

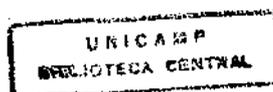
UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO INTERATIVA DE
COLUNAS DE PRATOS PARA ABSORÇÃO DE GASES :
UM MÉTODO PARA MINIMIZAÇÃO
DE POLUENTES INDUSTRIAIS**

AUTOR: ENG^o QUÍM. CARLOS ALBERTO FERREIRA RINO
ORIENTADORA: PROF^a. DR^a. MARIA REGINA WOLF MACIEL

Dissertação submetida à comissão de pós-graduação da Faculdade de
Engenharia Química - UNICAMP como parte dos requisitos necessários
para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química

agosto/1996
Campinas-SP



RINO
16

UNIDADE	BC
N.º CHAMADA	T/UNICAMP
	R475m
V.	Es
TOMBO	50/29884
PROC.	281/97
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	29/04/97
N.º CPD	

CM-0005804 1-0

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

R475m Rino, Carlos Alberto Ferreira
Modelagem e simulação interativa de colunas de pratos para absorção de gases: um método para minimização de poluentes industriais / Carlos Alberto Ferreira Rino.-- Campinas, SP: [s.n.], 1996.

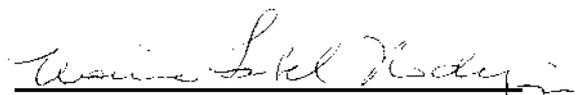
Orientadora: Maria Regina Wolf Maciel.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Absorção. 2. Gases - Absorção e adsorção. 3. Controle de poluição industrial. 4. Separação (Tecnologia). I. Maciel, Maria Regina Wolf. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação defendida e aprovada em 23 de agosto de 1996, pela banca examinadora constituída pelos professores doutores.



Profª Drª Maria Regina Wolf Maciel



Profª Drª Maria Isabel Rodrigues



Profª Drª Liliame Maria Ferrareso Lona Batista

DEDICATÓRIA

**À
Valéria, minha esposa,
Antonia e Paulo, meus pais,
DEDICO.**

AGRADECIMENTOS

À **CETESB - Cia. de Tecnologia de Saneamento Ambiental** por incentivar a realização deste trabalho.

À **Prof^ª Dr^ª Maria Regina Wolf Maciel** por atender à minha solicitação na orientação deste trabalho.

Ao **Prof^º Dr^º Saul Gonçalves D'Ávila** pelos conselhos dados nos momentos difíceis e pela amizade.

Aos colegas **Maria Helena Pescarini, Atilano Antonio Vegini e Carlos Alberto Ubirajara Gontarski** pelo apoio na resolução dos problemas encontrados.

Aos demais **colegas, funcionários e professores** do DPQ\FEQ\UNICAMP pelo apoio prestado nos momentos difíceis.

A todas as **pessoas, amigos e familiares** que incentivaram a realização deste trabalho.

Agradeço à **DEUS** por iluminar todos os momentos de dúvidas e dificuldades.

SUMÁRIO

Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas.....	x
Nomenclatura	xii
Resumo.....	xiv
Capítulo I - OBJETIVOS DA TESE	01
Capítulo II - INTRODUÇÃO.....	03
II.1 Absorção de Gases.....	03
II.2 Metodologia Utilizada.....	04
II.3 Organização da Tese	05
Capítulo III - COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS COMO EQUIPAMENTO DE CONTROLE DA POLUIÇÃO DO AR.....	07
III.1 Coluna de Pratos. Definição.....	07
III.2 Incineração	08
III.3 Controle da Emissão de Poluentes Atmosféricos.....	10
Capítulo IV - ESTUDOS DE COLUNAS DE ABSORÇÃO	13
IV.1 Tipos de Colunas de Absorção.....	13
IV.2 Tipos de Solventes para a Absorção.....	15
IV.3 Colunas de Recheio	15
IV.4 Colunas de Pratos	21
IV.5 Relação entre a modelagem de uma coluna de pratos e uma coluna de recheio.....	25
IV.6 Conclusões	26
Capítulo V - MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS	28
V.1 Equações para a Modelagem de Colunas de Absorção de Pratos.....	28
V.1.1 Equilíbrio Líquido-Vapor	32
V.1.2 Equilíbrio Líquido-Vapor a Altas Pressões	39
V.2 Propriedades Necessárias para a Simulação	41
V.2.1 Pressão de Vapor.....	41
V.2.1.1 Equação de Antoine	41

V.2.2 Coeficiente de Fugacidade.....	41
V.2.2.1 Equação Virial	41
V.2.3 Coeficiente de Atividade	42
V.2.3.1 Modelo UNIQUAC	42
V.2.3.2 Modelo UNIFAC para cálculo dos parâmetros UNIQUAC.....	44
V.2.3.3 Equação de Scatchard & Hildebrand	48
V.2.3.4 Equação de Prausnitz & Shair	48
V.2.4 Entalpia da Fase Vapor.....	49
V.2.5 Entalpia da Fase Líquida	51
V.3 O Método de Newton-Raphson.....	54
V.4 Procedimento de Cálculo para a Simulação.....	57
V.5 Gerenciamento Interativo de Arquivos.....	63
V.5.1 Funcionamento do Programa Auxiliar	64
 Capítulo VI- RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	 77
VI.1 Comparação com Resultados do Simulador ASPEN	77
VI.1.1 Sistema Metano-Etano-Propano	78
VI.1.2 Sistema Metano-Etano-Butano	81
VI.1.3 Sistema Metano-Etano-Pentano.....	83
VI.1.4 Sistema Propano-Butano-Pentano.....	85
VI.1.5 Sistