamento das colunas de destilação é baseada nos modelos de estágios de não equilíbrio. O simulador Aspen Plus RateFrac utilizado é um modelo para simular todos os tipos de operações multi-estágios de fracionamento líquido-vapor. O RateFrac simula colunas com pratos e recheios reais, ao invés da representação idealizada de estágios de equilíbrio. O RateFrac leva em consideração a transferência de massa na interface e processos de transferência de calor para determinar o grau de separação. O RateFrac não utiliza fatores empíricos, tais como a eficiência e a altura equivalente de pratos teóricos (HETP).

RateFrac utiliza as correlações bem conhecidas para calcular:

- Coeficiente binário de transferência de massa para a fase líquida e vapor;
- Áreas interfaciais;

Em geral, estes valores dependem do diâmetro da coluna e parâmetros operacionais tais como:

- Fluxos de vapor e de líquido;
- Densidades;
- Tensão superficial do líquido;
- Coeficientes de difusão binária da fase líquida e vapor;

Em pratos e recheios, os coeficientes de transferência de massa e áreas interfaciais variam de forma diferente. A seguir segue as variáveis de influência:

- Recheios
  - Tipo (randômico ou estruturado);
  - Tamanho;
  - Área superficial específica;
  - Material de construção;

- Pratos
  - Tipo (perfurado, valvulado ou calotado);
  - Vertedouro e tipos de passes de pratos;
  - Área do *downcomer*;
  - Comprimento do vertedouro;

As correlações que o RateFrac utiliza para calcular os coeficientes de transferência de massa e áreas interfaciais são:

Tabela 3.1- Correlações Utilizadas no cálculo do Aspen RateFrac®

<b><i>Tipo de Interno</i></b>	<b><i>Correlação Utilizada</i></b>
Pratos Calotados	Gerster et al. (1958)
Pratos Valvulados	Scheffe and Weiland (1987)
Recheios Randômicos	Onda et al. (1968)
Recheios Estruturados	Bravo et al. (1985,1992)

### 3.3.1. Pratos Calotados

RateFrac calcula o produto dos coeficientes binários de transferência de massa e áreas interfaciais usando as correlações desenvolvidas por Gerster et al., encontradas no (Aspen, 2001).

O produto dos coeficientes binários de transferência de massa e área interfacial na fase líquida é dado pela correlação

$$k_{in}^L a = (4,127 \cdot 10^8 D_{in}^L)^{0,5} (0,21313F + 0,15) L t_L \quad (3.1)$$

O produto do coeficiente de transferência de massa e área interfacial da fase gasosa é dado pela correlação:

$$k_{in}^g a = \frac{(0,776 + 4,567 h_w - 0,2377 H + 104,85 Q_L) G}{(Sc_{in}^g)^{0,5}} \quad (3.2)$$

Onde:

$k_{in}^L$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase líquida ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$a$	Área interfacial ( $\text{m}^2$ área interfacial / $\text{m}^2$ torre da área ativa)
$D_{in}^L$	Coeficiente binário de difusão de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ )
$F$	Fator $F = \mu_g \rho_g^{1/2}$ ( $\text{kg}^{1/2} \text{m}^{-0,5}.\text{s}^{-1}$ )
$\mu_g$	Fluxo de gás volumétrico por unidade de área ativa ( $\text{m}^3.\text{s}^{-1} \text{m}^{-2}$ )
$\rho_g$	Densidade da mistura de gás ( $\text{kg. m}^{-3}$ )
$L$	Velocidade molar do líquido ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$t_L$	Tempo de residência do líquido = $0,9998 h_L Z_L / Q_L$ (s)
$h_L$	“holdup” do líquido = $0,04191 + 0,19 h_w + 2,4545 Q_L - 0,0135 F$ (m)
$Z_L$	Comprimento do caminho do fluxo líquido (m)
$Q_L$	Fluxo do líquido por largura de caminho médio ( $\text{m}^3.\text{s}^{-1} \text{m}^{-2}$ )
$h_w$	Tomada de altura da saída (m)
$K_{in}^g$	Coeficiente binário de transferência de massa por par binário i e n na fase vapor ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$G$	Velocidade de molar do gás ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$Sc_{in}^g$	Número de Schmidt para o par binário i e n da fase gasosa = $n = \mu_g / (\rho_g . D_{in}^g)$

### 3.3.2. Pratos Valvulados

RateFrac calcula o produto dos coeficientes binários de transferência de massa e áreas interfaciais disponíveis usando as correlações desenvolvidas por (Sheffe et al., 1987) , encontradas no Tutorial Aspen (Aspen, 2001).

O produto dos coeficientes binários de transferência de massa e área interfacial na fase líquida é dado pela correlação

$$Sh_{in}^L = 125,4(Re_g)^{0,68}(Re_L)^{0,09}(v)^{0,05}(Sc_{in}^L)^{0,5} \quad (3.3)$$

A correlação dos coeficientes binários de transferência de massa da fase líquida é:

$$Sh_{in}^g = 9,93(Re_g)^{0,87}(Re_L)^{0,13}(\omega)^{0,39}(Sc_{in}^g)^{0,5} \quad (3.4)$$

A área disponível para a transferência de massa é dada pela correlação:

$$a = 0,27(Re_g)^{0,37}(Re_L)^{0,25}(\omega)^{0,52} \quad (3.5)$$

Onde:

$$Sh_{in}^L = \frac{k_{in}^L \cdot ad}{\rho m_L D_{in}^L}, \quad Sh_{in}^g = \frac{k_{in}^g \cdot ad}{\rho m_g D_{in}^g}, \quad Sc_{in}^L = \frac{\mu_L}{\rho m_L D_{in}^L},$$
$$Sc_{in}^g = \frac{\mu_g}{\rho g D_{in}^g}, \quad Re_L = \frac{Ld}{\mu_L}, \quad Re_g = \frac{Gd}{\mu_g}, \quad \omega = \frac{W}{d}$$

onde:



L	Velocidade de massa do líquido - Velocidade é baseada na área da torre ativa ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
d	Parâmetro geométrico da unidade de comprimento (m)
$\mu_L$	Viscosidade da mistura do líquido ( $\text{N.s.m}^{-2}$ )
G	Velocidade da massa do gás - Velocidade baseada na área da torre ativa ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$\mu_g$	Viscosidade da mistura do gás ( $\text{N.s.m}^{-2}$ )
$k_{in}^L$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase líquida ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
a	Área interfacial ( $\text{m}^2$ de área interfacial/ $\text{m}^2$ de área ativa da torre)
$\rho m_L$	Densidade molar do líquido ( $\text{kgmol.m}^{-3}$ )
$D_{in}^L$	Coeficiente binário de difusão de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )
$K_{in}^g$	Coeficiente binário de transferência de massa por par binário i e n na fase vapor ( $\text{kgmol.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$\rho m_g$	Densidade molar da mistura de gás ( $\text{kgmol.m}^{-3}$ )
$\rho_L$	Densidade da mistura do líquido ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\rho_g$	Densidade da mistura do gás ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
W	Altura do vertedouro (m)

### 3.3.3. Recheios Randômicos

RateFrac calcula o produto dos coeficientes binários de transferência de massa e áreas interfaciais disponíveis usando as correlações desenvolvidas por Onda et al., 1968, encontradas no Tutorial (Aspen, 2001).

O produto dos coeficientes binários de transferência de massa e área interfacial na fase líquida é dado pela correlação:

$$\left[ k_{in}^L \left( \frac{\rho_L}{g\mu_L} \right)^{1/3} \right] = 0,0051 \left( \frac{L}{a_\omega \mu_L} \right)^{2/3} (Sc_{in}^L)^{-1/2} (a_P d_P)^{0,4} \quad (3.6)$$

A correlação do coeficiente binário de transferência de massa da fase gasosa é:

$$\left[ k_{in}^g \left( \frac{RT^g}{a_P D_{in}} \right) \right] = 5,23 \left( \frac{G}{a_P \mu_g} \right)^{0,7} (Sc_{in}^g)^{1/3} (a_P d_P)^{-2} \quad (3.7)$$

A área interfacial disponível para a transferência de massa é dada pela correlação:

$$a_\omega = a_P \{ 1 - \exp[-1,45 Re_L^{0,1} Fr_L^{-0,05} We_L^{0,2} (\sigma/\sigma_C)^{-0,75}] \} \quad (3.8)$$

Onde:

$$Re_L = \frac{L}{a_P \mu_L}, Fr_L = \frac{a_P L^2}{g \rho_L^2}, We_L = \frac{L^2}{a_P \sigma \rho_L}$$

e:

$k_{in}^L$  Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase líquida (m.s<sup>-1</sup>)

$\rho_L$  Densidade do líquido (kg.m<sup>-3</sup>)

$g$	Aceleração da gravidade ( $\text{m.s}^{-2}$ )
$\mu_L$	Viscosidade do líquido ( $\text{N.s.m}^{-2}$ )
$L$	Velocidade da massa líquida superficial ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$a_\omega$	Área interfacial molhada ( $\text{m}^2$ de área interfacial/ $\text{m}^3$ de volume de recheio)
$Sc_{in}^L$	Número de Schmidt para o par binário i e n na fase líquida $= \mu_L/(\rho_L D_{in}^L)$
$D_{in}^L$	Coeficiente binário de difusão de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )
$a_p$	Área superficial específica do recheio ( $\text{m}^{-1}$ )
$d_p$	Diâmetro nominal do recheio ou tamanho do recheio (m)
$k_{in}^g$	Coeficiente binário de transferência de massa para o par binário i e n na fase vapor ( $\text{kgmol.atm}^{-1}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$R$	Constante universal do gás ( $\text{m}^3.\text{atm.kgmol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ )
$T^g$	Temperatura da fase gasosa (K)
$G$	Velocidade da massa superficial do gás ( $\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$ )
$\mu_g$	Viscosidade da mistura de gás ( $\text{N.s.m}^{-2}$ )
$Sc_{in}^g$	Número de Schmidt para o par binário i e n da fase gasosa $n = \mu_g/(\rho_g D_{in}^g)$
$\rho_g$	Densidade da mistura de gás ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$D_{in}^g$	Coeficiente de difusão binário de Maxwell-Stefan para o par binário i e n ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )
$\sigma$	Tensão superficial ( $\text{N.m}^{-1}$ )
$\sigma_c$	Tensão superficial crítica no material de recheio ( $\text{N.m}^{-1}$ )

### 3.3.4. Recheios Estruturados

(Bravo, 1996) propuseram um modelo de transporte interfásico baseado em estudos colunas de paredes molhadas. A relação parede molhada foi retida, com ajustes nos diâmetros hidráulicos. Os números de Sherwood, Reynolds e Schmidt foram combinados:

$$\frac{k_g S}{D_g} = 0,054 \left( \frac{(U_{ge} + U_{Lc}) \rho_g S}{\mu_g} \right)^{0,8} \left( \frac{\mu_g}{D_g \rho_g} \right)^{0,33} \quad (3.9)$$

Na fase de transferência gasosa as velocidades efetivas são definidas como:

$$U_{ge} = \frac{U_{gs}}{\epsilon(1-h_L) \sin \theta} \quad (3.10)$$

$$U_{Le} = \frac{U_{Ls}}{\epsilon h_L \sin \theta} \quad (3.11)$$

Nos casos em que a resistência do líquido é relevante, a aproximação da penetração pode ser usada, com modificação do tempo de exposição (Lee et al., 1998):

$$t_e = S / C_E U_{Le} \quad (3.12)$$

O coeficiente de transferência de na fase líquida pode ser calculada de acordo com a seguinte relação:

$$K_L = 2 \left( \frac{D_L C_E U_{Le}}{\pi S} \right)^{1/2} \quad (3.13)$$

A estimativa da área interfacial foi baseada em parâmetros críticos para o “holdup” do líquido e a espessura da lâmina. As considerações foram feitas no caso de recheios estruturais de folha de metal.

$$\frac{a_e}{a_p} = F_{SE} \frac{29,12 (We_L Fr_L)^{0,15} S^{0,359}}{Re_L^{0,2} \epsilon^{0,6} (1 - 0,93 \cos \gamma) (\sin \theta)^{0,3}} \quad (3.14)$$

$$\cos \gamma = 0,9 \text{ para } s < 0,055 \frac{\text{N}}{\text{m}}$$

$$\cos \gamma = 5,211 \times 10^{-16,835\sigma} \text{ para } \sigma < 0,055 \frac{\text{N}}{\text{m}}$$

O número de Reynolds é dado pela equação

$$Re_L = 4dU_{Le} \rho_L / \mu_L \quad (3.15)$$

Onde:

$k_g$	Coeficiente de transferência de massa na fase gasosa ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$S$	Comprimento da ondulação (m)
$D_g$	Coeficiente de difusão na fase gasosa ( $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$ )
$U_{ge}$	Velocidade efetiva do gás ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$U_{Lc}$	Velocidade efetiva do líquido ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$U_{gs}$	Velocidade superficial do gás ( $\text{m.s}^{-1}$ )
$\rho_g$	Densidade do gás ( $\text{kg.m}^{-3}$ )
$\mu_g$	Viscosidade do gás ( $\text{kg. s}^{-1}\text{m}^{-1}$ )
$\epsilon$	Fração vazio do recheio

$h_L$	Coeficiente de transferência de massa na fase líquida ( $m.s^{-1}$ )
$\theta$	Ângulo com a horizontal pelo declínio da lâmina ou ondulação do canal (deg)
$U_{Le}$	Velocidade efetiva do líquido ( $m.s^{-1}$ )
$U_{Ls}$	Velocidade superficial do líquido ( $m.s^{-1}$ )
$t_e$	Tempo de exposição (s)
$C_E$	Fator de correção para a renovação da superfície
$K_L$	Coeficiente de transferência de massa na fase líquida ( $m.s^{-1}$ )
$D_L$	Coeficiente de difusão na fase líquida
$a_e$	Área efetiva ( $m^{-1}$ )
$a_p$	Área do recheio da superfície ( $m^{-1}$ )
$F_{SE}$	Fator de aprimoramento para a superfície
$We_L$	Número de Weber para o líquido
$Fr_L$	Número de Froude para o líquido
$Re_L$	Número de Reynolds para o líquido
$\gamma$	Ângulo de contato (deg)
$\sigma$	Tensão Superficial ( $N.m^{-1}$ )
$\rho_L$	Densidade do líquido ( $kg.m^{-3}$ )
$\mu_L$	Viscosidade do líquido ( $N.s.m^{-2}$ )
$d$	Diâmetro (m)

### **3.4. Características dos internos considerados nas simulações**

#### **3.4.1. Pratos Calotados**

Para pratos calotados, o Aspen utiliza os seguintes parâmetros no cálculo:

- Espaçamento entre pratos;
- Altura do vertedouro;
- Comprimento do vertedouro;
- Área ativa;
- Área do downcomer;
- Fator de espuma;

As informações requisitadas pelo ASPEN, que utiliza o método de Gerster desenvolvido especificamente para pratos calotados, são apenas o espaçamento entre pratos, altura do vertedouro e fator de espuma. O comprimento do vertedouro, área ativa e área do downcomer são calculados automaticamente pelo aspen, considerando correlações proporcionais ao diâmetro do prato. Segue abaixo os valores das informações inseridas no Aspen:

- Espaçamento entre pratos: 609,6 mm;
- Altura do vertedouro: 50,8 mm;
- Fator de espuma: 1;

#### **3.4.2. Pratos Valvulados**

Para pratos calotados, o Aspen utiliza os seguintes parâmetros no cálculo:

- Espaçamento entre pratos;
- Altura do vertedouro;
- Comprimento do vertedouro;
- Área ativa;
- Área do downcomer;

- Fator de espuma;

As informações requisitadas pelo ASPEN, que utiliza o método de (Sheiffe et al., 1987) desenvolvido especificamente para pratos valvulados, são apenas o espaçamento entre pratos, altura do vertedouro e fator de espuma. O comprimento do vertedouro, área ativa e área do *downcomer* são calculadas automaticamente, considerando correlações proporcionais ao diâmetro do prato. Segue abaixo os valores das informações inseridas no Aspen:

- Espaçamento entre pratos: 609,6 mm;
- Altura do vertedouro: 50,8 mm;
- Fator de espuma: 1;

O método de Scheiffe and Weiland desenvolvido é aplicado somente para pratos valvulados do tipo V-1 (Koch-Glitsch). As válvulas V-1 possuem um diâmetro padrão de aproximadamente 48mm.

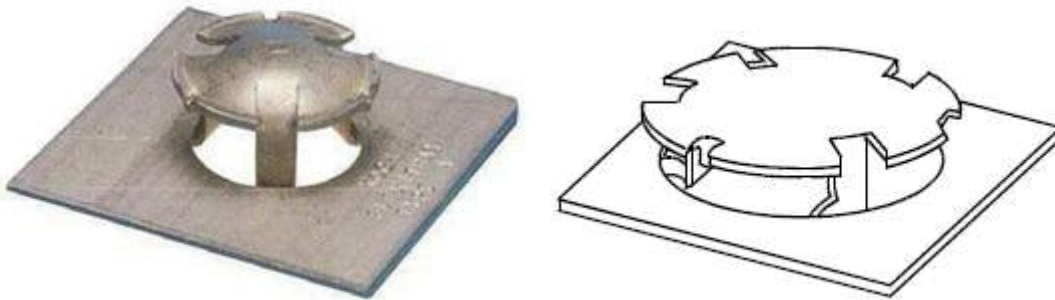


Figura 3.1-Válvula tipo V-1 (Koch-Glitsch, 2003)

### 3.4.3. Recheios Randômicos

Para recheios randômicos, o Aspen utiliza os seguintes parâmetros no cálculo:

- Tamanho do Recheio;
- Fator do Recheio;
- Tensão Superficial Crítica;
- Área Superficial Específica;
- Fração de Espaços Vazios;



O recheio randômico selecionado para as simulações foi o IMTP 40 (Koch-Glitsch). Este recheio possui as seguintes características:

- Tamanho do recheio: 38,1mm;
- Fator do Recheio:  $0,787392 \text{ cm}^{-1}$ ;
- Tensão Superficial Crítica: 75 dyne/cm;
- Área Superficial Específica:  $151 \text{ m}^2/\text{m}^3$ ;
- Fração de Espaço vazios: 0,971;



Figura 3.2 - Recheio Randômico IMTP (Koch-Glitsch, 2003)

#### 3.4.4. Recheios Estruturados

Para recheios Estruturados, o Aspen utiliza os seguintes parâmetros no cálculo:

- Fator do Recheio;
- Área Superficial Específica;
- Fração de Espaço Vazios;

O recheio selecionado para as simulações foi o FLEXIPAC 1Y (Koch-Glitsch). Este recheio possui as seguintes características:

- Fator do Recheio:  $0,982824 \text{ cm}^{-1}$
- Área Superficial Específica:  $423,23 \text{ m}^2/\text{m}^3$
- Fração de Espaço Vazios: 0,979

O número Y no nome do recheio refere-se ao ângulo de orientação de  $45^\circ$  das placas corrugadas.

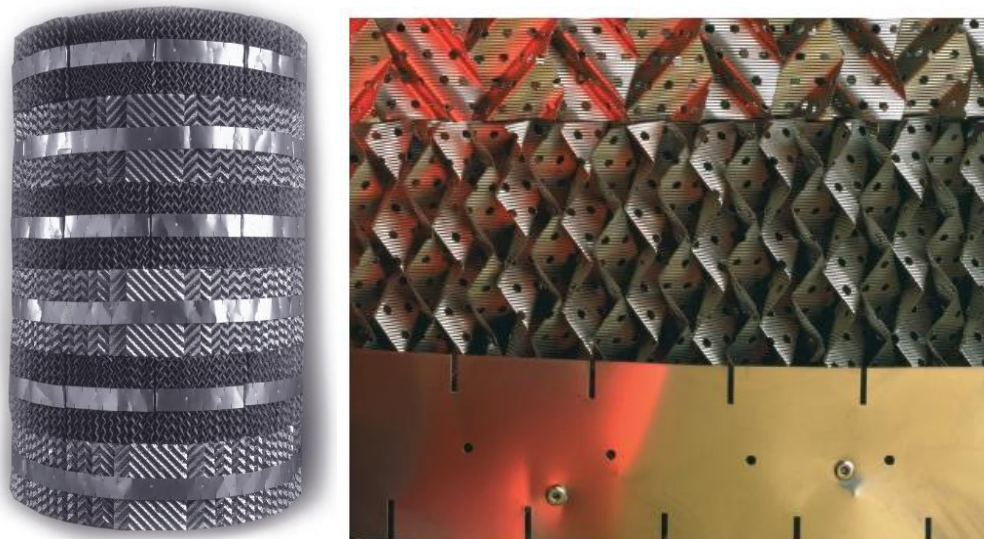


Figura 3.3 - Recheio estruturado (Koch-Glistch, 2003)

#### 3.4.4. Conclusão

Este capítulo teve como principais objetivos caracterizar termodinamicamente o processo, isto é, definir qual o melhor modelo de atividade que representa o sistema bioetanol-água. Apresentar o método de cálculo aplicado na modelagem de não equilíbrio para cada tecnologia de prato e recheio e definir as dimensões e características mecânicas de cada prato e recheio adotado.

## **Capítulo 4**

### **Resultados e Discussão**

#### **4.1. Introdução**

Neste Capítulo, primeiramente, serão estabelecidas as condições de processo adotadas em todas as simulações. Posteriormente, os resultados das simulações são apresentados variando os tipos de internos, a posição de alimentação, a quantidade de pratos ou recheios e o diâmetro da coluna. Após a apresentação dos resultados das simulações, uma discussão é realizada baseada principalmente na importância da identificação da posição ótima de alimentação e análise dos são avaliados para definir a quantidade mínima de pratos ou altura de recheios e diâmetro otimizado da coluna.

#### **4.2. Definição dos dados de processo e premissas da coluna de destilação convencional com pratos calotados**

Nas simulações com o software Aspen Plus® utilizando a sub-rotina RateFrac do processo de destilação do bioetanol para obtenção do bioetanol hidratado, foi considerada uma coluna com as seguintes correntes:

- Corrente de Entrada;
- Corrente de Topo;
- Corrente de Fundo;
- Corrente de Vapor;

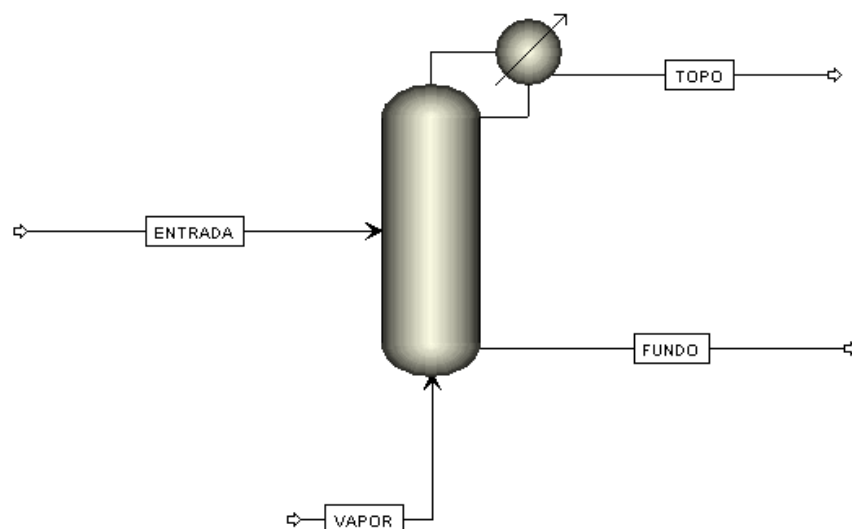


Figura 4.1- Definição das correntes da coluna de destilação

Existe uma grande dificuldade em obter os dados de processo da corrente de entrada das colunas B/B1 de uma usina convencional, principalmente as variáveis como a temperatura e a pressão de entrada da coluna, visto que estes dados não são frequentemente mensurados na maioria das usinas. Decorrente disto, para estabelecer confiabilidade nos dados considerados na corrente de entrada nestas simulações, os dados adotados foram retirados de um artigo escrito por (Marquini et al., 2007). Sabe-se que na grande maioria das usinas a destilação é realizada pela injeção de vapor saturado no fundo da coluna. Pode-se estimar a quantidade de vapor consumida na destilação da coluna B/B1 é em torno de 1 a 1,5 kg de vapor por litro de bioetanol hidratado produzido (Neto et al, 2009).

Para definir as características de uma coluna de destilação convencional, foram consideradas como premissas nesta dissertação uma coluna com as seguintes condições processuais e dimensionais detalhadas na Tabela 4.1:

Tabela 4.1 – Coluna de destilação convencional

<b>Especificações e Características da Coluna</b>	
<b>Corrente de entrada:</b>	
<i>Temperatura [°C]</i>	91
<i>Pressão [Pa (g)]</i>	38932
<i>Vazão Total [kg/h]</i>	42400
<i>Fração mássica de Bioetanol</i>	0,45
<i>Fração mássica de Água</i>	0,55
<b>Especificações de operação</b>	
<i>Pressão no Topo da Coluna [KPa]</i>	116
<i>Pressão no Fundo da Coluna [KPa]</i>	140
<i>Vazão de Destilado [kg/h]</i>	20275
<b>Características dimensionais</b>	
<i>Número de Pratos</i>	63
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	3800
<i>Prato de Alimentação</i>	47

Foi considerado o topo da coluna como número 1 e o fundo da coluna como número 63.

A vazão de destilado foi mantida em 20275 kg/h, pois considerando que a massa específica média do bioetanol hidratado com fração mássica de 0,938 é aproximadamente 811 kg/m<sup>3</sup>, a vazão volumétrica total no topo da coluna seria de 25 m<sup>3</sup>/h. Este valor equivale à produção de 600 m<sup>3</sup>/d.

Para definir a quantidade de vapor de escape a ser injetada no fundo da coluna a fim de obter uma fração mássica mínima de bioetanol no topo de 0,938, várias simulações foram realizadas variando a vazão de vapor de escape, conforme Tabela 4.2:

Tabela 4.2 – Variação de vazão de vapor de escape

Fração mássica de etanol no topo	vazão de vapor [kg/h]
0,92557	22300
0,92685	22900
0,92803	23500
0,92913	24100
0,93015	24700
0,93111	25300
0,93201	25900
0,93285	26500
0,93364	27100
0,93438	27700
0,93508	28300
0,93574	28900
0,93636	29500
0,93695	30100
0,93751	30700
0,93804	31300

Portanto, a vazão de vapor de escape deverá ser de 31300 kg/h para obter-se uma fração mássica de bioetanol de no mínimo 0,938 na corrente de topo. Este valor de 31300 kg/h será fixado em todas as simulações subseqüentes, pois as comparações das dimensões das colunas com diferentes internos serão realizadas em um mesmo parâmetro energético.

Uma coluna com produção de 600 m<sup>3</sup>/d equivale a produção de 25000 L/h. Se considerarmos que o gasto de vapor de escape na coluna de destilação B/B1 varia entre 1 a 1,5 Kg de vapor por litro de bioetanol hidratado produzido, para obtermos o consumo de vapor total deve-se multiplicar o gasto de vapor de escape pela quantidade de litros de bioetanol produzido. O resultado desta multiplicação demonstra um consumo que varia de 25000 Kg/h a 37500 Kg/h, isto é, o valor de consumo de vapor obtido nas simulações de 31300 Kg/h para obter-

se a fração mássica mínima de 0,938 de bioetanol na corrente de topo está coerente com as informações da literatura.

Outra premissa que foi considerada nesta dissertação para definir a quantidade de pratos ou altura de recheios necessária nas simulações foi a fração mássica mínima de 0,938 de bioetanol na corrente de topo. Assim, a configuração da coluna obtida para cada tecnologia está baseada na mínima quantidade de dispositivos (pratos ou recheios) para atingir este valor de fração mássica. Sabe-se que pela portaria Nº2 da ANP, o valor do bioetanol hidratado deve estar entre 0,926 a 0,938 em fração mássica, entretanto, foi definido neste trabalho que a coluna deve obter a fração mássica de bioetanol de no mínimo 0,938 na corrente de topo.

### 4.3. Simulações de otimização

As simulações de otimização das dimensões da coluna serão realizadas mantendo as seguintes premissas e especificações de operação detalhadas na Tabela 4.3:

Tabela 4.3 – Premissas e especificações de operação do processo

<b>Condições de Processo Consideradas</b>	
<b>Corrente de entrada:</b>	<b>Valores</b>
<i>Temperatura [°C]</i>	91
<i>Pressão [Pa g]</i>	38932
<i>Vazão total [kg/h]</i>	42400
<i>Fração mássica de bioetanol</i>	0,45
<i>Fração mássica de água</i>	0,55
<b>Especificações de operação</b>	
<i>Pressão no topo da coluna [KPa]</i>	116
<i>Pressão no fundo da coluna [KPa]</i>	140
<i>Vazão de destilado [kg/h]</i>	20275
<i>Vazão de vapor de escape [kg/h]</i>	31300
<i>Concentração Mássica Mínima de bioetanol no Topo</i>	0,98300

Entretanto, as características dimensionais como número de pratos ou altura de recheios, posição de alimentação e diâmetro da coluna serão alteradas

para avaliar as otimizações nas dimensões. A modificação da tecnologia de internos de pratos calotados, pratos valvulados, recheios randômicos e recheios estruturados também será considerada na avaliação.

#### 4.3.1. Coluna de destilação com pratos calotados

A partir das premissas consideradas na simulação da coluna de destilação convencional que possui 63 pratos, diâmetro de 3800 mm e posição de alimentação no prato 47, segue abaixo os resultados e análises dos seguintes parâmetros da coluna utilizado pratos calotados:

- Perfil geral das correntes;
- Perfil de temperatura do líquido, do vapor e na interface;
- Análise da Porcentagem de inundação no prato;
- Análise da perda de carga nos pratos;
- Posição de alimentação;

##### Perfil geral das correntes (pratos calotados)

Segue abaixo na Tabela 4.4 o perfil das correntes de entrada e de vapor que serão valores fixos e as correntes de fundo e de topo que são calculadas no Aspen.

Tabela 4.4- Perfil geral das correntes (pratos calotados)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,22	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,21	19018,78	0
<i>Água</i>	23320	53363,79	1256,22	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00114	0,93804	0
<i>Água</i>	0,55	0,99886	0,06196	1



## Perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface (pratos calotados)

O gráfico do perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface está representado na Figura 4.2

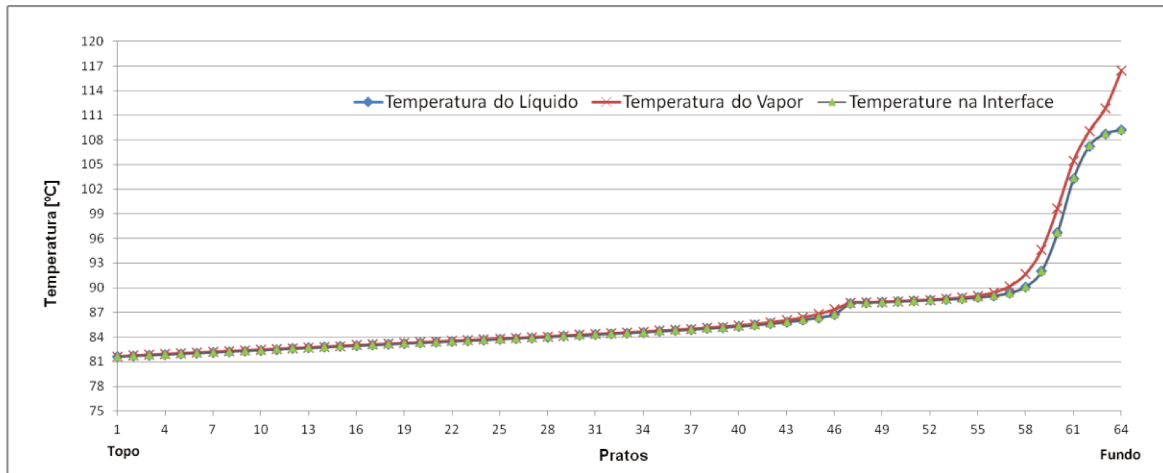


Figura 4.2 – Perfil de Temperatura do líquido, do vapor e da interface

É possível perceber que a partir do prato de alimentação 47 ocorre um aumento de ligeiro de temperatura. De acordo com o perfil de temperatura da coluna, a temperatura no prato 47 deveria ser próxima de 87 °C, mas como a alimentação de toda a carga está próxima de 91 °C, a temperatura do prato 47 se eleva para 88,18 °C, conforme demonstrado na Tabela 4.5 abaixo:

Tabela 4.5 – Perfil de temperatura na coluna (pratos calotados)

Prato	Temperatura do Líquido [°C]	Temperatura do Vapor [°C]	Temperatura na Interface [°C]
45	86,38	86,82	86,38
46	86,79	87,40	86,79
47	88,12	88,18	88,11
48	88,18	88,23	88,19
49	88,26	88,31	88,26
50	88,34	88,39	88,34

### Análise da Porcentagem de inundação (pratos calotados)

Conforme descrito no Capítulo 3, a porcentagem de inundação está intimamente ligada com o diâmetro da coluna e sabe-se que as colunas devem ser projetadas para porcentagem de inundação entre 80 e 90%. Dessa forma, segue a análise da porcentagem de inundação da coluna de destilação convencional simulada com diâmetro de 3800 mm.

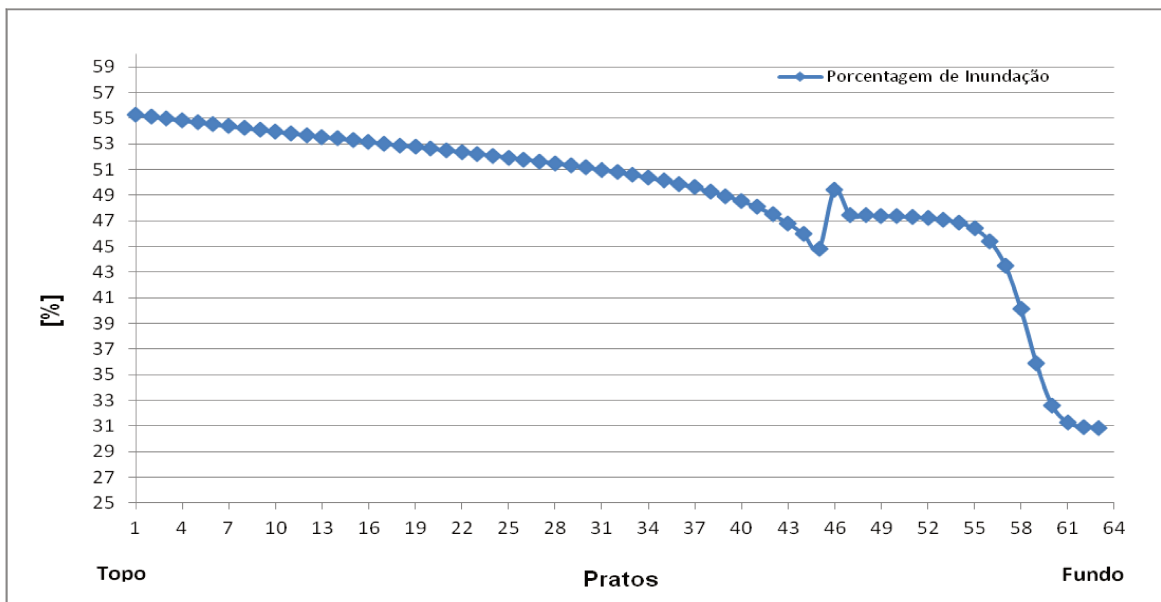


Figura 4.3 – Gráfico de análise da porcentagem de inundação da coluna de Destilação

Percebe-se que a porcentagem de inundação máxima da coluna com diâmetro de 3800 mm está próxima de 55%. Dessa forma, podemos dizer que a coluna está com porcentagem de inundação muito abaixo da recomendada de 80%.

### Análise da perda de carga (pratos calotados)

Sabe-se que a perda de carga total de um prato é a soma da perda de carga seca (depende da configuração do prato) e a perda de carga do líquido, que é uma função da taxa de líquido e a altura do vertedouro. Portanto, o gráfico

representado pela Figura 4.4, demonstra a perda de carga em cada prato considerando o diâmetro da coluna de 3800 mm.

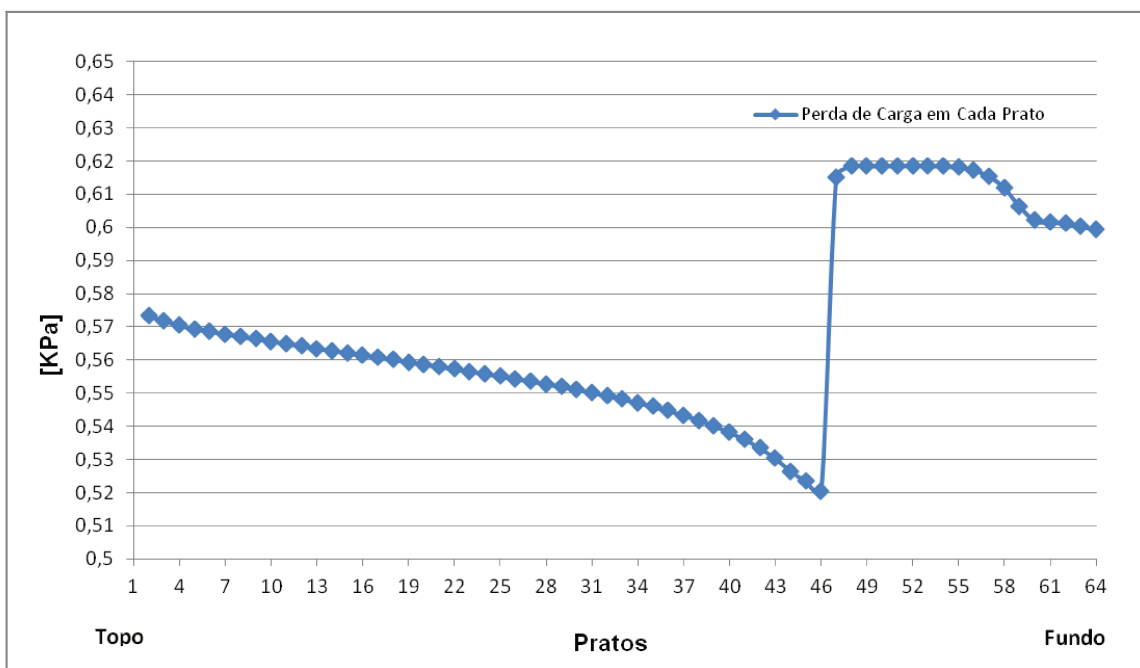


Figura 4.4 – Gráfico de perda de carga em cada prato calotado

### Posição de Alimentação (pratos calotados)

Segue abaixo a Figura 4.5 que representa o gráfico que relaciona a fração mássica dos componentes água e bioetanol na fase líquida em cada prato da coluna.

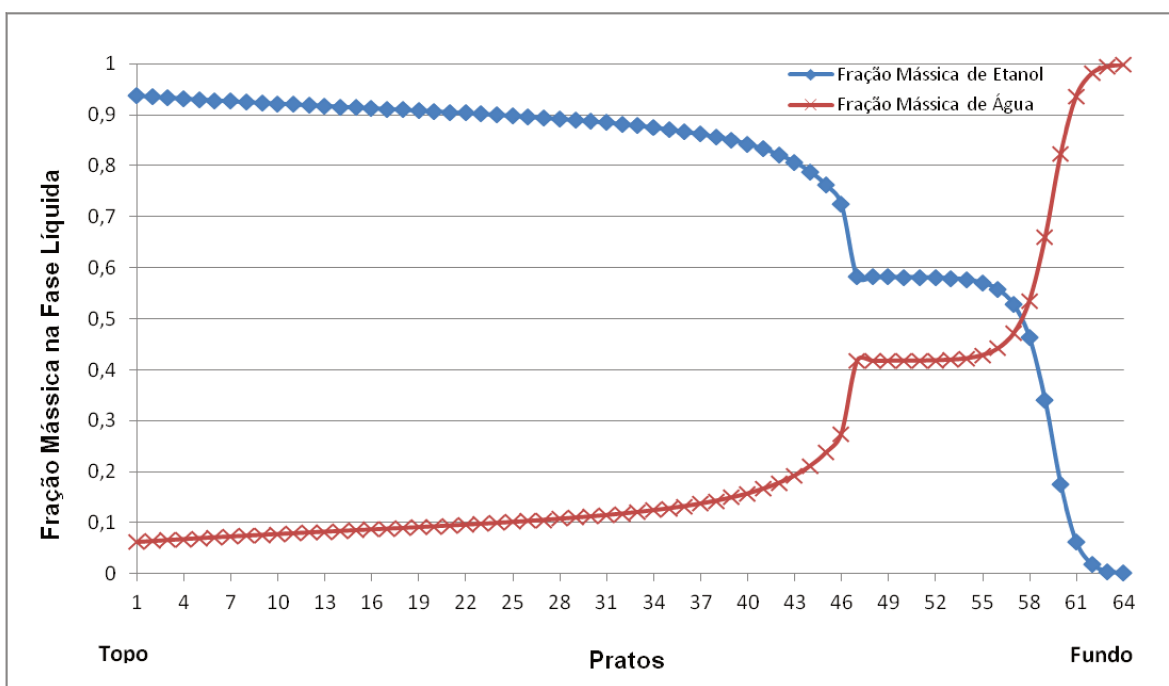


Figura 4.5 – Gráfico fração mássica na fase Líquida de bioetanol e água

É possível perceber alimentação da coluna neste prato altera o perfil da composição de bioetanol e água. Este fenômeno será discutido com mais detalhes no item 4.3.1.1.

#### 4.3.1.1 Variação da posição de alimentação de pratos calotados

Para avaliar a influência da posição de alimentação na concentração mássica de bioetanol na corrente de topo, foram realizadas várias simulação alternando o prato de alimentação. Segue abaixo o gráfico que representa a fração mássica líquida de bioetanol e água em cada prato para a posição de alimentação no prato 47, isto é, considerando a posição de alimentação equivalente a uma coluna convencional existente.

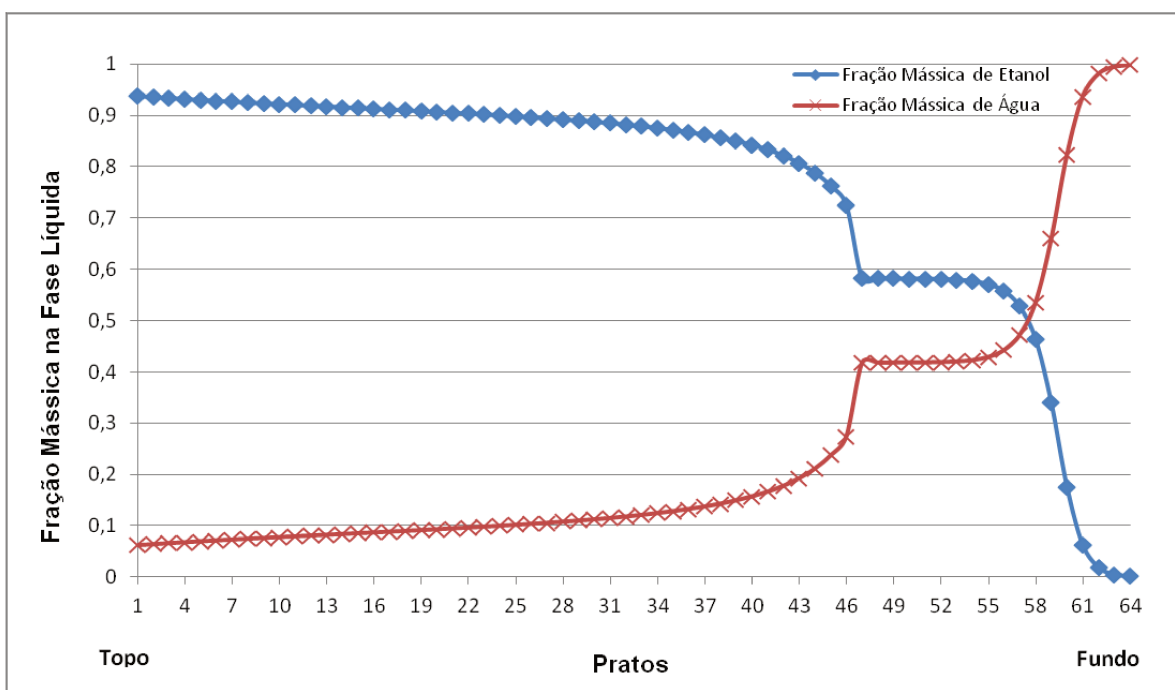


Figura 4.6 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 47

No gráfico é possível identificar a posição de alimentação no prato 47 pela mudança abrupta de direção das curvas. Esta é a curva da composição de bioetanol e água na fase líquida equivalente a usina convencional simulada.

Segue uma sequência de gráficos representados pelas Figuras 4.7 até a Figura 4.17, com as respectivas posições de alimentação:

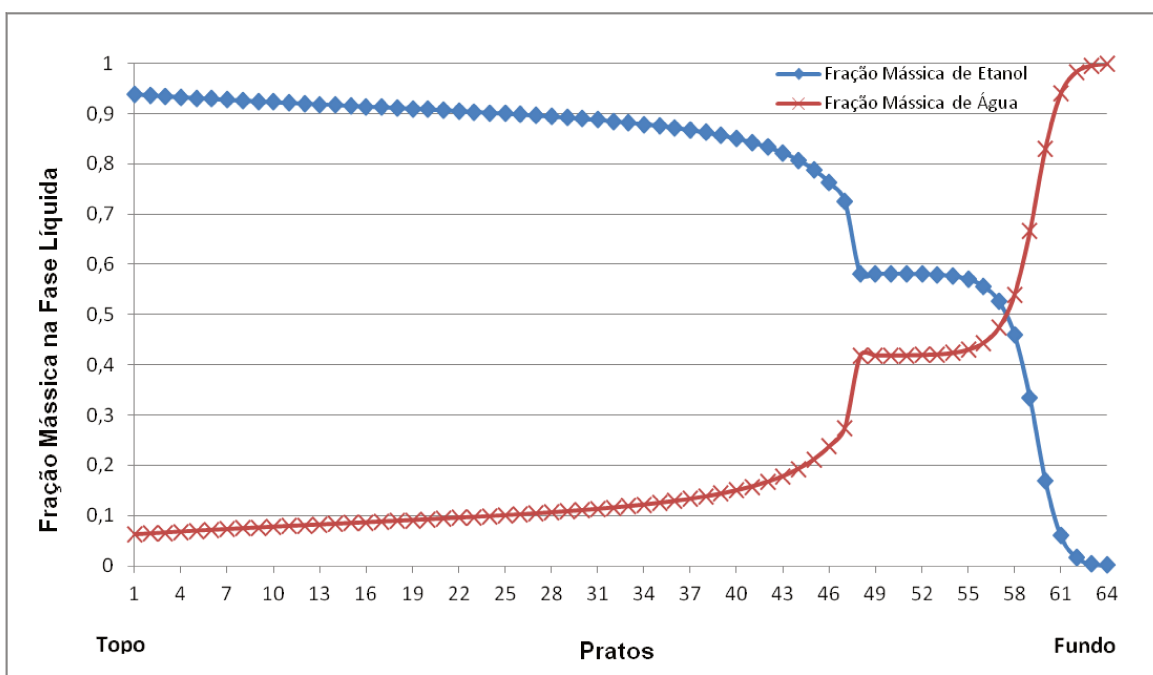


Figura 4.7 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 48

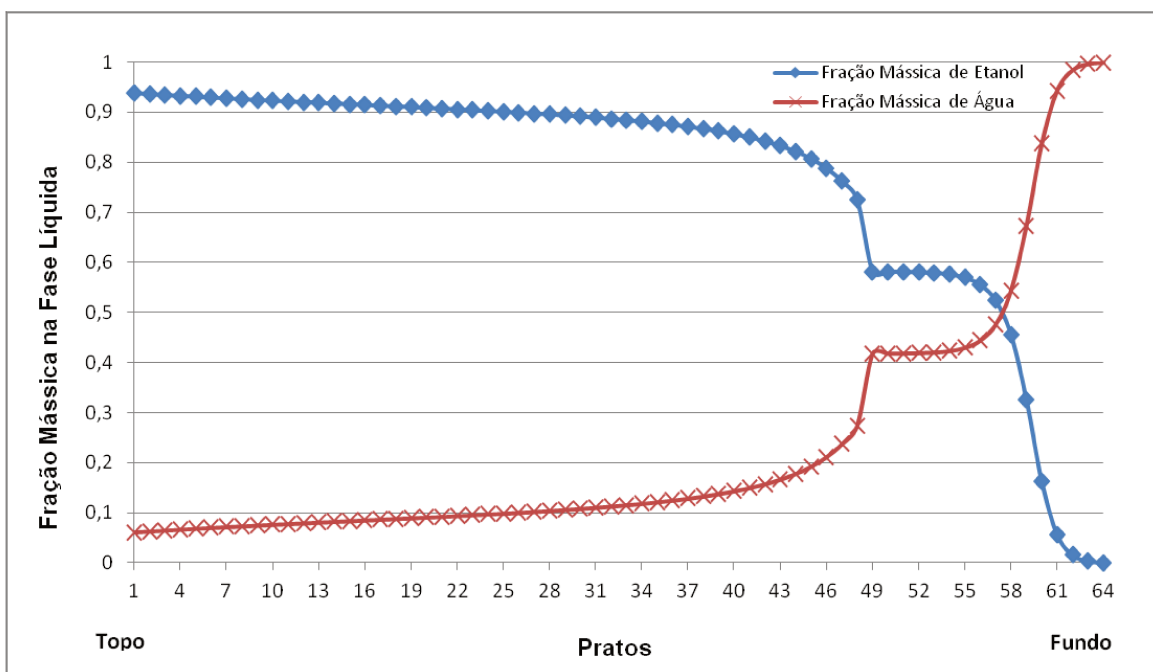


Figura 4.8 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 49

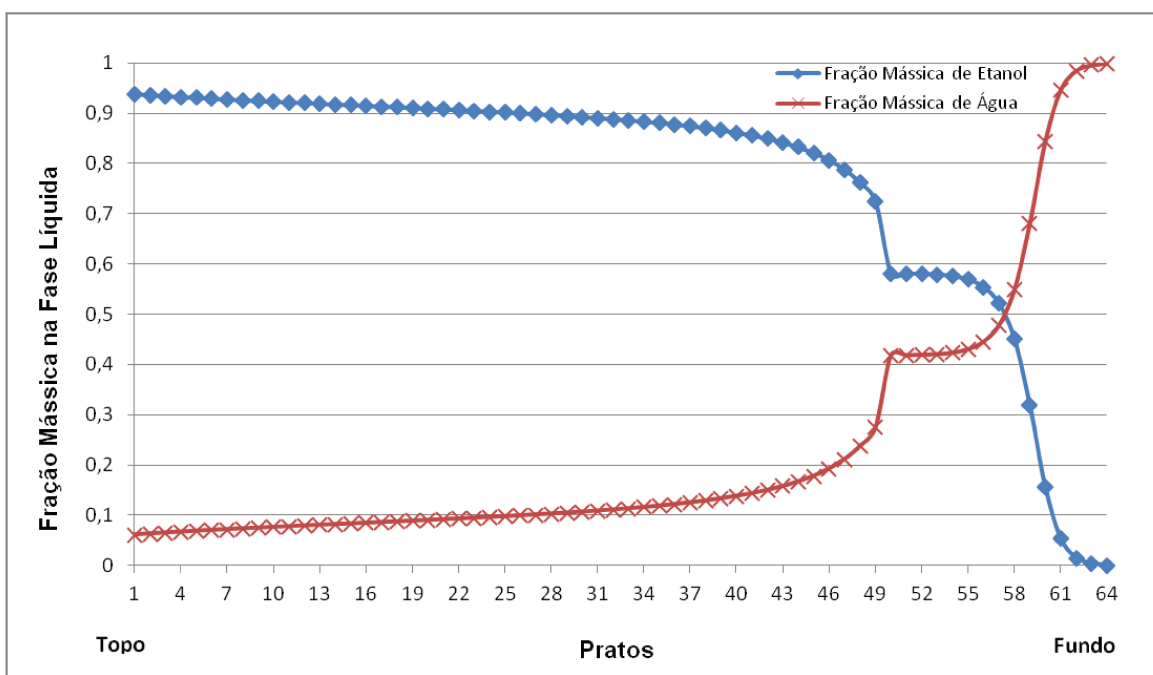


Figura 4.9 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 50

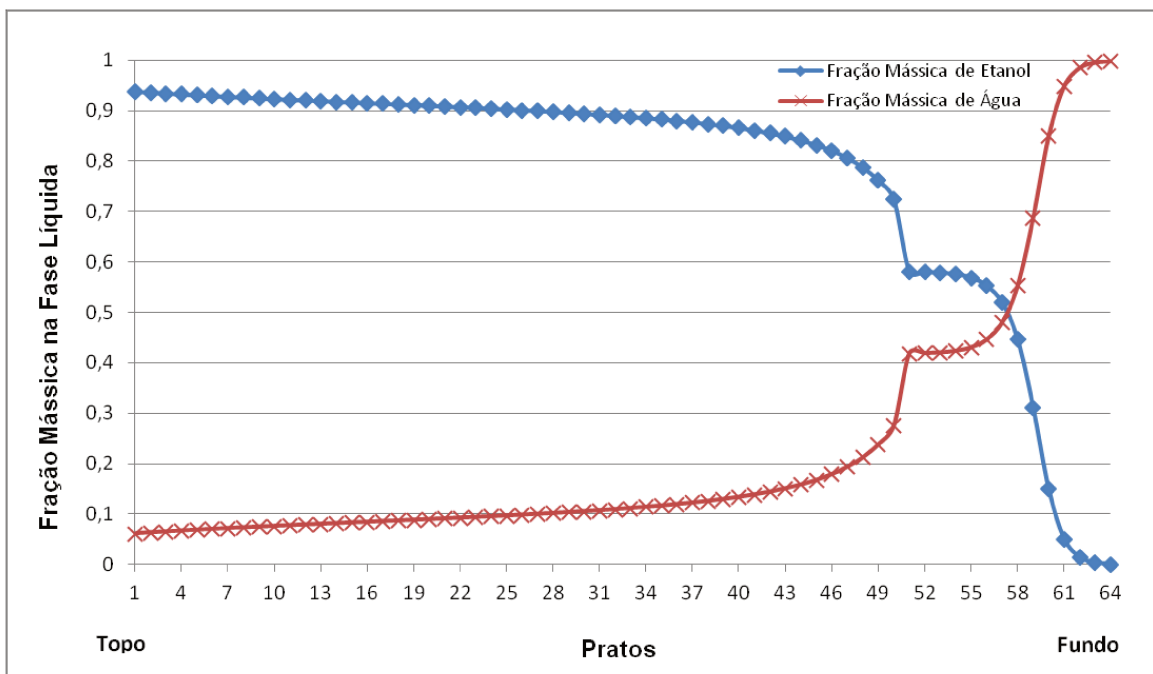


Figura 4.10 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 51

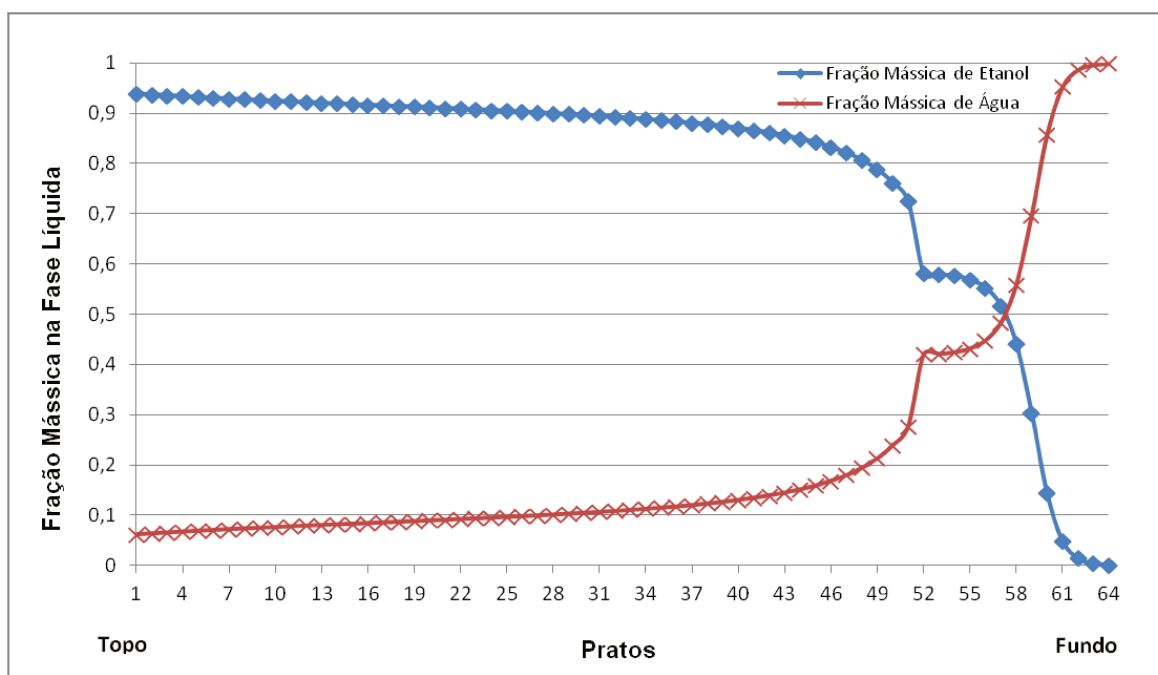


Figura 4.11 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 52

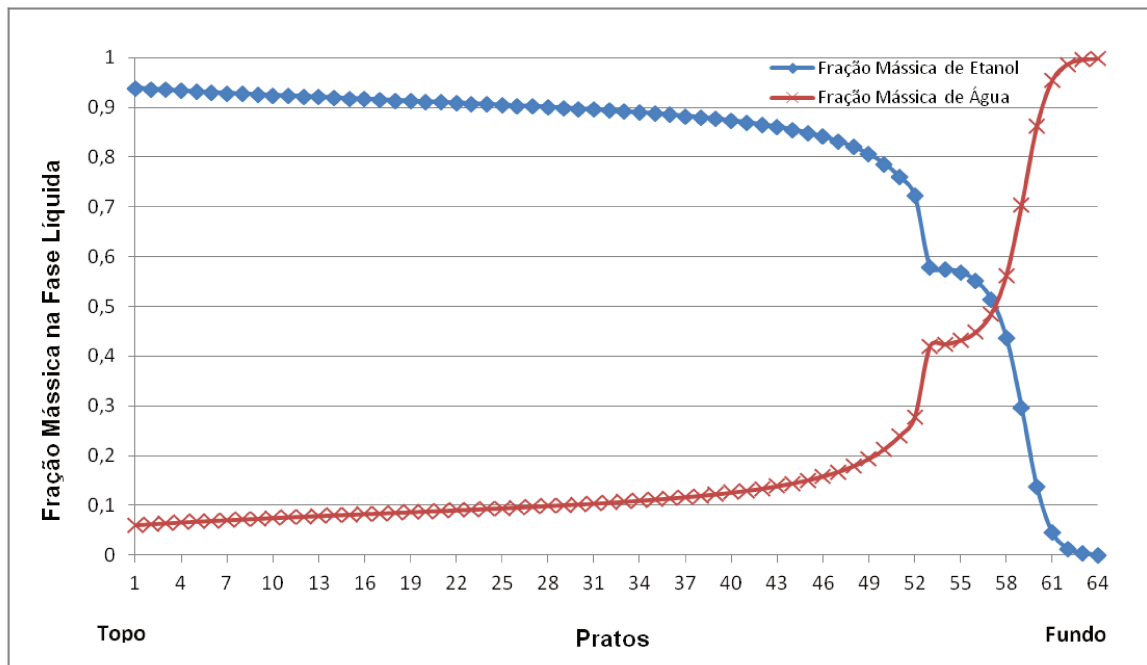


Figura 4.12 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 53



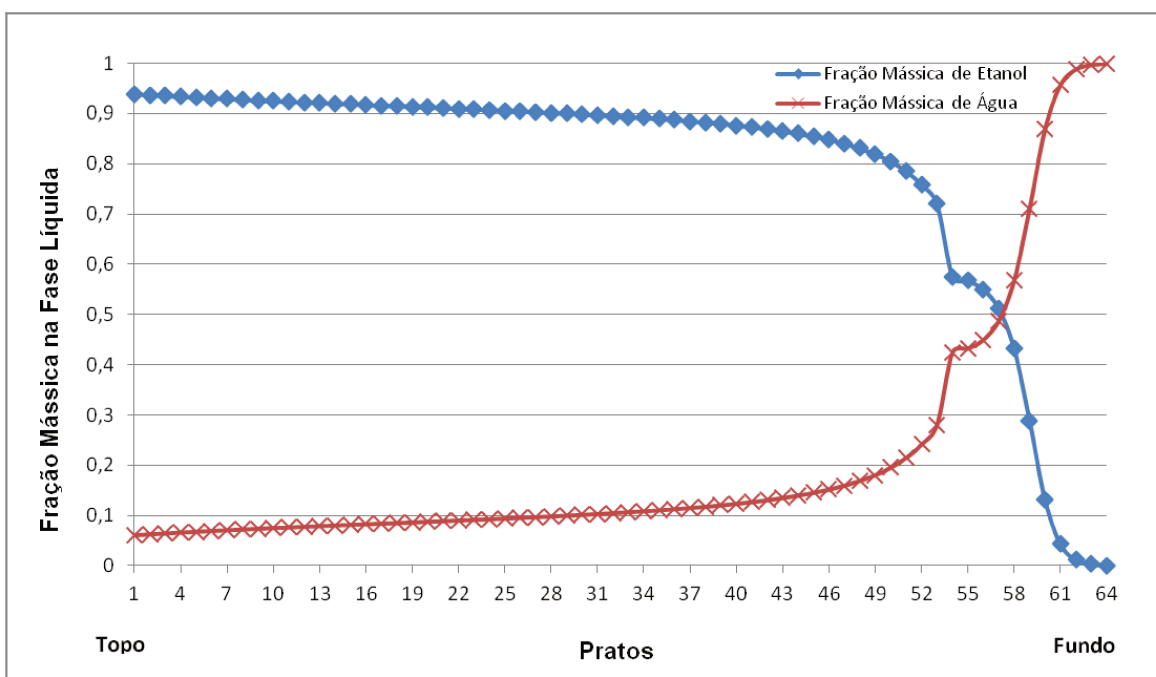


Figura 4.13 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 54

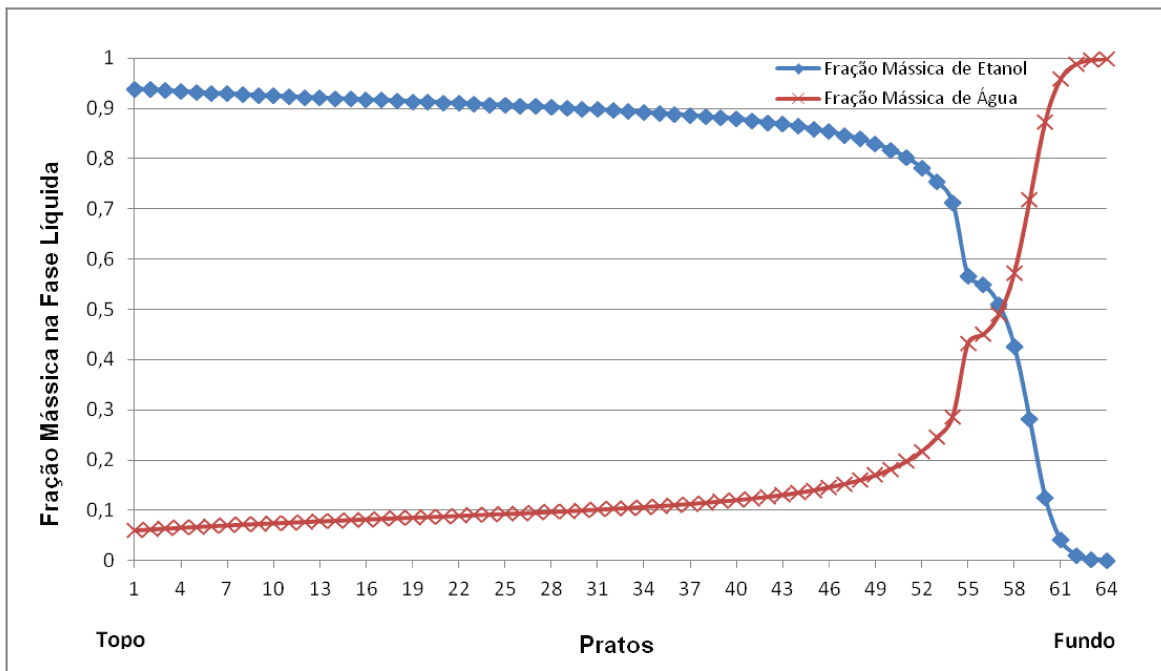


Figura 4.14 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 55

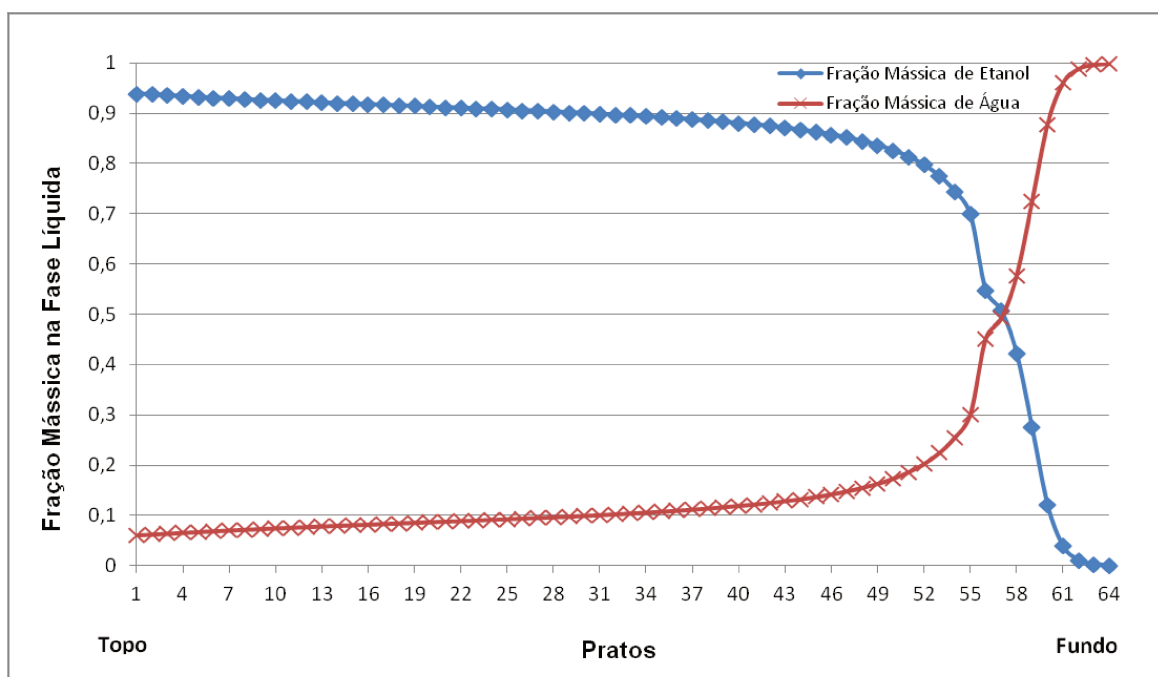


Figura 4.15 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 56

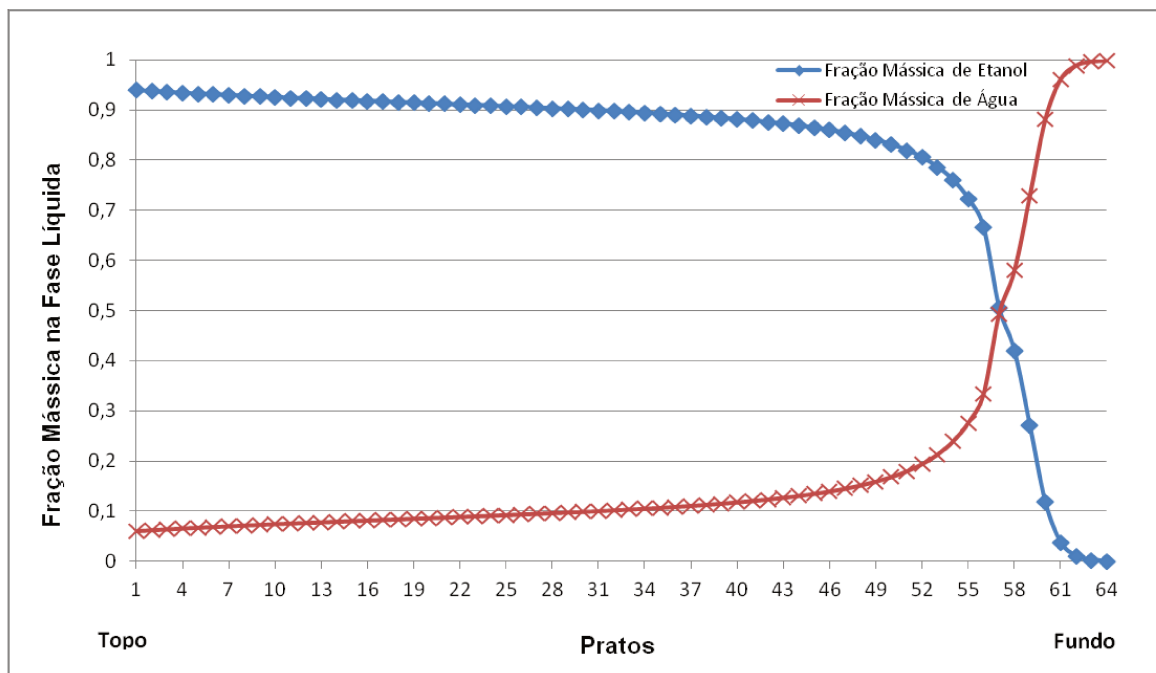


Figura 4.16 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 57

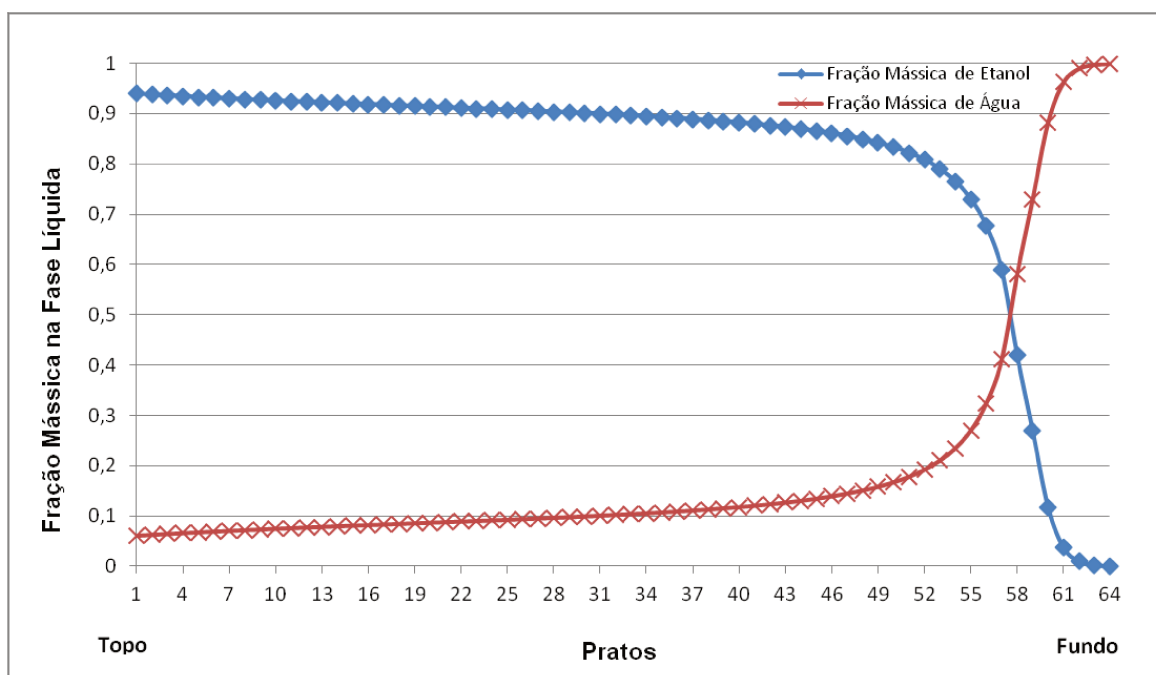


Figura 4.17 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 58

Segue Tabela 4.6 que demonstra a variação da posição de alimentação e a concentração de bioetanol no topo em cada simulação:

Tabela 4.6 – Concentração de bioetanol no topo pela variação do prato de alimentação

Posição de Alimentação	Concentração Mássica de Bioetanol no Topo
47	0,93804
48	0,93821
49	0,93838
50	0,93853
51	0,93868
52	0,93882
53	0,93896
54	0,93908
55	0,93919
56	0,93927
57	0,93933
58	0,93935

Dessa forma, é possível concluir que a posição de alimentação ideal para esta simulação seria no prato 58 por dois motivos:

- Nesta condição de alimentação obtém-se a maior concentração de bioetanol no topo, considerando as mesmas condições de processo.
- No prato 58 é o local onde a composição em fração mássica da corrente de entrada, isto é, bioetanol igual 0,45 e água igual a 0,55 mais se aproxima da composição em fração mássica na região do prato 58. Segue abaixo a Tabela 4.7 que representa a composição dos componentes em cada prato considerado.

Tabela 4.7 – Composição em fração Mássica de Bioetanol e água nos pratos

Prato	Bioetanol	Água
56	0,67616	0,32384
57	0,58926	0,41074
58	0,41919	0,58081
59	0,26999	0,73001
60	0,11767	0,88233

Portanto, quando a composição da corrente de entrada não é semelhante a composição do prato, ocorre uma perturbação no equilíbrio termodinâmico e, conseqüentemente, uma diminuição da eficiência de separação.

#### 4.3.1.2 Variação do número de pratos calotados

A análise da variação do número de pratos consiste em manter o diâmetro de 3800 mm, localizar a posição de alimentação ótima e verificar quantos pratos são necessários para atingir a concentração mássica mínima de 93,8% no topo da coluna. Segue abaixo os resultados nas Tabelas 4.8 e 4.9:

Tabela 4.8 – Perfil geral das correntes (variação do número de pratos calotados)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,22	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,33	19018,67	0
<i>Água</i>	23320	53363,67	1256,33	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00115	0,93804	0
<i>Água</i>	0,55	0,99885	0,06196	1

Tabela 4.9 - Resultados da variação do número de pratos calotados

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Número de Pratos</i>	54
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	3800
<i>Prato de Alimentação</i>	49

Segue a Figura 4.18 que demonstra o gráfico da fração mássica dos componentes na fase líquida pelo número de pratos.

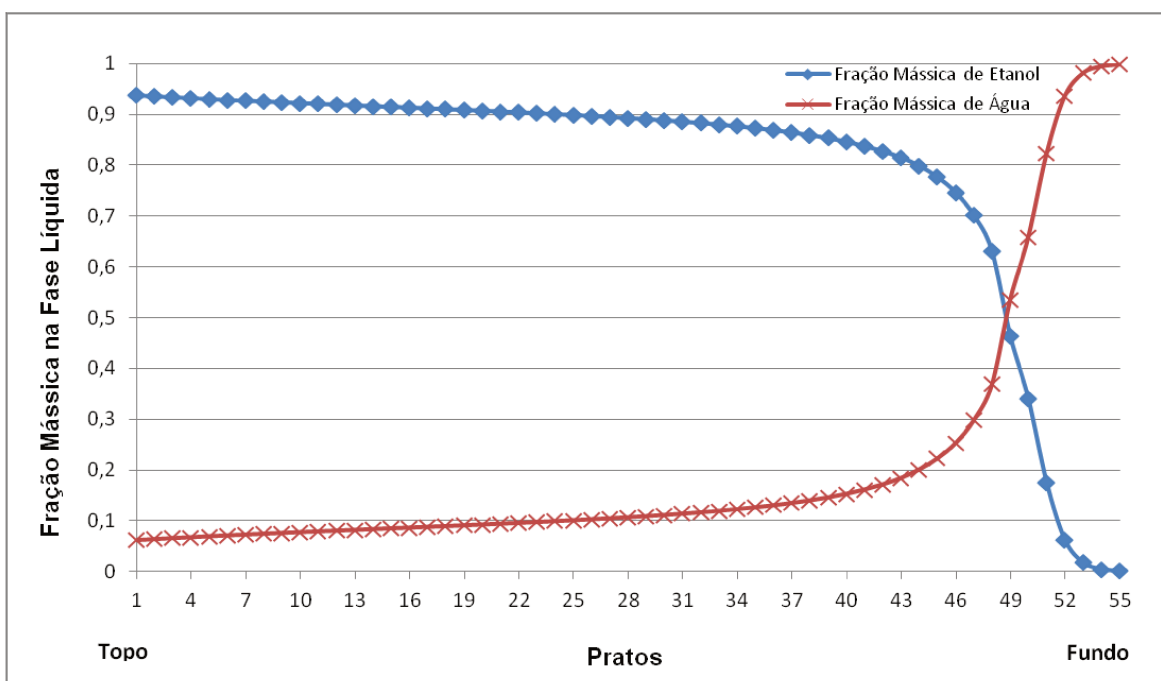


Figura 4.18 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 49

A Tabela 4.10 demonstra que o prato que possui a composição em fração mássica mais próxima da composição da alimentação é o prato 49. Portanto, este é o prato ótimo de alimentação.

Tabela 4.10 - Resultados da composição de bioetanol e água nos pratos calotados

Prato	Bioetanol	Água
47	0,70192	0,29808
48	0,63101	0,36899
49	0,46423	0,53577
50	0,34073	0,65927
51	0,17644	0,82356

A Figura 4.19 representa o gráfico da porcentagem de inundação pelo número de pratos:

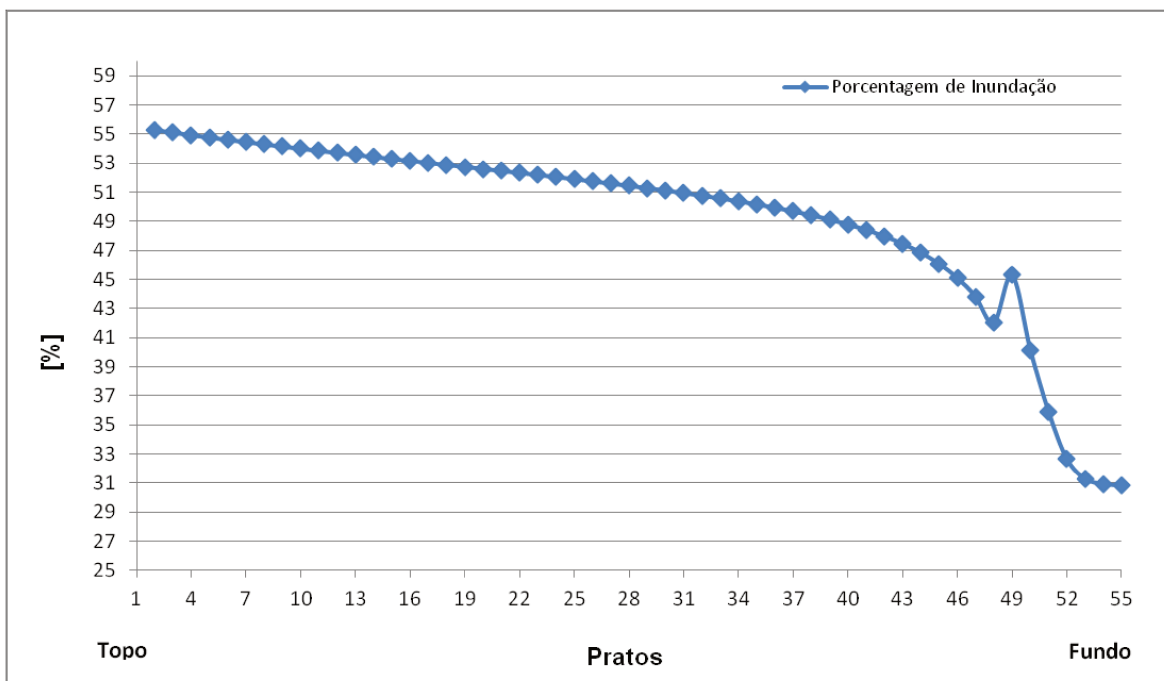


Figura 4.19 – Porcentagem de Inundação em Cada Prato Calotado

Foi possível verificar que a porcentagem de inundação está abaixo da porcentagem de inundação ideal que seria em torno de 80%.

Dessa forma, quando foi alterada a posição de alimentação até atingir a posição de alimentação ótima, foi possível reduzir o número de pratos de 63 para 54, mantendo-se o diâmetro da coluna em 3800 mm.

#### 4.3.1.3. Coluna otimizada: variação do diâmetro e número de pratos calotados

Os resultados apresentados a seguir estão baseados em uma coluna com a alimentação na posição ótima, com a porcentagem de inundação máxima recomendada de 80% e o número de pratos o suficiente para atingir a fração mássica mínima de 0,938 de bioetanol na corrente de topo. Segue abaixo os resultados da coluna otimizada nas Tabelas 4.11 e 4.12:

Tabela 4.11 – Perfil geral das correntes (coluna otimizada com pratos calotados)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,23	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,52	19018,48	0
<i>Água</i>	23320	53363,48	1256,52	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00115	0,93803	0
<i>Água</i>	0,55	0,99885	0,06197	1

Tabela 4.12 - Resultados da coluna otimizada com pratos calotados

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Número de Pratos</i>	50
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	3048
<i>Prato de Alimentação</i>	46

Para confirmar a escolha da posição de alimentação ótima, segue abaixo o gráfico na Figura 4.20 da fração mássica dos componentes na fase líquida pelo número de pratos



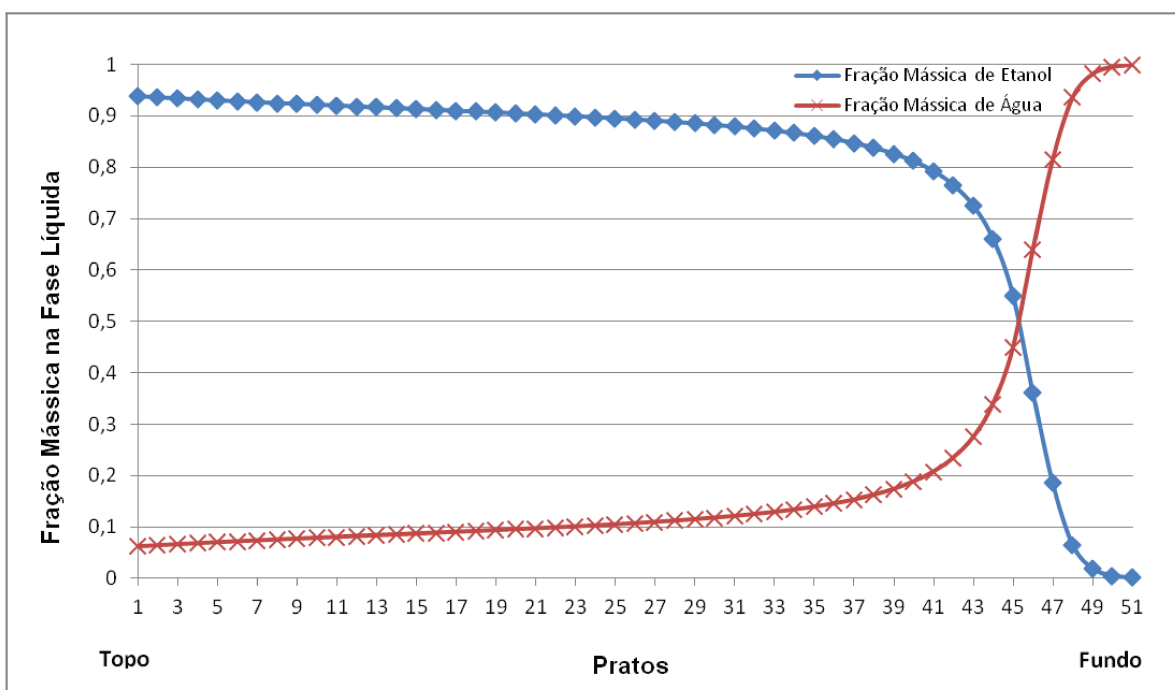


Figura 4.20 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 46

A Tabela 4.13 demonstra que o prato que possui a composição que mais se aproxima com a composição da carga é o prato 46. Portanto este é o prato ótimo de alimentação com uma coluna de 50 pratos.

Tabela 4.13 - Resultados da composição em fração mássica e água nos pratos calotados

Prato	Bioetanol	Água
44	0,66067	0,33933
45	0,55037	0,44963
46	0,36157	0,63843
47	0,18503	0,81497
48	0,06459	0,93541

### 4.3.2. Coluna de destilação com pratos valvulados

#### 4.3.2.1. Comparação com a simulação da coluna convencional

Com o objetivo de estabelecer uma comparação com a coluna de destilação convencional de pratos calotados, também foram realizadas simulações com a configuração de 63 pratos valvulados, diâmetro de 3800 mm e posição de alimentação no prato 47. Segue abaixo os resultados e análises das simulações com pratos valvulados, que serão apresentados pelos seguintes parâmetros:

- Perfil geral das correntes;
- Perfil de temperatura do líquido, do vapor e na interface;
- Análise da Porcentagem de inundação no prato;
- Análise da perda de carga nos pratos;
- Posição de alimentação;

#### Perfil geral das correntes (Pratos Valvulados)

Segue abaixo na Tabela 4.14 o perfil das correntes de entrada e de vapor que serão valores fixos e as correntes de fundo e de topo que são calculadas.

Tabela 4.14 – Perfil geral das correntes (comparação com a Coluna convencional)

Variáveis	Entrada	Fundo	Topo	Vapor
<b>Temperatura [°C]</b>	91	109,26	81,63	127
<b>Pressão [bar a]</b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b>Vazão Mássica [kg/h]</b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	44,75	19035,25	0
<i>Água</i>	23320	53380,25	1239,75	31300
<b>Fração Mássica</b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00084	0,93885	0
<i>Água</i>	0,55	0,99916	0,06115	1

Se compararmos a fração mássica de bioetanol no topo da coluna de destilação com pratos calotados com a coluna de pratos valvulados, considerando

que elas possuem as mesmas dimensões e posições de alimentação, a fração mássica de bioetanol no topo obtida com pratos valvulados é 0,93885 e a fração mássica obtida com pratos calotados é 0,93804.

### Perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface (Pratos Valvulados)

O gráfico do perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface está representada pela Figura 4.1

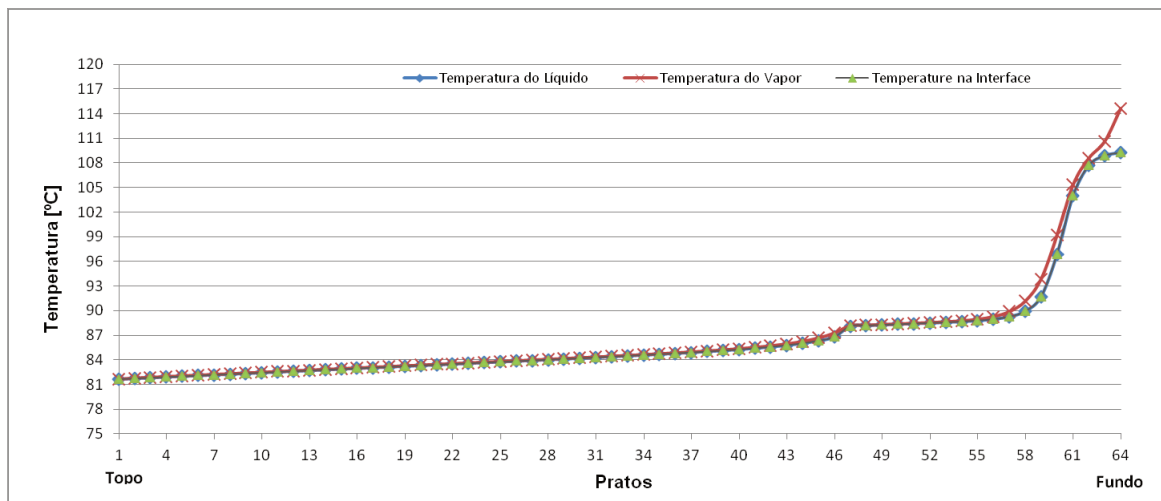


Figura 4.21 – Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com 63 pratos valvulados

A partir do prato de alimentação 47 também ocorre um aumento de temperatura. De acordo com o perfil de temperatura da coluna, a temperatura no prato 47 deveria ser próxima de 87 °C, mas como a alimentação de toda a carga está próxima de 91 °C, a temperatura do prato 47 se eleva para 88 °C.

### Análise da Porcentagem de inundação (Pratos Valvulados)

Dessa forma, segue a análise na Figura 4.22 que representa a porcentagem de inundação da coluna de destilação convencional com pratos valvulados e diâmetro de 3800 mm.

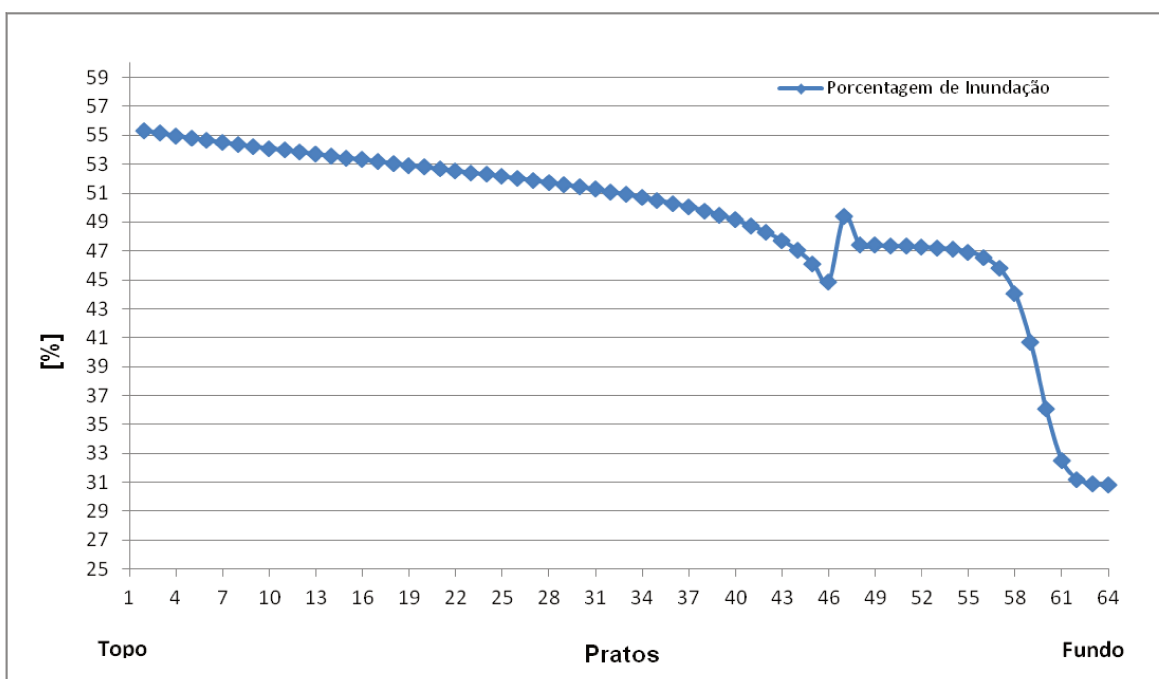


Figura 4.22 – Porcentagem de inundação em cada prato valvulado.

É possível perceber que a porcentagem de inundação máxima da coluna com diâmetro de 3800 mm está próxima de 55%. Dessa forma, podemos dizer que a coluna está com porcentagem de inundação muito abaixo da recomendada de 80%.

### **Análise da perda de carga (Pratos Valvulados)**

Sabe-se que a perda de carga total de um prato é a soma da perda de carga seca (depende da configuração do prato) e a perda de carga do líquido, que é uma função da taxa de líquido e a altura do vertedouro. Portanto, segue a perda de carga em cada pratos valvulados considerando o diâmetro da coluna de 3800 mm.

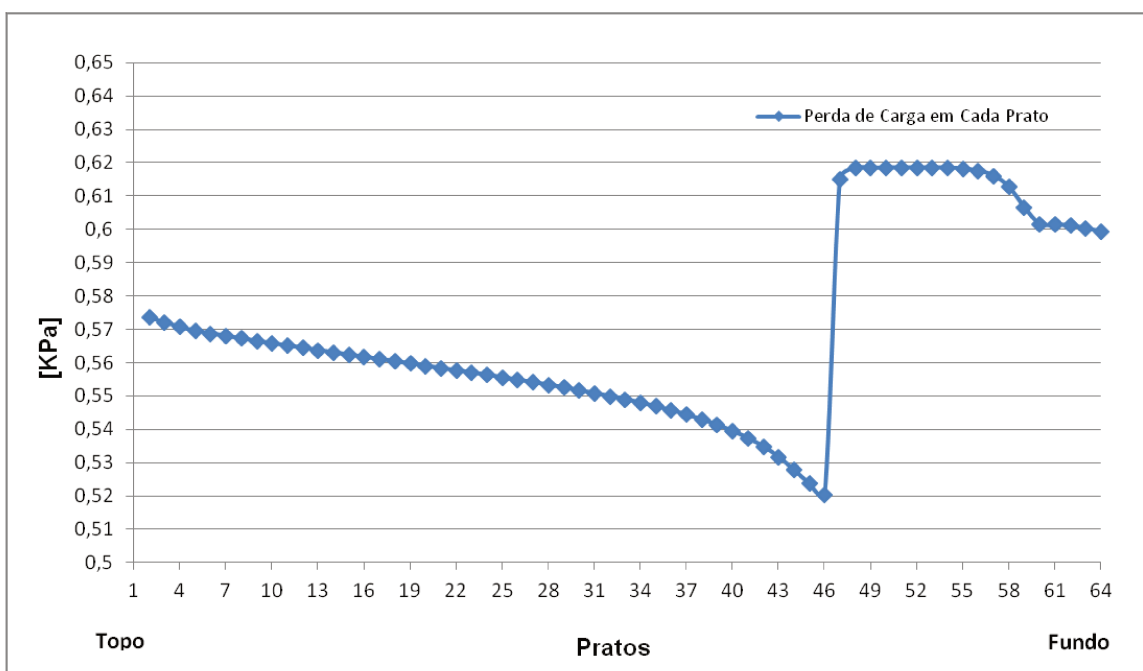


Figura 4.23 – Perda de carga em cada prato valvulado.

Pode-se perceber que a partir do prato de alimentação a perda de carga aumenta, passando de um valor de 0,520 KPa para 0,615 KPa. A perda de carga do prato 47 até pratos seguintes ficam estagnados no patamar próximo de 0,615 KPa até iniciarem a tendência de declínio novamente.

### Posição de Alimentação (Pratos Valvulados)

Segue a Figura 4.24 que representa um gráfico que relaciona a fração mássica dos componentes água e bioetanol na fase líquida em cada prato da coluna.

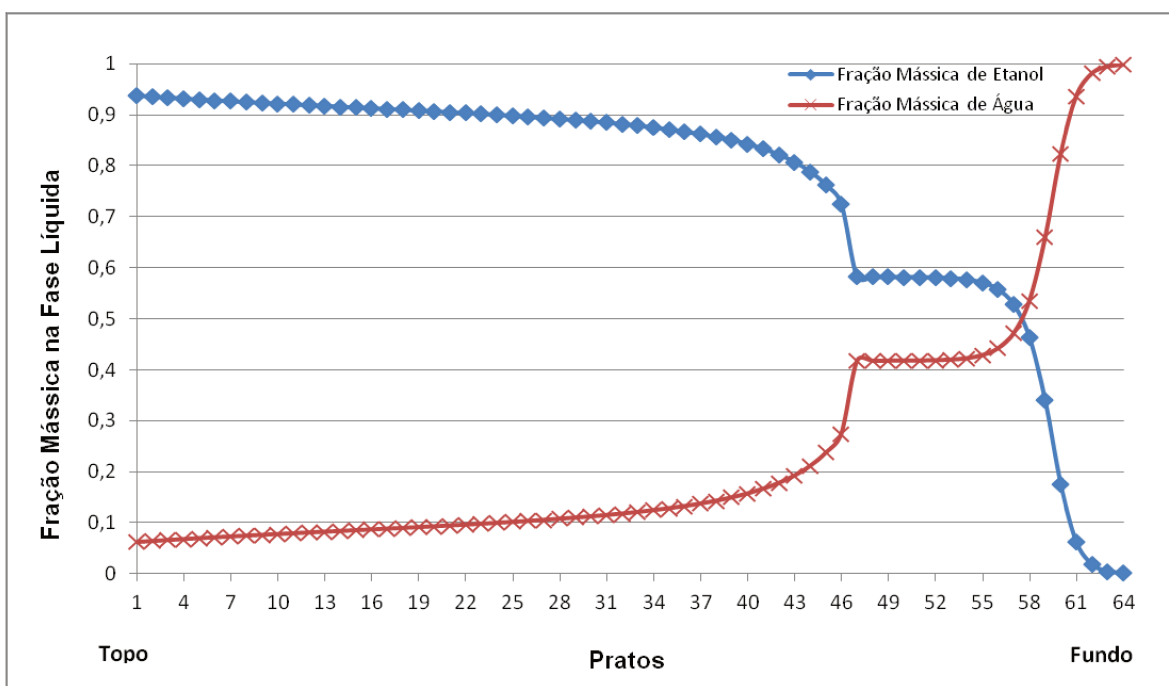


Figura 4.24 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 47

Foi considerado na simulação que a coluna de destilação convencional possui a posição de alimentação na altura do prato 47. Da mesma forma que em pratos calotados, a alimentação da coluna neste prato altera o perfil da composição de bioetanol e água.

#### 4.3.2.2. Variação da posição de alimentação (Pratos valvulados)

De forma bem semelhante a avaliação da influência da posição de alimentação para pratos calotados, segue abaixo uma sequencia de gráficos que representam as simulações da variação da posição de alimentação. Os gráficos demonstram a fração mássica líquida de bioetanol e água em cada prato.

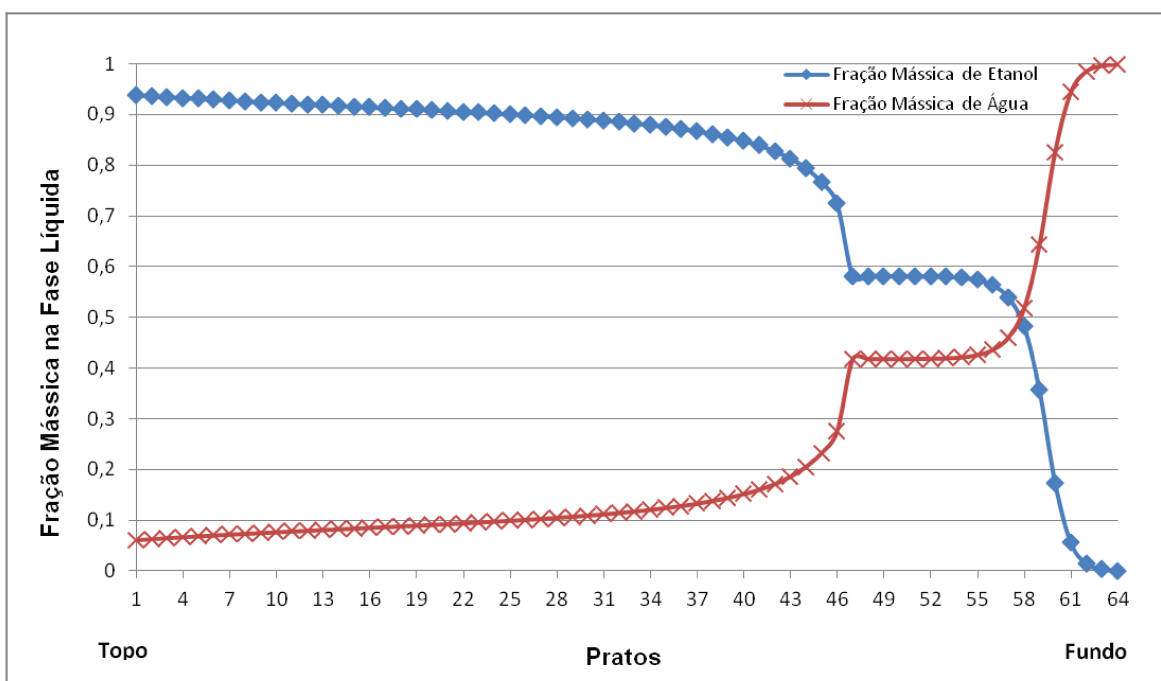


Figura 4.25 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 47

Neste gráfico é possível identificar a posição de alimentação no prato 47 pela mudança abrupta de direção das curvas. Esta é a curva da composição de bioetanol e água na fase líquida equivalente a usina convencional simulada, entretanto, utilizando pratos valvulados.

Segue abaixo uma sequência de gráficos com as respectivas posições de alimentação:

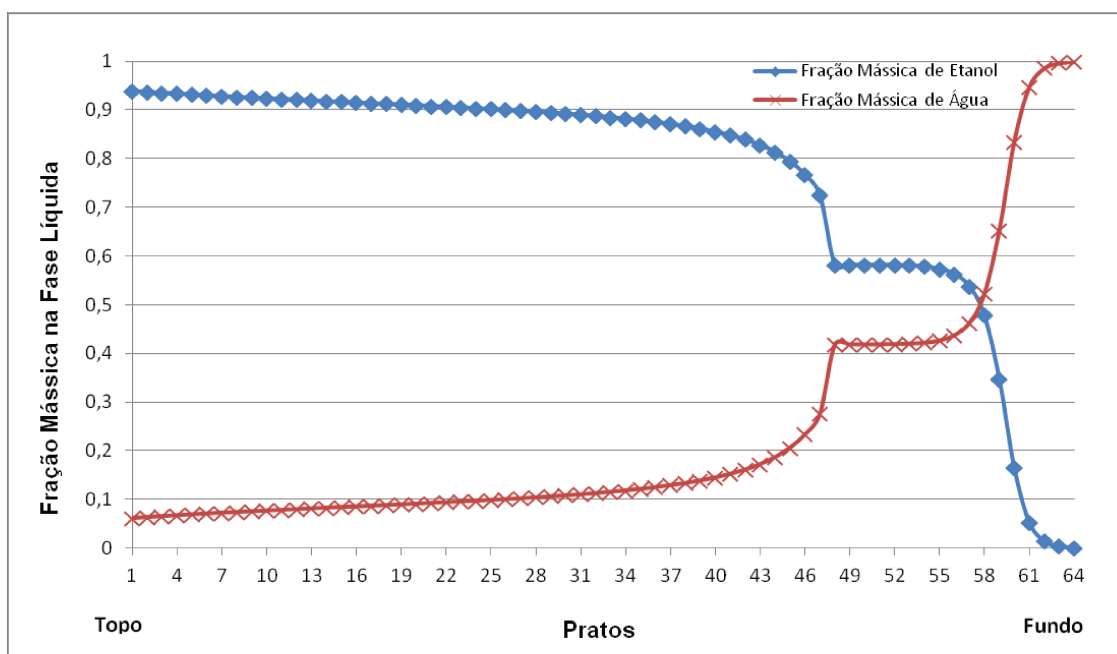


Figura 4.26 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 48

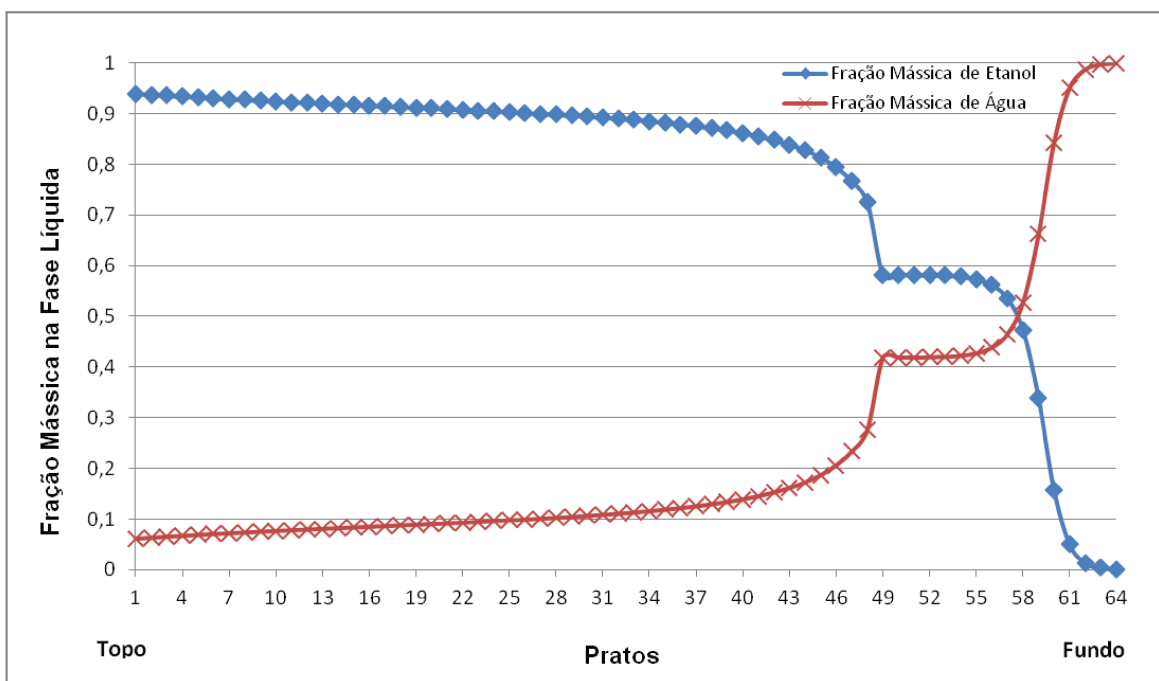


Figura 4.27 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 49



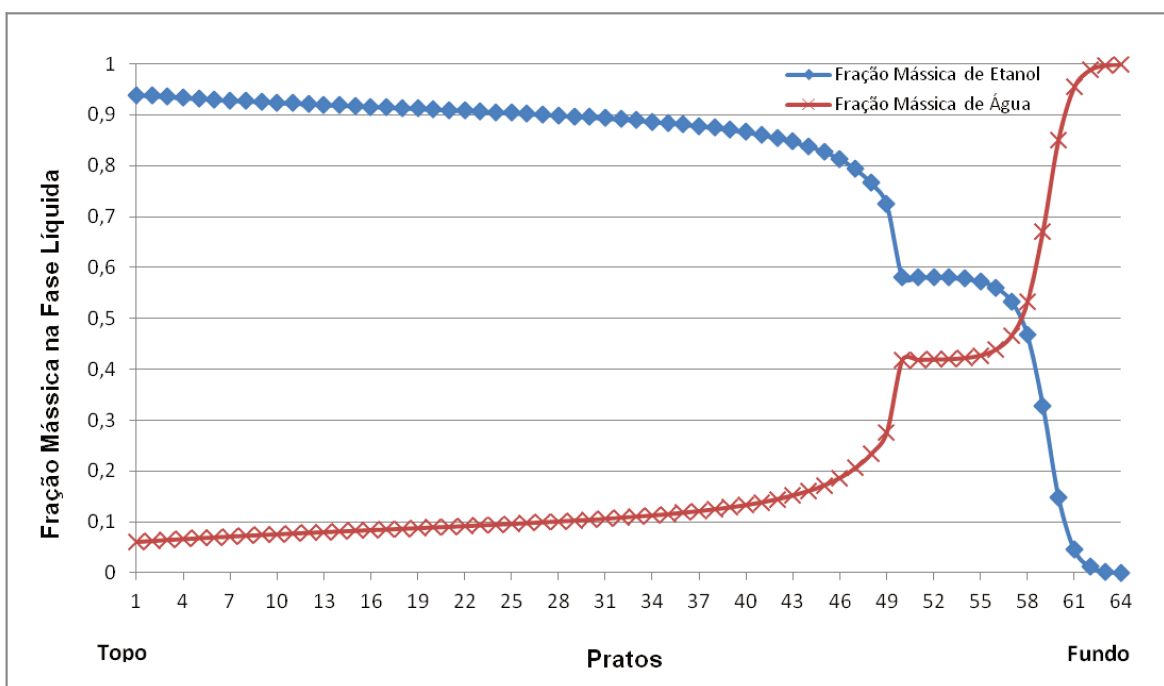


Figura 4.28 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do Número de pratos considerando a alimentação no prato 50

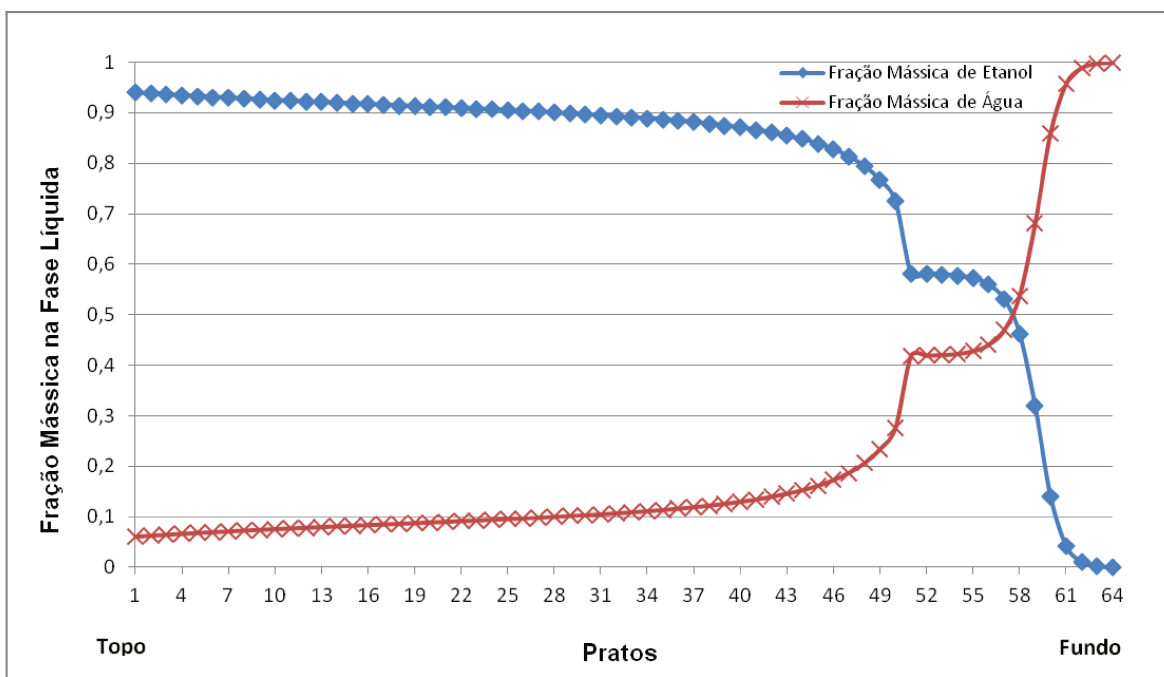


Figura 4.29 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 51

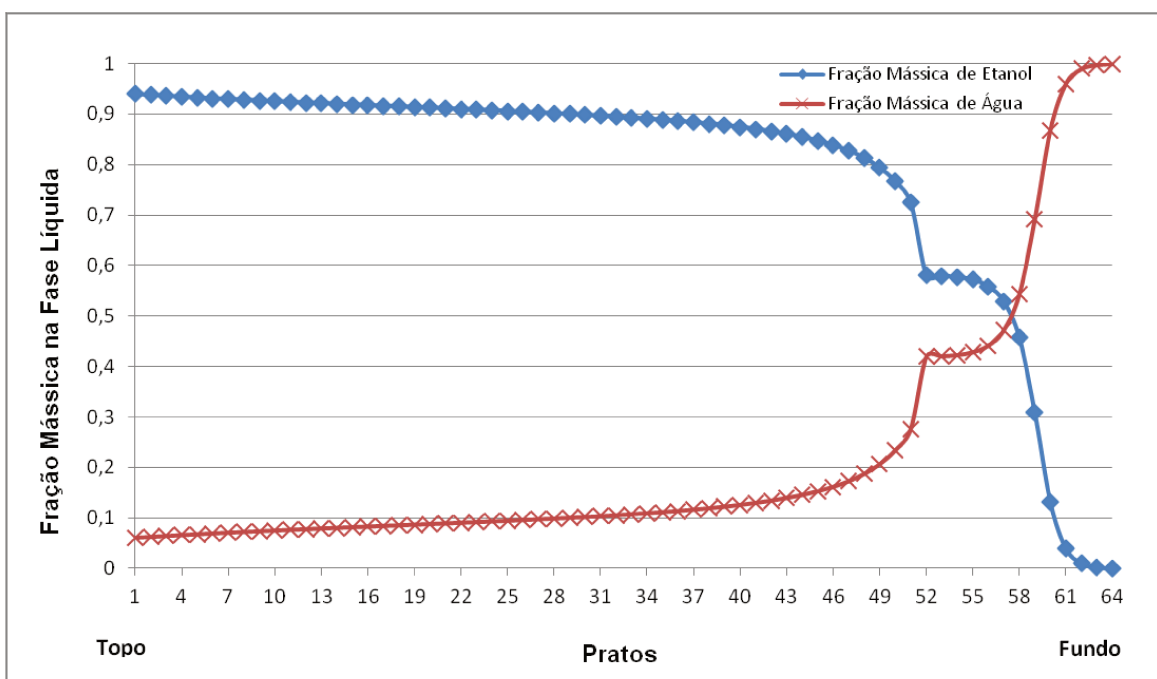


Figura 4.30 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 52

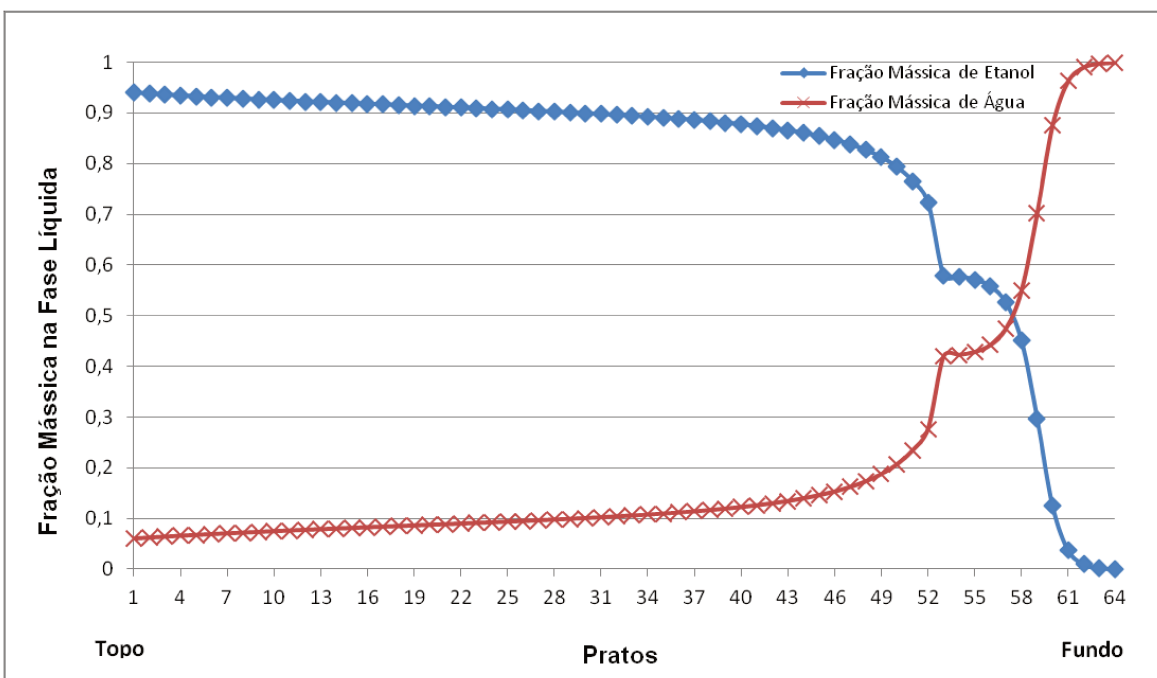


Figura 4.31 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 53

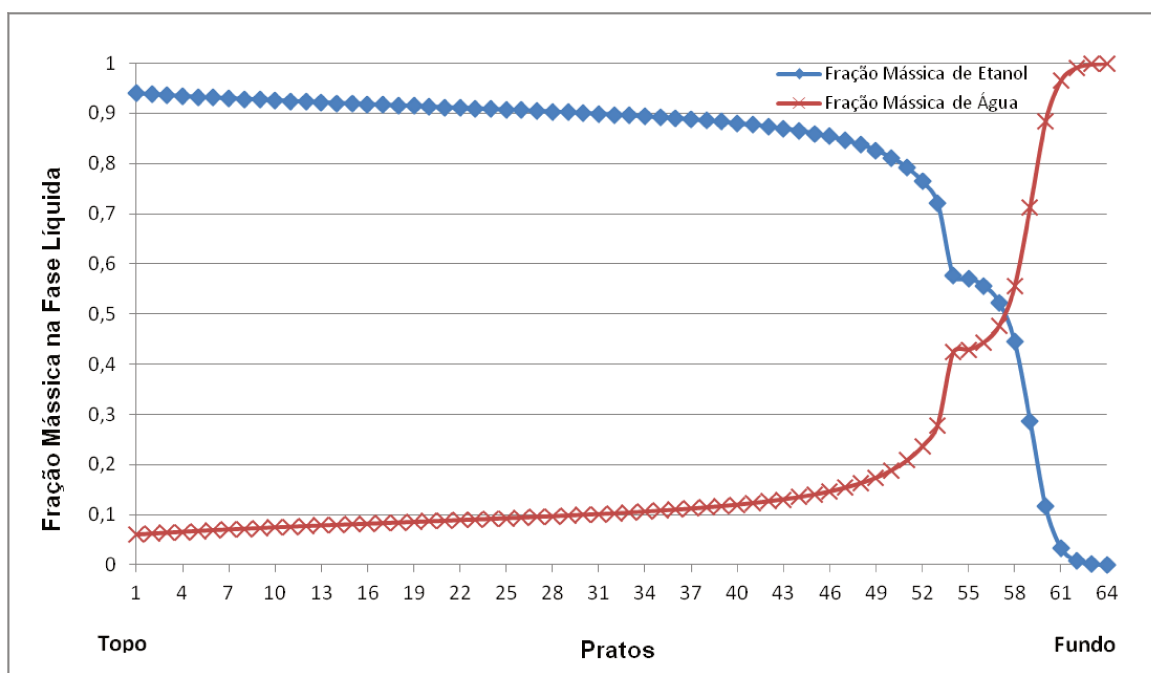


Figura 4.32 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 54

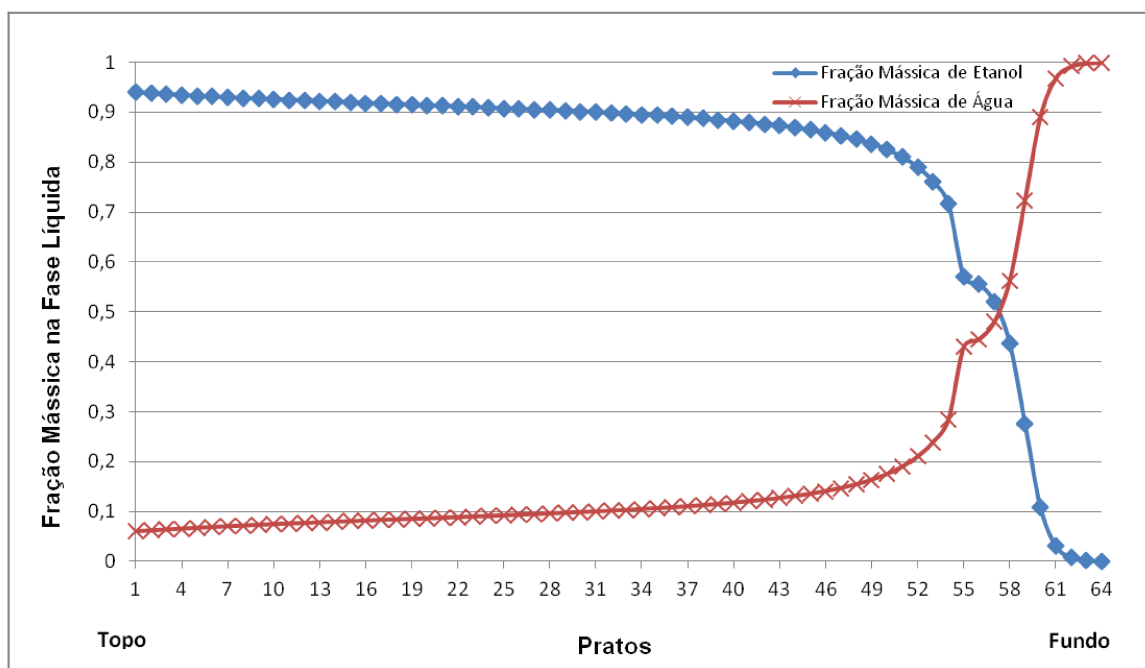


Figura 4.33 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 55

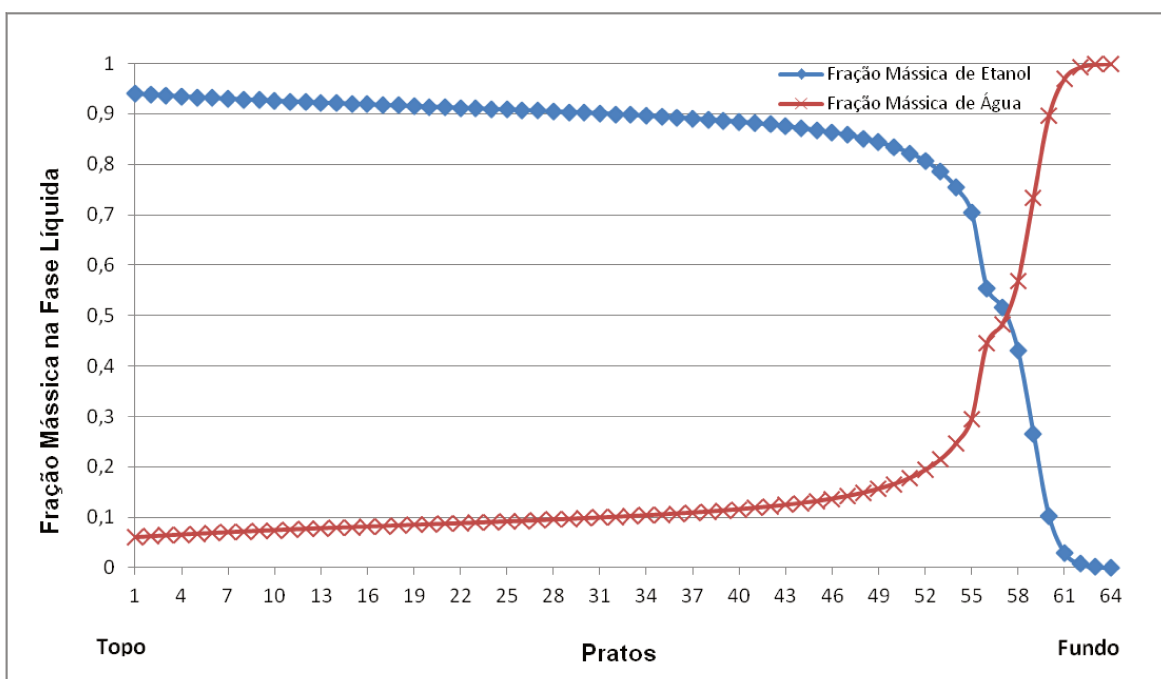


Figura 4.34 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 56

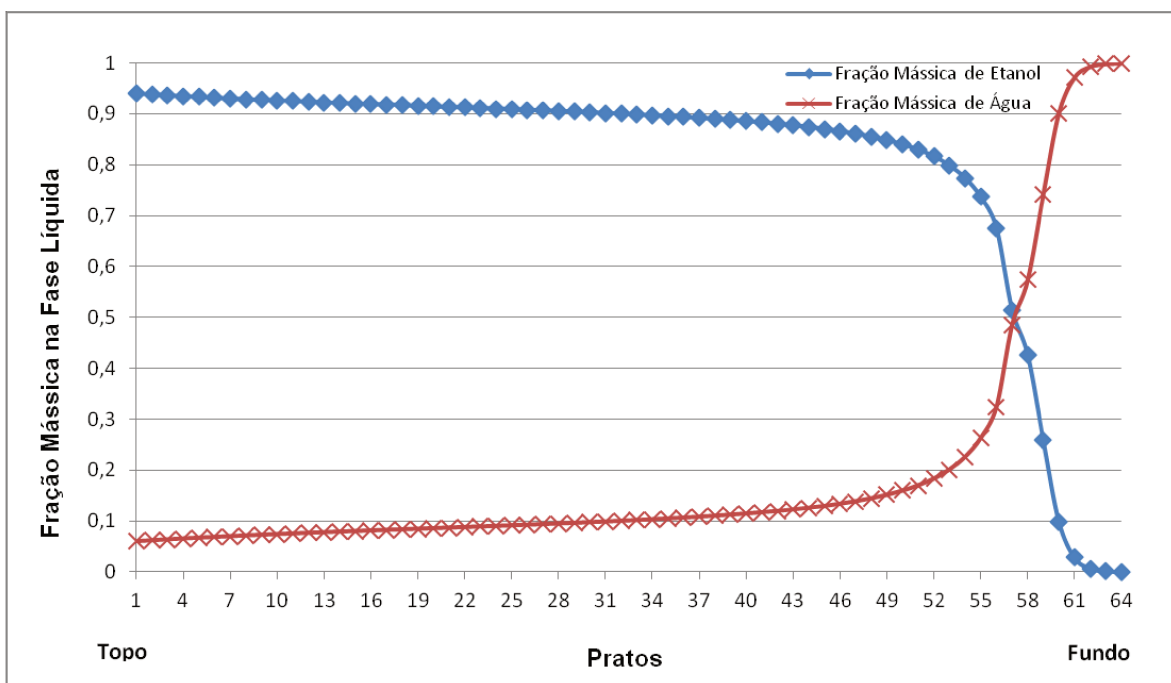


Figura 4.35 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 57

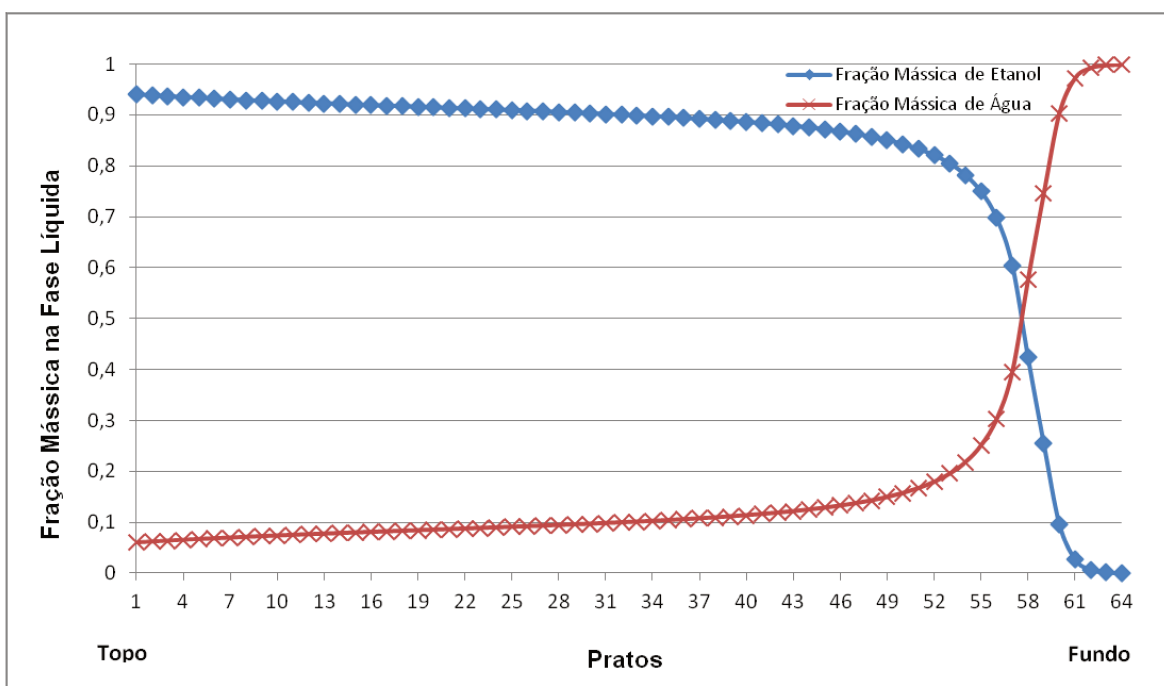


Figura 4.36 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 58

Segue a Tabela 4.15 que representa a variação da posição de alimentação e a concentração de bioetanol no topo em cada simulação:

Tabela 4.15 – Posição de alimentação pela concentração de bioetanol no Topo

Posição de Alimentação	Concentração Mássica de Bioetanol no Topo
47	0,93885
48	0,93900
49	0,93915
50	0,93928
51	0,93941
52	0,93954
53	0,93965
54	0,93976
55	0,93986
56	0,93994
57	0,94000
58	0,94003

Dessa forma, é possível concluir que, também para pratos valvulados, a posição de alimentação ideal para esta simulação seria no prato 58 por dois motivos:

- Nesta condição de alimentação obtém-se a maior concentração de bioetanol no topo, considerando as mesmas condições de processo.
- No prato 58 é o local onde a composição em fração mássica da corrente de entrada, i.e. bioetanol igual 0,45 e água igual a 0,55, mais se aproxima da composição em fração mássica na região do prato 58. Segue a Tabela 4.16 com a composição em fração mássica.

Tabela 4.16 – Composição em fração mássica nos pratos valvulados

<b>Prato</b>	<b>Bioetanol</b>	<b>Água</b>
56	0,56363	0,43637
57	0,53945	0,46055
58	0,48247	0,51753
59	0,35649	0,64351
60	0,17368	0,82632

#### **4.3.2.3. Variação do número de pratos (pratos valvulados)**

A análise da variação do número de pratos consiste em manter o diâmetro de 3800 mm, localizar a posição de alimentação ótima e verificar quantos pratos são necessários para atingir a concentração mássica mínima de 93,8% no topo da coluna. Segue abaixo os resultados nas Tabelas 4.17 e 4.18.

Tabela 4.17 – Perfil geral das correntes (variação do número de pratos valvulados)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,23	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Etanol</i>	19080	60,65	19019,35	0
<i>Água</i>	23320	53364,35	1255,65	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Etanol</i>	0,45	0,00114	0,93807	0
<i>Água</i>	0,55	0,99886	0,06193	1

Tabela 4.18 - Resultados da coluna com variação do número de pratos valvulados

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Número de Pratos</i>	<i>49</i>
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	<i>3800</i>
<i>Prato de Alimentação</i>	<i>45</i>

A Figura 4.37 mostra o gráfico da fração mássica dos componentes na fase líquida pelo número de pratos.

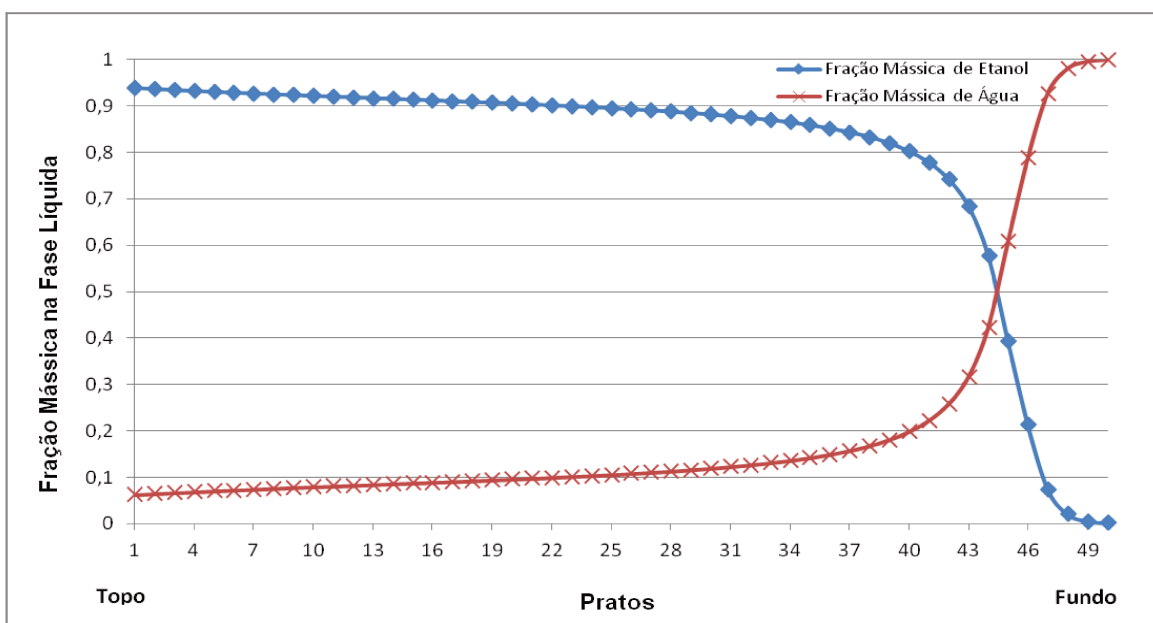


Figura 4.37 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 46

A Tabela 4.19 demonstra que o prato que possui a composição em fração mássica mais próxima da composição da alimentação é o prato 46. Portanto, este é o prato ótimo de alimentação.

Tabela 4.19 - Resultados da composição nos pratos valvulados

Composição em Fração Mássica		
Prato	Bioetanol	Água
43	0,68378	0,31622
44	0,57735	0,42265
45	0,39206	0,60794
46	0,21241	0,78759
47	0,07356	0,92644

Segue abaixo o gráfico da porcentagem de inundação pelo número de pratos representado na figura 4.38:



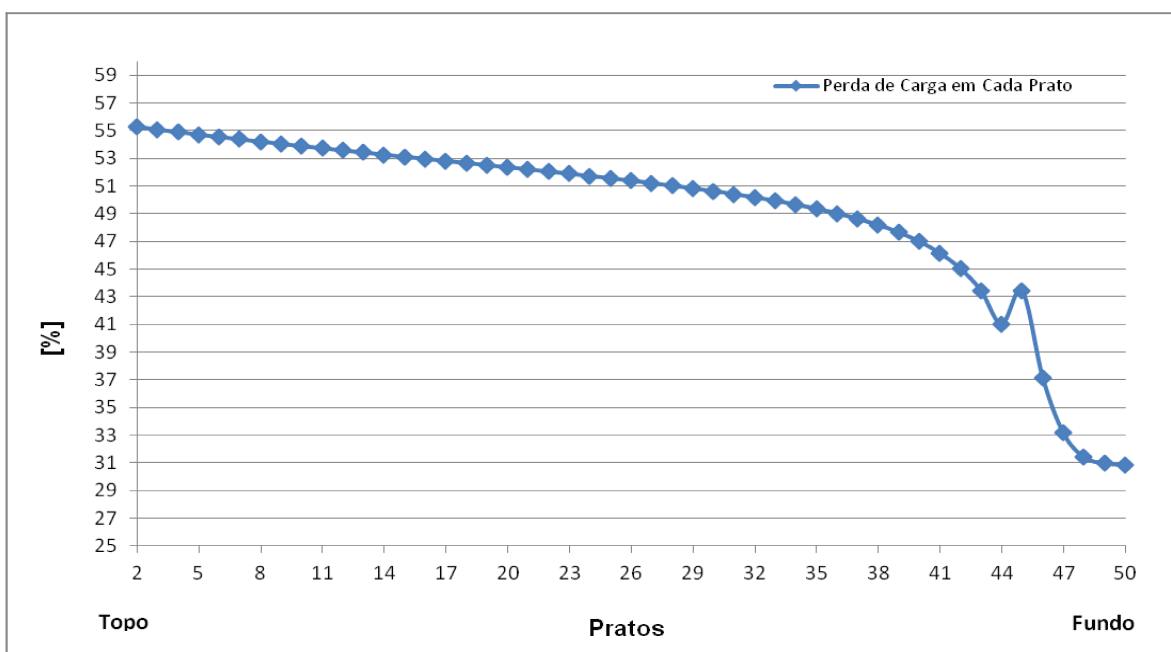


Figura 4.38 – Porcentagem de inundação em cada prato valvulado.

Foi possível verificar que a porcentagem de inundação está abaixo da porcentagem de inundação ideal que seria em torno de 80%.

Segue abaixo na Figura 4.39 a análise da perda de carga em cada prato valvulado, considerando o diâmetro da coluna de 3800 mm.

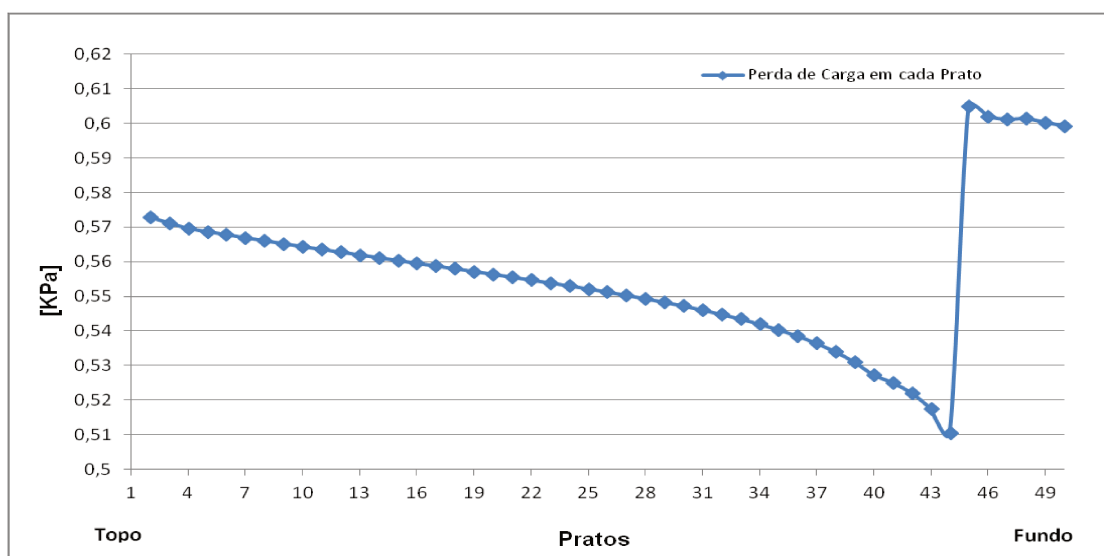


Figura 4.39 – Perda de carga em cada prato valvulado.

Nesta avaliação da variação do número de pratos valvulados e identificação da posição de alimentação ótima, foi verificado que a quantidade

mínima necessária para atingir a fração mássica mínima de bioetanol na corrente de topo 0,938 foi de 49 pratos e a posição de alimentação ótima corresponde ao prato 45. Portanto, ao se identificar a posição de alimentação ideal, foi possível reduzir o número de pratos de 63 para 49, mantendo-se o diâmetro da coluna em 3800 mm.

#### 4.3.2.4. Coluna otimizada: variação do diâmetro e número de pratos valvulados

Os resultados apresentados a seguir estão baseados em uma coluna com a alimentação na posição ótima, com a porcentagem de inundação máxima recomendada de 80% e o número de pratos o suficiente para atingir a fração mássica mínima de 0,938 de bioetanol na corrente de topo. Segue na Tabela 4.20 e 4.21 os resultados da coluna com pratos valvulados otimizada:

Tabela 4.20 – Perfil geral das correntes (coluna otimizada com pratos valvulados)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,23	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,24	19018,76	0
<i>Água</i>	23320	53363,76	1256,24	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00115	0,93804	0
<i>Água</i>	0,55	0,99885	0,06196	1

Tabela 4.21 - Resultados da coluna otimizada com pratos valvulados

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Número de Pratos</i>	49
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	3048
<i>Prato de Alimentação</i>	45

Para confirmar a posição de alimentação ótima, segue a figura 4.40 referente ao gráfico da fração mássica dos componentes na fase líquida pelo número de pratos

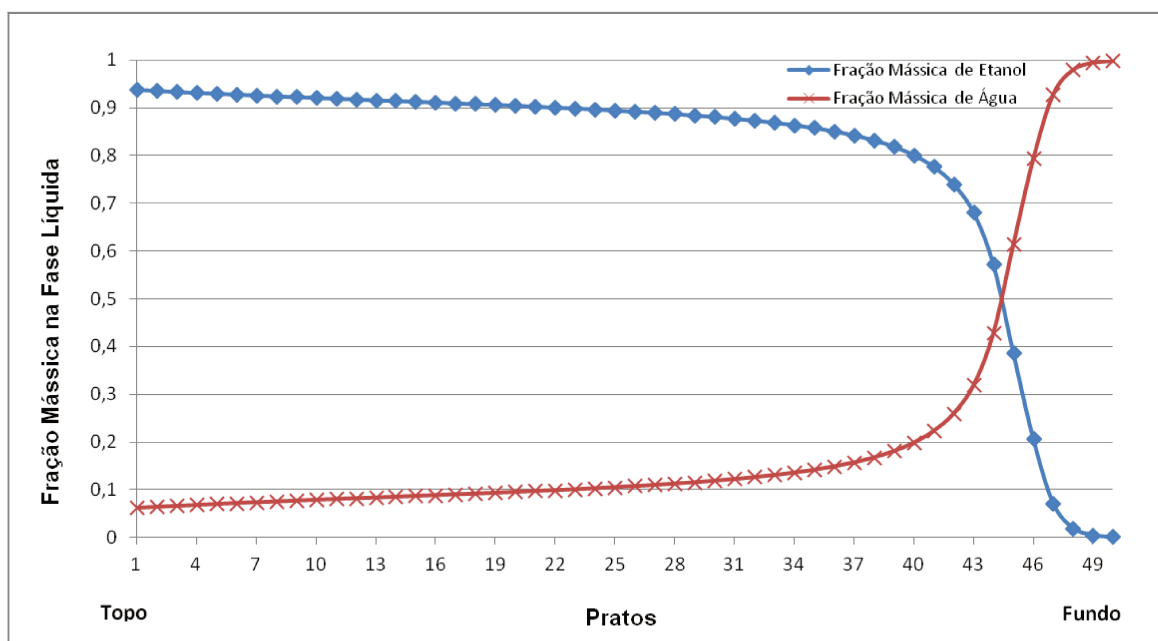


Figura 4.40 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função do número de pratos considerando a alimentação no prato 45

A Tabela 4.22 demonstra que o prato que possui a composição que mais se aproxima com a composição da carga é o prato 45. Portanto este é o prato ótimo de alimentação com uma coluna de 50 pratos.

Tabela 4.22 - Resultados da composição nos pratos valvulados

<b>Composição em Fração Mássica</b>		
<b>Prato</b>	<b>Bioetanol</b>	<b>Água</b>
43	0,68378	0,31622
44	0,57735	0,42265
45	0,39206	0,60794
46	0,21241	0,78759
47	0,07356	0,92644

A partir destes resultados foi possível perceber com a diminuição do diâmetro da coluna a partir da premissa da porcentagem de inundação ideal em colunas com pratos não influenciou na diminuição do número de pratos e no aumento da fração mássica de bioetanol no topo.

#### **4.3.3. Coluna de destilação com recheios randômicos**

Pela dificuldade em se estabelecer uma comparação entre uma coluna de destilação convencional de pratos calotados e a simulação com uma coluna de recheios randômicos, foram realizadas duas simulações distintas: A primeira simulação considerando o diâmetro de 3800 mm, isto é, diâmetro equivalente a uma coluna convencional, e a segunda considerando o diâmetro otimizado calculado pela porcentagem de inundação máxima de 80%. Em ambos os casos já está sendo considerada a posição de alimentação ótima.

##### **4.3.3.1. Simulação da coluna com o diâmetro de 3800 mm**

Nesta simulação da coluna de destilação com recheios randômicos foi analisada e considerada a posição ótima de alimentação e o diâmetro fixo da coluna em 3800 mm. segue abaixo os resultados e análises dos seguintes parâmetros da coluna:

- Perfil geral das correntes;
- Perfil de temperatura do líquido, do vapor e na interface;
- Análise da Porcentagem de inundação no prato;
- Análise da perda de carga nos pratos;
- Posição de alimentação;

### Perfil geral das correntes (Recheios Randômicos)

Segue na Figura 4.23 o perfil das correntes de entrada e de vapor que serão valores fixos e as correntes de fundo e de topo que são calculadas.

Tabela 4.23 – Perfil geral das correntes (coluna de 3800 mm de diâmetro com recheios randômicos)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,23	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,50	19018,50	0
<i>Água</i>	23320	53363,50	1256,50	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00115	0,93803	0
<i>Água</i>	0,55	0,99885	0,06197	1

Tabela 4.24 - Resultados da coluna de 3800mm de diâmetro com recheios randômicos

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Altura de Recheio [m]</i>	<i>27,405</i>
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	<i>3800</i>
<i>Altura da Alimentação [m]</i>	<i>24,360</i>

Para posicionar a altura da alimentação deve-se considerar o topo da coluna como altura 0 e o fundo da coluna como 27405 mm.

### Perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface (Recheios Randômicos)

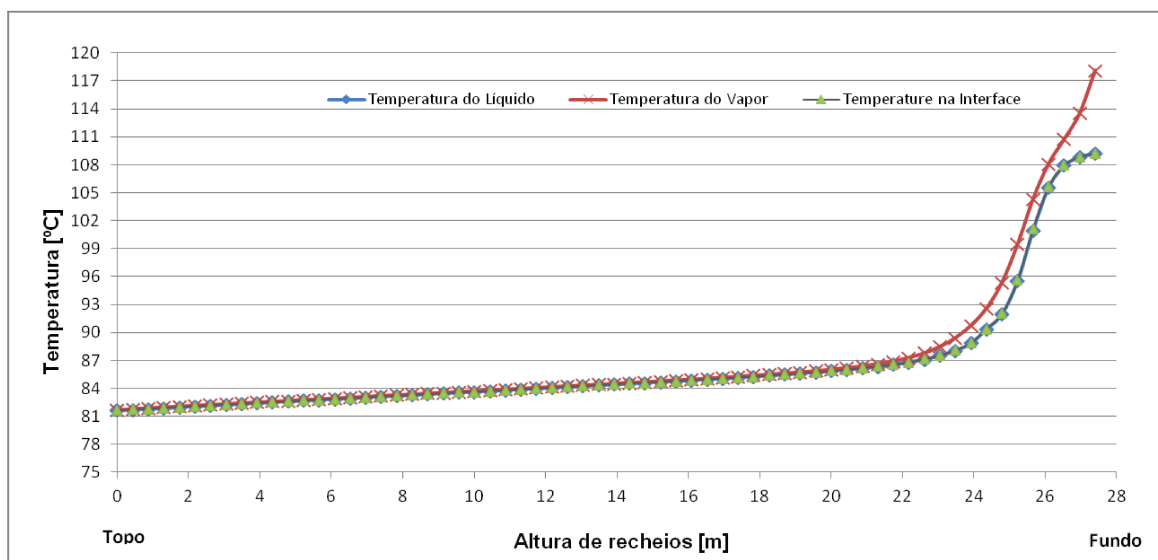


Figura 4.41– Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios randômicos

Na coluna com recheios randômicos é possível perceber claramente pela Figura 4.41 que a temperatura da fase vapor aumenta em relação as temperaturas da fase líquida e na que a fase vapor controla a transferência de calor no sistema na região mais próxima interface.

### Análise da Porcentagem de inundação (Recheios Randômicos)

Segue na Figura 4.42 a análise da porcentagem de inundação da coluna de destilação com recheios e diâmetro de 3800 mm.

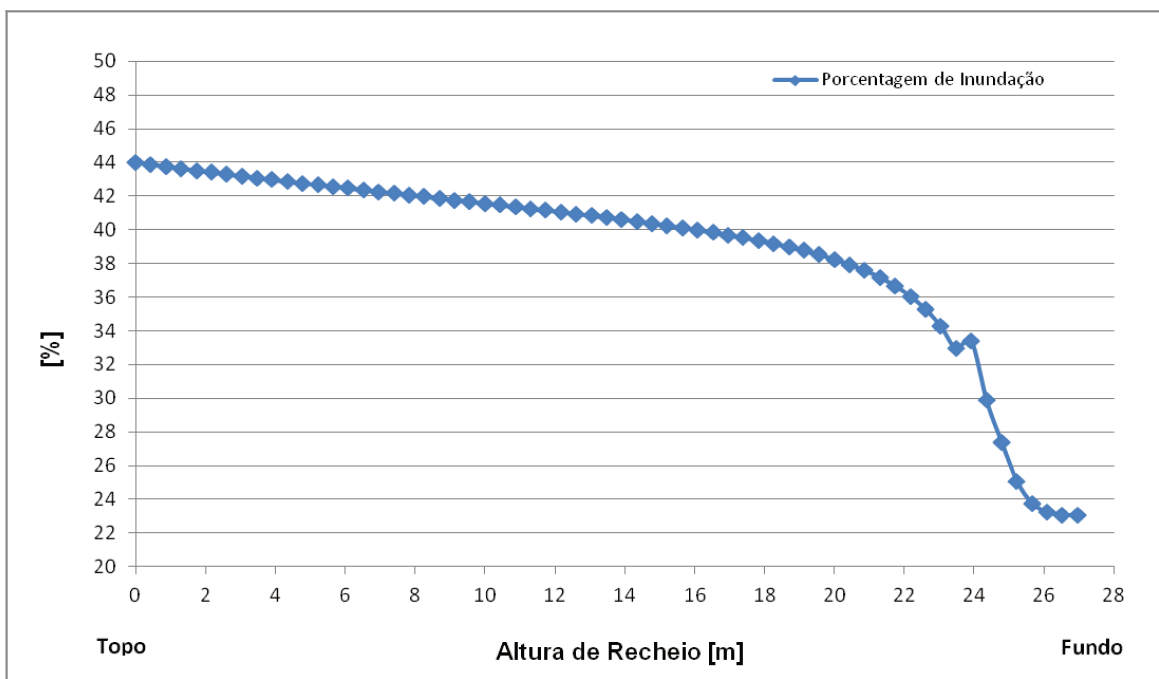


Figura 4.42 – Porcentagem de inundação pela altura de recheio.

É possível perceber que a porcentagem de inundação máxima da coluna com diâmetro de 3800 mm está próxima de 44%. Dessa forma, podemos dizer que a coluna está com porcentagem de inundação muito abaixo da recomendada de 80%. Comparando com colunas de pratos calotados, o efeito da elevação da perda de carga na posição de alimentação é menor na coluna com recheios randômicos. Em relação a porcentagem de inundação máxima para o diâmetro de 3800 mm, a coluna com IMTP 40 simulada possui 44,02% contra 55,29% com pratos calotados.

### **Análise da perda de carga (Recheios Randômicos)**

Sabe-se que a perda de carga total colunas com recheios é a soma da perda de carga seca (depende do tipo de recheio) e a perda de carga dinâmica, que é uma função do atrito e do holdup no recheio. Dessa forma, segue na Figura 4.43 a perda de carga na região correspondente a altura de recheio, considerando o diâmetro da coluna de 3800 mm.

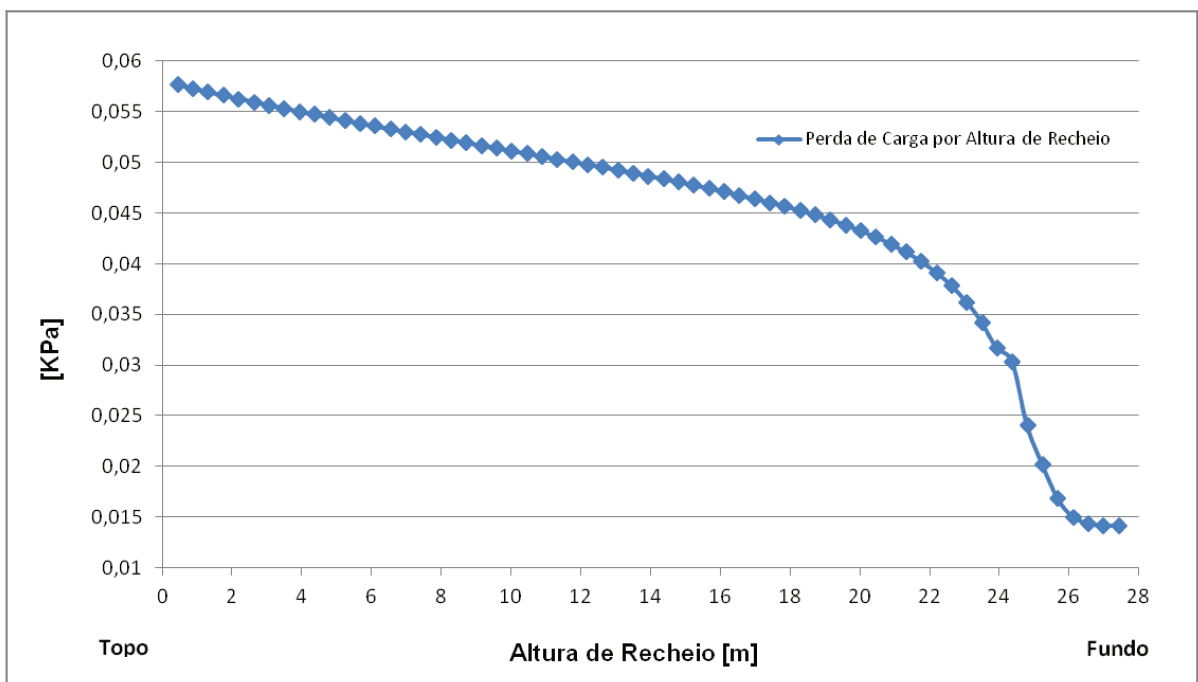


Figura 4.43 – Perda de carga em Cada Prato por altura de recheio randômico.

É possível perceber que a mudança da perda de carga na posição de alimentação é muito pequena se compararmos com colunas de pratos calotados. Os valores das perdas de carga para recheios randômicos são da ordem de 0,05 KPa, em contrapartida, a perda de carga em pratos calotados é da ordem de 0,5 KPa, isto é, perda de carga de aproximadamente 10 vezes maior.

### Posição de Alimentação (Recheios Randômicos)

Segue abaixo um gráfico na Figura 4.44 que relaciona a fração mássica dos componentes água e bioetanol na fase líquida pela altura de recheio. Foi considerada a posição ótima de alimentação.



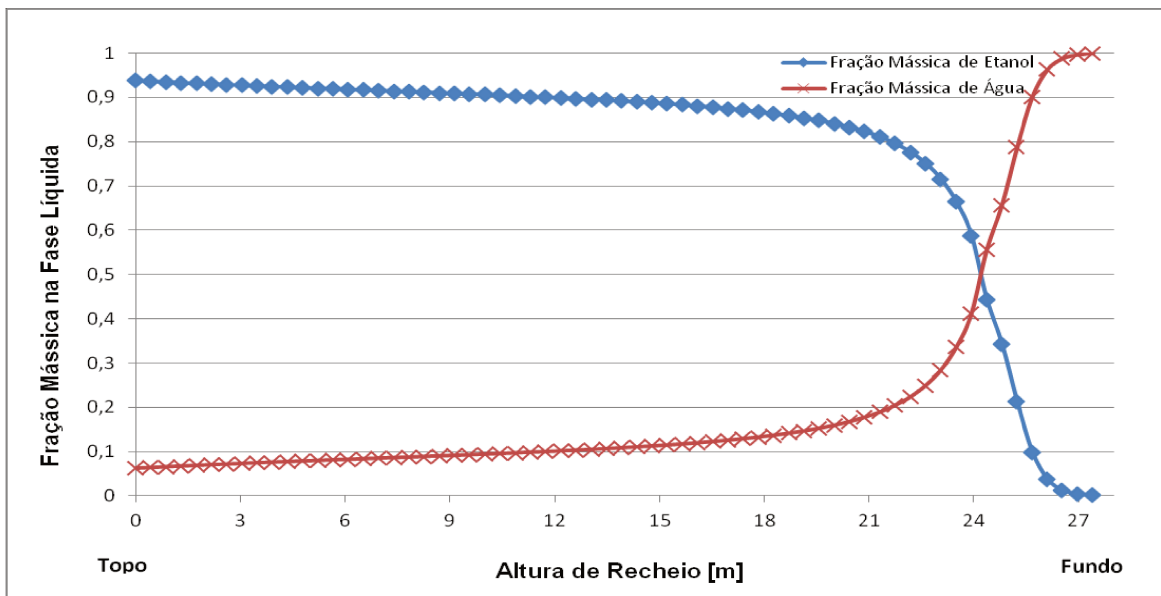


Figura 4.44 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função da altura de recheio considerando a alimentação na posição 24,360m

#### 4.3.3.2. Simulação da coluna com diâmetro otimizado

Nesta simulação da coluna de destilação com recheios randômicos foi considerada a posição ótima de alimentação e a porcentagem de inundação máxima de 80% considerada na literatura. Segue abaixo os resultados e análises dos seguintes parâmetros da coluna:

- Perfil geral das correntes;
- Perfil de temperatura do líquido, do vapor e na interface;
- Análise da Porcentagem de inundação no prato;
- Análise da perda de carga nos pratos;
- Posição de alimentação;

##### Perfil geral das correntes (Recheios Randômicos)

Segue abaixo nas Tabelas 4.25 e 4.26 o perfil das correntes de entrada e de vapor que são valores fixos e as correntes de fundo e de topo que são calculadas

Tabela 4.25 – Perfil geral das correntes (coluna otimizada com recheios randômicos)

<b>Variáveis</b>	<b>Entrada</b>	<b>Fundo</b>	<b>Topo</b>	<b>Vapor</b>
<b><i>Temperatura [°C]</i></b>	91	109,23	81,63	127
<b><i>Pressão [bar a]</i></b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b><i>Vazão Mássica [kg/h]</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,24	19018,76	0
<i>Água</i>	23320	53363,76	1256,24	31300
<b><i>Fração Mássica</i></b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00115	0,93804	0
<i>Água</i>	0,55	0,99885	0,06196	1

Tabela 4.26 - Resultados da coluna otimizada com recheios randômicos

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Altura de Recheio [m]</i>	30,240
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	2896
<i>Altura da Alimentação [m]</i>	26,880

Para identificar a posição da a altura da alimentação deve-se considerar o topo da coluna como altura 0 e o fundo da coluna como 30240 mm.

### **Perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface (Recheios Randômicos)**

Segue abaixo a Figura 4.45 que representa o perfil de temperatura das fases na coluna com diâmetro otimizado

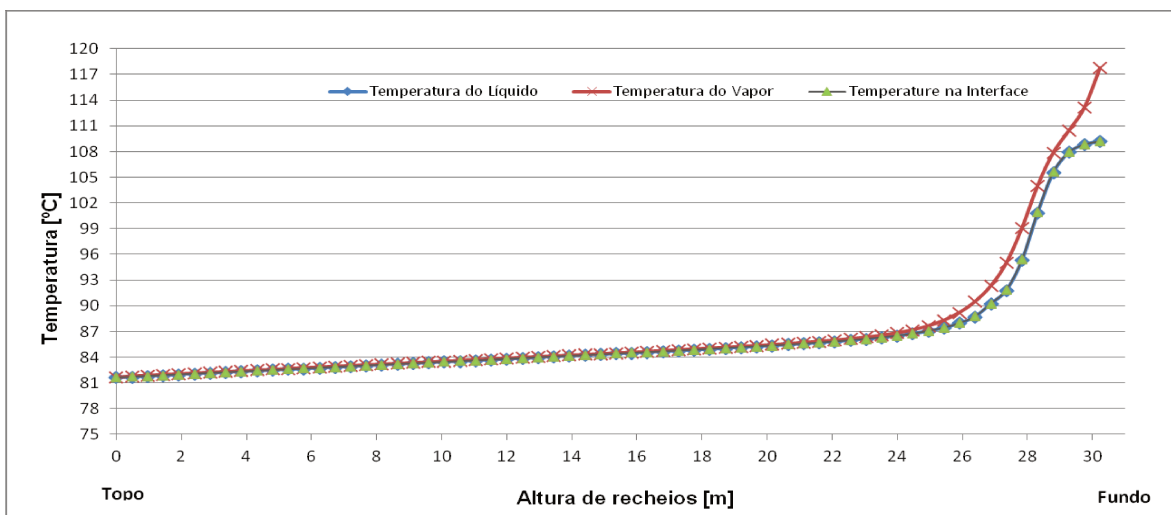


Figura 4.45 – Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios randômicos

#### Análise da Porcentagem de inundação (Recheios Randômicos)

Segue a análise da porcentagem de inundação máxima de 80% da coluna de destilação com recheios IMTP 40. O diâmetro calculado foi de 2896 mm.

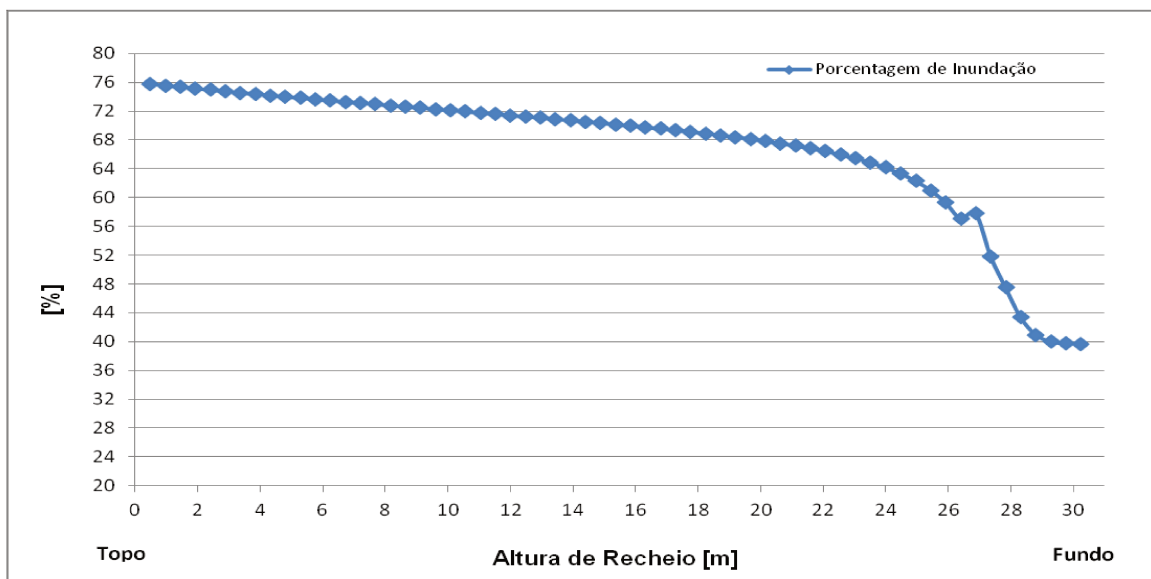


Figura 4.46 – Porcentagem de inundação pela altura e recheio.

### Análise da perda de carga (Recheios Randômicos)

A perdas de carga pela altura de recheio com coluna de diâmetro de 2896 mm estão com os valores bem maiores do que a coluna de 3800 mm. Se compararmos a perda de carga no topo da torre, no primeiro ponto, estes valores estão na ordem de 0,2387 KPa para o diâmetro de 2896 mm e 0,0577 KPa para o diâmetro de 3800 mm, isto é, a perda de carga na torre de menor diâmetro está 4,13 vezes maior. A Figura 4.47 demonstra a perda de carga por altura de recheio.

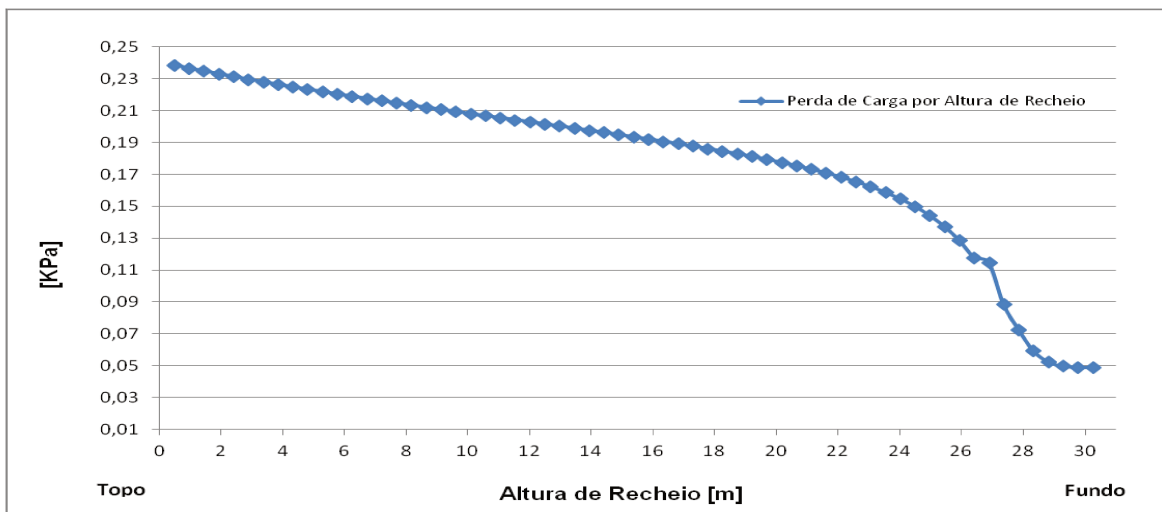


Figura 4.47 – Perda de carga por altura de recheio randômico.

### Posição de Alimentação (Recheios Randômicos)

Segue abaixo da Figura 4.48 gráfico que relaciona a fração mássica dos componentes água e bioetanol na fase líquida pela altura de recheio para confirmar a posição de alimentação ótima.

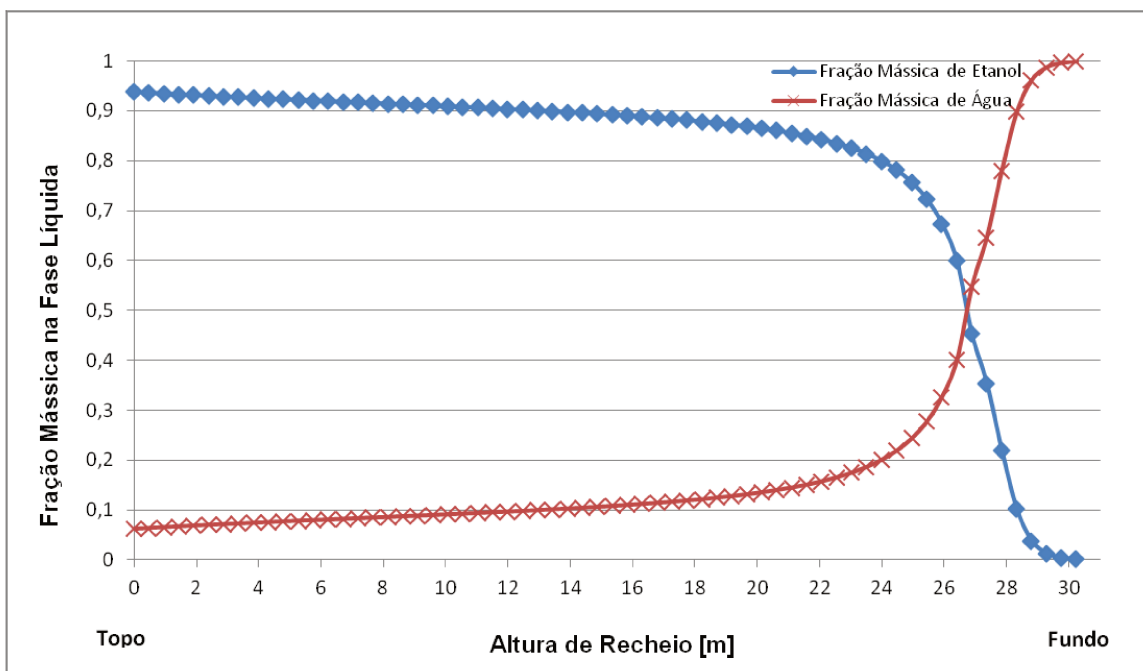


Figura 4.48 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água em função da altura de recheio considerando a alimentação na posição 26,880 m

#### 4.3.4. Coluna de destilação com recheios estruturados

Modelos fundamentais para prever perda de carga e a inundação em recheios estruturados estão muito longe de serem bem sucedidos. O arranjo regular dos canais triangulares cruzados tem seduzido muitos pesquisadores, das principais universidades, em acreditar que um progresso significativo pode ser feito através de modelos fundamentais. Como exemplos recentes, (Valluri et al., 2005) modelou o fluxo do filme líquido sobre o recheio estruturado e (Petre et al., 2003) modelou o fluxo gasoso por CFD. Nos dois casos, somente uma única fase foi considerada. A extensão deste trabalho considerando o fluxo de duas fases, de forma a permitir estimar as condições de inundação de um recheio estruturado está longe de acontecer (Lockett et al., 2006).

Devido ao fato da dificuldade em prever modelos fundamentais para inundação e perda de carga de recheios estruturados, o Aspen Plus não calcula o diâmetro da coluna baseando-se em um valor máximo de porcentagem de inundação. Portanto, foram realizadas duas simulações distintas: A primeira

simulação considerando o diâmetro de 3800 mm, isto é, diâmetro equivalente a uma coluna convencional, e a segunda considerando o diâmetro calculado pela porcentagem de inundação máxima de 80% em recheios randômicos, isto é, o valor de 2896 mm. Em ambos os casos já está sendo considerada a posição de alimentação ótima,

#### 4.3.4.1. Simulação da coluna com o diâmetro de 3800 mm

Nesta simulação da coluna de destilação com recheios estruturados modelo FLEXIPAC 1Y foi analisada e considerada a posição ótima de alimentação e o diâmetro fixo da coluna em 3800 mm. segue abaixo os resultados e análises dos seguintes parâmetros da coluna:

- Perfil geral das correntes;
- Perfil de temperatura do líquido, do vapor e na interface;
- Posição de alimentação;

##### Perfil geral das correntes (recheios estruturados)

As Tabelas 4.27 e 4.28 demonstram o perfil das correntes de entrada e de vapor que serão valores fixos e as correntes de fundo e de topo que são calculadas.

Tabela 4.27 – Perfil geral das correntes (coluna de 3800 mm com recheios estruturados)

Variáveis	Entrada	Fundo	Topo	Vapor
<b>Temperatura [°C]</b>	91	109,22	81,63	127
<b>Pressão [bar a]</b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b>Vazão Mássica [kg/h]</b>				
Bioetanol	19080	61,58	19018,42	0
Água	23320	53363,42	1256,58	31300
<b>Fração Mássica</b>				
Bioetanol	0,45	0,00115	0,93802	0
Água	0,55	0,99885	0,06198	1

Tabela 4.28 - Resultados da coluna de 3800 mm de diâmetro com recheios estruturados

<b>Características dimensionais</b>	
<i>Altura de Recheio [m]</i>	<i>11,088</i>
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	<i>3800</i>
<i>Altura da Alimentação [m]</i>	<i>10,032</i>

Para posicionar a altura da alimentação deve-se considerar o topo da coluna como altura 0 e o fundo da coluna como 11,088 m.

#### Perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface (recheios estruturados)

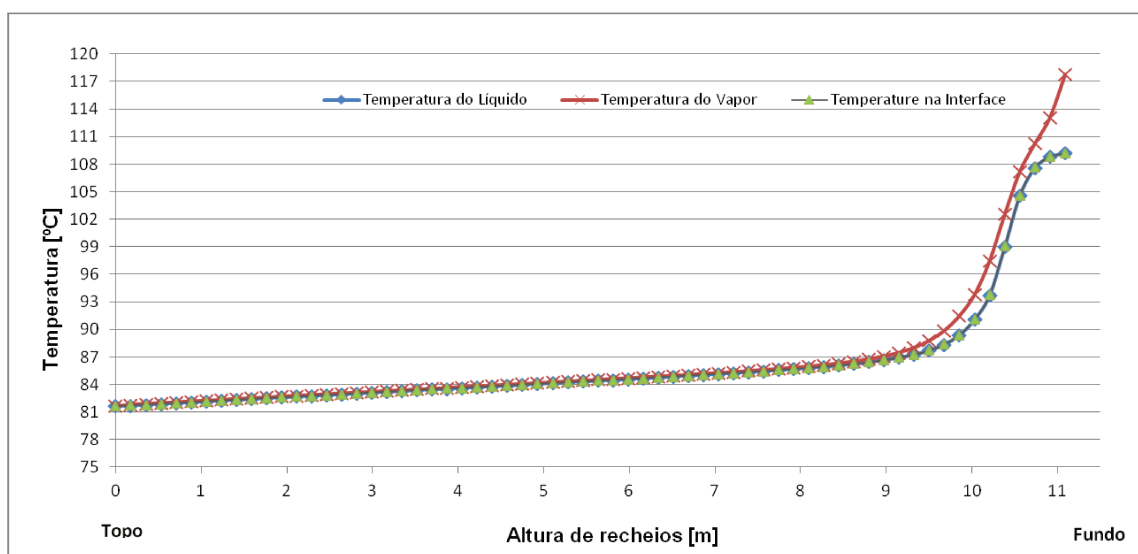


Figura 4.49 – Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios estruturados

O perfil das temperaturas de recheios estruturados e recheios randômicos são muito semelhantes, sendo que a fase vapor controla a transferência de calor.

### Posição de Alimentação (recheios estruturados)

Segue abaixo na Figura 4.50 um gráfico que relaciona a fração mássica dos componentes água e bioetanol na fase líquida pela altura de recheio estruturado. Foi considerada a posição ótima de alimentação.

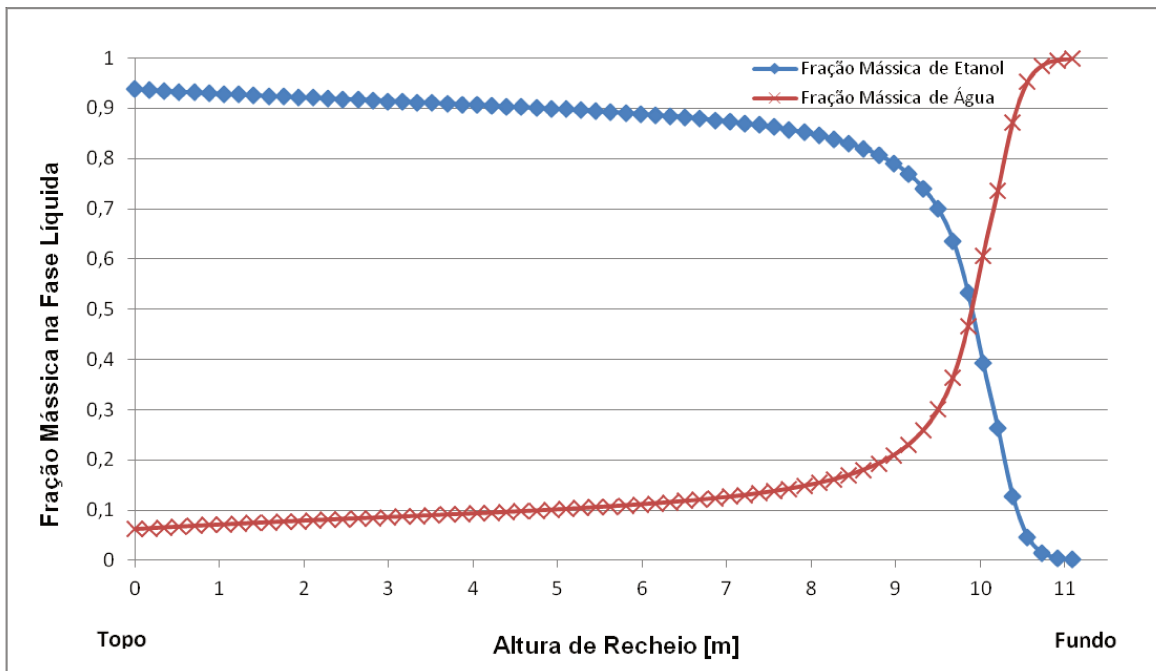


Figura 4.50 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água pela altura de Recheio com alimentação na posição equivalente a 10,032 m

#### 4.3.4.2. Simulação da coluna com o diâmetro de 2896 mm

Nesta simulação da coluna de destilação com recheios estruturados modelo FLEXIPAC 1Y foi analisada e considerada a posição ótima de alimentação e o diâmetro fixo da coluna em 2896 mm. Segue abaixo os resultados e análises dos seguintes parâmetros da coluna:

- Perfil geral das correntes;
- Perfil de temperatura do líquido, do vapor e na interface;
- Posição de alimentação;



### Perfil geral das correntes (recheios estruturados)

Segue nas Tabelas 4.29 e 4.30 o perfil das correntes de entrada e de vapor que serão valores fixos e as correntes de fundo e de topo que são calculadas.

Tabela 4.29 – Perfil geral das correntes (coluna de 2896 mm com recheios estruturados)

Variáveis	Entrada	Fundo	Topo	Vapor
<b>Temperatura [°C]</b>	91	109,23	81,63	127
<b>Pressão [bar a]</b>	1,40257	1,40	1,16	2,46
<b>Vazão Mássica [kg/h]</b>				
<i>Bioetanol</i>	19080	61,88	19018,12	0
<i>Água</i>	23320	53363,12	1256,88	31300
<b>Fração Mássica</b>				
<i>Bioetanol</i>	0,45	0,00116	0,93801	0
<i>Água</i>	0,55	0,99884	0,06199	1

Tabela 4.30 - Resultados da coluna de 2896 mm de diâmetro com recheios estruturados

Características dimensionais	
<i>Altura de Recheio [m]</i>	<i>12,915</i>
<i>Diâmetro da Coluna [mm]</i>	<i>2896</i>
<i>Altura da Alimentação [m]</i>	<i>11,685</i>

Para posicionar a altura da alimentação deve-se considerar o topo da coluna como altura 0 e o fundo da coluna como 12,915 m.

## Perfil de temperatura do líquido, do vapor e da interface (recheios estruturados)

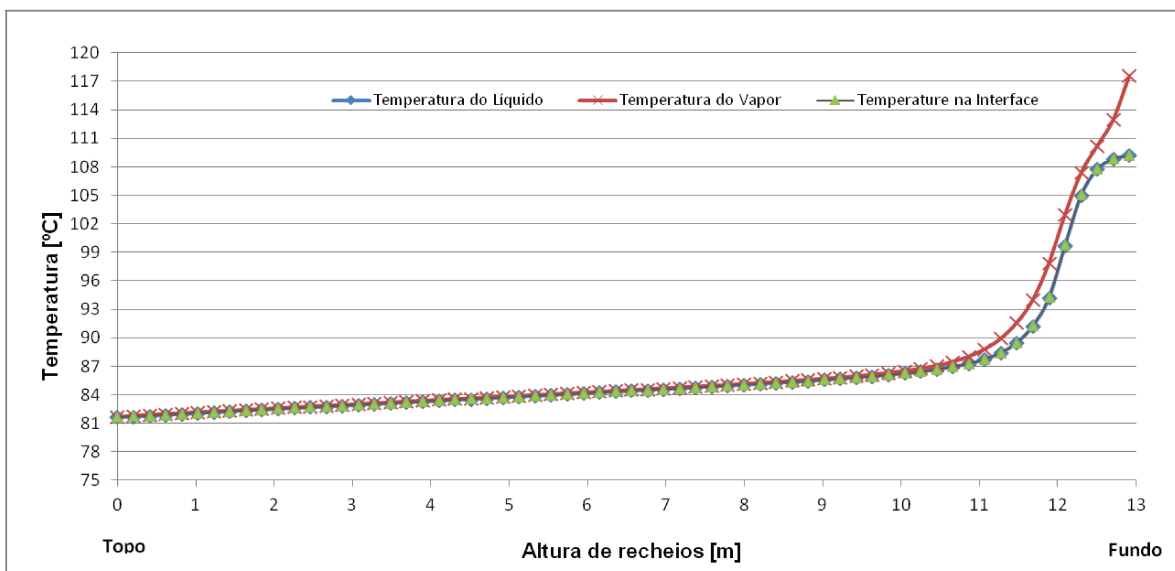


Figura 4.51– Perfil de temperatura das fases líquida, vapor e na interface em uma coluna com recheios estruturados

Pela análise da Figura 4.51, percebe-se que o perfil de temperatura das fases na simulação com a coluna de 3800 mm e na coluna de 2896 mm são muito semelhantes.

## Posição de Alimentação (recheios estruturados)

Segue abaixo a Figura 4.52 que relaciona a fração mássica dos componentes água e bioetanol na fase líquida pela altura de recheio estruturado. Foi considerada a posição ótima de alimentação.

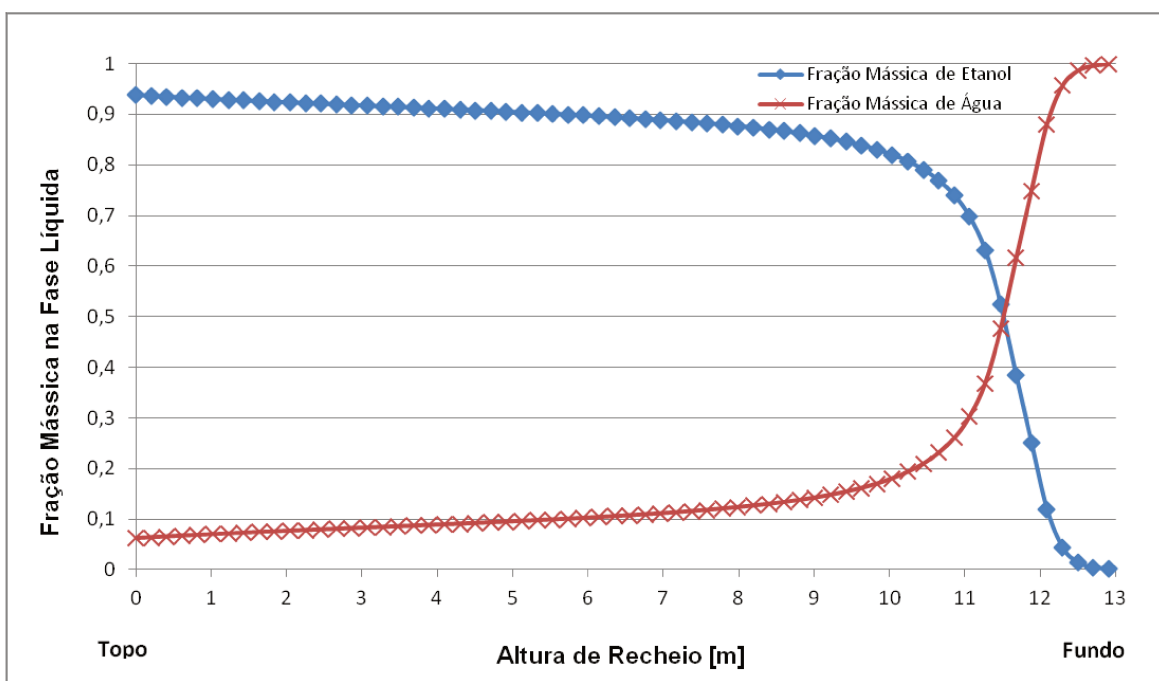


Figura 4.52 – Gráfico de fração mássica de bioetanol e água pela altura de Recheio com alimentação na posição equivalente a 11,685 m

#### 4.4. Comparação entre as colunas simuladas

O objetivo deste item é comparar os resultados obtidos com as dimensões de uma coluna de destilação convencional que produz em média 600 m<sup>3</sup>/d de bioetanol hidratado. A apresentação das comparações é realizada através das Tabelas 4.31 e 4.32. Serão comparadas as simulações das colunas otimizadas com a coluna de destilação convencional de pratos calotados estabelecida nesta dissertação. Os parâmetros a serem comparados são:

- Número de pratos ou altura de recheios;
- Diâmetro da coluna;
- Posição de alimentação;

Tabela 4.31 - Resultados das colunas simuladas de diâmetro de 3800 mm em comparação com os parâmetros de uma usina convencional

<b>Colunas Simuladas com Diâmetro de 3800 mm</b>					<b>Usina Convencional</b>
	<b>Pratos Calotados</b>	<b>Pratos Valvulados</b>	<b>Recheios Randômicos</b>	<b>Recheios Estruturados</b>	<b>Pratos Calotados</b>
<b>Tecnologia</b>	"Bubble Cap Padrão"	Válvula V-1	IMTP 40	FLEXIPAC 1Y	"Bubble Cap Padrão"
<b>Pratos / Recheios</b>	54 Pratos	49 Pratos	27,405 metros	11,088 metros	63 Pratos
<b>Posição de Alimentação</b>	49	45	24,405 metros	10,032 metros	47
<b>Fração Mássica de Bioetanol no Topo</b>	0,93804	0,93807	0,93804	0,93802	0,93800

Tabela 4.32 - Resultados das colunas simuladas de diâmetro otimizado em comparação com os parâmetros de uma usina convencional

	<b>Colunas Simuladas com Diâmetro Otimizado</b>				<b>Usina Convecional</b>
	<b>Pratos Calotados</b>	<b>Pratos Valvulados</b>	<b>Recheios Randômicos</b>	<b>Recheios Estruturados</b>	<b>Pratos Calotados</b>
<b>Tecnologia</b>	"Bubble Cap Padrão"	Válvula V-1	IMTP 40	FLEXIPAC 1Y	"Bubble Cap Padrão"
<b>Pratos / Recheios</b>	50 Pratos	49 Pratos	30,240 metros	12,915 metros	63 Pratos
<b>Posição de Alimentação</b>	46	45	26,880 metros	11,685 metros	47
<b>Diâmetro da Coluna [mm]</b>	3048	3048	2896	2896	3800
<b>Fração Mássica de Bioetanol no Topo</b>	0,93803	0,93804	0,93804	0,93801	0,93800

Portanto, a partir da apresentação dos resultados, segue abaixo uma discussão referente à influência do diâmetro da coluna e da posição de alimentação:

**Diâmetro da coluna:** Em projetos de colunas de destilação, o diâmetro ideal da coluna pode ser determinado pela porcentagem de inundação máxima. Sendo que o valor recomendado é em torno de 80%, foi verificado que para as condições de processo consideradas nestas simulações, a coluna de destilação convencional de 3800 mm de diâmetro que opera com pratos calotados, estaria operando com uma porcentagem de inundação mais baixa que a recomendada.

Portanto, foi possível perceber que com a diminuição do diâmetro da coluna com pratos, considerando o valor estabelecido de 80% de porcentagem de inundação, consegue-se diminuir a quantidade de pratos necessários para atingir a fração mássica de bioetanol na corrente de topo de 0,938. Este fato deve-se ao aumento da transferência de massa e calor que a inundação adequada na coluna promove, isto é, aumenta-se o contato entre a fase líquida e fase vapor. Em contrapartida, com a diminuição do diâmetro nas colunas com recheios, foi necessário aumentar a altura de recheio para manter a fração mássica mínima de 0,938 de bioetanol no topo.

A partir da análise dos resultados para recheios randômicos, foi possível verificar que utilizando o mesmo valor de porcentagem de inundação de 80%, o valor do diâmetro da coluna calculado com recheios é menor que o diâmetro calculado para a coluna com pratos. Esta é uma das características da aplicação de recheios randômicos em colunas; é possível reduzir o diâmetro da coluna com recheios em relação à coluna com pratos.

**Posição de Alimentação:** A localização da posição de alimentação adequada foi fundamental para reduzir a quantidade de pratos em relação a coluna convencional. Com o estudo da composição em fração mássica em cada prato, pode-se perceber que a posição de alimentação ótima é o prato que na coluna corresponde a composição semelhante a da carga. Nos gráficos onde a alimentação não era efetuada no prato ótimo, pode-se perceber que o distúrbio termodinâmico provocado por alimentar uma composição que não corresponde à composição daquele prato, modifica a trajetória da curva e estabelece uma nova configuração nas composições da coluna.

Com modificação no diâmetro e posição de alimentação simultaneamente, isto é, considerando a coluna otimizada, chegou-se em resultados muito positivos para diminuição da quantidade de pratos e redução no diâmetro da coluna. A redução do número de pratos em relação a coluna convencional de 63 pratos foi na ordem de 20%. A redução do diâmetro em relação a coluna convencional de 3800 mm também foi na ordem de 20%.

## 4.5. Conclusão

Neste capítulo foram apresentadas e comparadas as simulações considerando mudanças na tecnologia de internos, posição de alimentação e diâmetro da coluna. Para fornecer justificativa teórica nas modificações do diâmetro da coluna e da posição de alimentação, gráficos de perda de carga, gráficos de porcentagem de inundação e a composição em fração mássica de bioetanol e água em cada prato ou altura de recheio foram determinados. Os resultados apresentados confirmam a possibilidade de redução do diâmetro da coluna e da quantidade de pratos em aproximadamente 20% em relação à coluna convencional estabelecida com produção média de 600 m<sup>3</sup>/d.

## **Capítulo 5**

### **Conclusões e Sugestões**

#### **5.1. Conclusões**

Esta dissertação teve como principal objetivo simular e comparar através da modelagem de não-equilíbrio, colunas de destilação com diferentes tecnologias de pratos e recheios em condições processuais semelhantes à de uma coluna de destilação de bioetanol hidratado com produção média de 600 m<sup>3</sup>/d, visando redução nas dimensões da coluna, tanto na quantidade de dispositivos de separação quanto no diâmetro.

Devido à grande dificuldade de obtenção dos dados de processo da carga e ao grau de importância que representa para os resultados da coluna, os valores de temperatura e pressão da alimentação da corrente de entrada foram adotados de trabalhos de referência nesta área. A quantidade de vapor injetada na coluna foi calculada em comparada com dados da literatura, também estando perfeitamente coerentes com a prática.

Os resultados obtidos a partir da análise da posição de alimentação ótima e a utilização de critérios recomendados pela literatura para a porcentagem de inundação, permitiram obter resultados coerentes e positivos para a redução da quantidade de pratos e do diâmetro da coluna na ordem de 20%, para ambos, em relação à uma coluna convencional. Em relação aos resultados com colunas recheadas, os recheios estruturados se mostraram bem vantajosos na redução da altura da coluna. Em contrapartida, os recheios randômicos não demonstraram vantagem na redução da altura, mas conseguiram reduzir o diâmetro da coluna para valores inferiores aos valores das colunas com pratos, utilizando-se o mesmo critério de porcentagem de inundação.



## 5.2. Sugestões Para Trabalhos Futuros

A partir desta dissertação de mestrado foi possível verificar muitas possibilidades de otimização do processo de destilação do bioetanol. Segue abaixo algumas sugestões para trabalhos futuros:

- Realização de simulações considerando pratos e recheios na mesma coluna em seções diferentes para aumento de capacidade em colunas existentes
- Construção de uma coluna de destilação piloto para avaliar a performance modificando os internos e a posição de alimentação.
- Simulação da destilação do bioetanol com diferentes tipos e tamanhos de recheios
- Simulação do processo de destilação do bioetanol com recheios estruturados considerando sistema a vácuo
- Comparação dos resultados das simulações com resultados experimentais obtidos em destilarias existentes

## Referências Bibliográficas

AGE Projeções do agronegócio. AGE - BRASIL – Assessoria de Gestão Estratégica; 2009/2010 a 2019/2020.

AIChE - American Institute of Chemical Engineers, Bubble Tray Design Manual. New York, 1958

ASPEN PLUS 11.1, Unit Operations Models; 2001.

BARROS A. A. C., WOLF MACIEL, M. R. Desenvolvimento de uma correlação para o estudo da eficácia das colunas de destilação. 11º Congresso de Engenharia Química, Rio de Janeiro, 271-276, (1996)

BARROS, A. A. C. Desenvolvimento de modelo de estágio de não equilíbrio e proposição de correlações para processos de destilação convencional e extrativa. Tese de Doutorado, Unicamp, Campinas - SP , 1997

BIRD, R. B.; STERWART, W. E.; LIGHTFOOT, E.; “Fenómenos de transporte – Un estudio sistemático de los fundamentos del transporte, e de la matéria, energia y cantidad de movimiento”; Ed. Reverté 1960

BRAVO, J. L. Distillation Columns Containing Structured Packings: A comprehensive Model for Their Performance. 2. Mass-Transfer Model, 1996

CALDAS, J.N., et al. Internos de Torres: Pratos e Recheios. 2 ed. Rio de Janeiro 2007

CELENE, Companhia eletrocerâmica do nordeste, [www.celene.com.br](http://www.celene.com.br), 2004

COULSON, J. M., RICHARDSON, J. F., HARKER, J. H., BACKHURST, Chemical Engineering, Particle Technology and Separation Processes, Vol. 2, 5<sup>th</sup> ed., Butterworth-Heinemann, p.626, 2002

DIAS, M.O.S., *et al.* Improving bioethanol production from sugarcane: evaluation of distillation, thermal integration and cogeneration systems. 2010; p.1-12

DRICKAMER, H. G., BRADFORD, J. R. Overall plate efficiency of commercial hydrocarbon fractionating columns as a function of viscosity. Trans. AIChE, 39, 319-369, 1943.

ECKERT, E., VANĚK T. Some aspects of rate-based modeling and simulation of three-phase distillations columns. Computers and Chemical Engineering, 25, 603-612, 2001

FAIR, J. R. Advances in distillation system design; Chem. Eng. Progress, 73(11); 78-83, 1977

FIGUEROA, J. E. J. Análise e otimização do processo de obtenção de bioetanol anidro, empregando líquidos iônicos. Tese de Mestrado, Unicamp, Campinas – SP, 2011

GOMES, L. G. Simulação e otimização energética da unidade de processamento de gás natural de Atalaia. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas – SP, 1995

HIGLER *et al.*, Nonequilibrium modeling of three-phase distillation. Computers and Chemical Engineering, 28, 2021-2136, 2004.

JAY, J. C., GOVINDA, R. T., Status and barriers of advanced biofuel technologies: A review, 3542-3543, 2011

JUNQUEIRA, T. L. Simulação de colunas de destilação convencional, extrativa e azeotrópica no processo de produção de bioetanol através da modelagem de não equilíbrio e da modelagem de estágios de equilíbrio com eficiência. 2010; p.1-131

KOCH-GLISTCH, Mass transfer technology bulletin KGMTIG-I 2M0503E, [www.koch-glitsch.com](http://www.koch-glitsch.com), 2003.

KRISHNAMURTHY, R. ,TAYLOR R., A nonequilibrium stage model of multicomponent separation process – Part I: Model description and method of solution, AIChE Journal, 31, 449-456, 1985

LEE, J. H., DUDUKOVIC, M. P. A comparsion of the equilibrium and nonequilibrium models for a multicomponent reactive distilation column. Computers and Chemical Engineering, 23, 159-172, 1998

LEWIS, W. K. The efficiency and design of rectifying columns for binary mixtures. J. Ind. Eng. Chem., 14 (6), 492-497, 1922

LIANG Y.C, ZHOU Z. et al., A Nonequilibrium model for distillation Process, College of chemistry and chemical engineering., Wiley interscience 11037, 2006.

LOCKETT M.J, VICTOR, J.F, Structured packing flooding: its measurement and prediction, symposium series no. 152, IChemE, 2006

LUO, S. J. et al, Effect of channel opening angle on the performance of structured packings, *SLCE, Department of Chemical Engineering, 2008*

MARQUINI, M.F. E MEIRELLES, A.J.A et al, Simulação e análise de um sistema industrial de colunas de destilação de bioetanol, Universidade Estadual de Campinas, Acta Sci Technol. Maringá v. 29 n.1 p. 23-28, 2007

MECATRONICA ATUAL, <http://www.mecatronicaatual.com.br/secoes/leitura/5>, 2011

MEDINA, A. G., ASHTON,N., MCDERMOTT, C. Murphree and vaporization efficiencies in Multicomponent distillation. Chem. Eng. Sci., 33 (3), 331-339, 1978

NETO A.E. et al, Manual de conservação e reuso de água na agroindústria sucroenergética, ANA, p. 121-126, 2009.

NORILER, D. Modelagem Matemática Multifásica e Simulação Tridimensional e Transiente para Sistema Gás-Líquido: O Caso do Escoamento Líquido-Vapor em Colunas de Destilação. Tese de Doutorado, Unicamp, Campinas – SP, 2007.

O'CONNELL, H. E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers. Trans. AIChE, 42,741-755, 1946

OLUJIC.Z. Equipments improvement trends in distillation. Chemical Engineering and Processing 48; 1089-1104, 2009

PERRY, H. ROBERT & CECIL, H.CHILTON. Chemical enginner handbook. 8. ed. Tokyo, McGraw-Hill Book; Toshio Printing. 2008. n.p..

PETRE, C.F., LARACHI, F., ILIUTA, I. AND GRANDJEAN, B.P.A., 2003, "Pressure drop through structured packings: Breakdown into the contributing mechanisms by CFD modeling, Chem. Eng. Sci., 58: 163, 2003.

ROUSSEAU, R. W. Handbook of Separation Process Technology. Ed. Wiley. New York, 1987

RYANS, J. L., *et al.* Process vacuum System Design and Operation, McGraw-Hill, New York, (1986)

SCHEFFE, R. D. AND R. H. WEILAND, *Mass-Transfer Characteristics of Valve Trays*, I&EC Research, 26, 228, 1987

SEADER, C. J. The optimal design of laboratory distillation column for efficiency studies at finite reflux. Chem. Eng. Sci., 25:561 – 568, 1970

SIVASUBRAMANIAN, M. S., BOSTON, J. F. The Heat e Mass Transfer Rate-Based Approach for Modeling Multicomponent Separation Processes, Computer Applications in Chemical Engineering, p. 331 – 336, 1990

SOARES, C. Avaliação experimental dos coeficientes de transferência de massa e calor em uma coluna de pratos perfurados. Dissertação de Mestrado, Unicamp, Campinas- SP, 2000

SRIDHAR, L. N., TORRES, M., Stability calculations for nonequilibrium separation process; p. 2175, 1998.

STRIGLE, R. F., *et al.* "A New Approach to Package Distillation Column Design", Paper presented *et al* Che Annual Meeting, Anaheim, Calif., June 1982

TAYLOR, R. *et al.* The Development of Nonequilibrium Model for Computer Simulation of Multicomponent Distillation e Absorption Operations, Brighton, U. K., I. Chem E. Symposium Series, nº.104, p.B321-B324, 1987

TAYLOR, R., KRISHNA, R. Multicomponent mass transfer. Editora Wiley, New York, 1993

VALLURI, P., MATAR, O.K., HEWITT, G.F. AND MENDES, M.A., 2005, Thin film flow over structured packings at moderate Reynolds numbers, Chem. Eng. Sci., 2005.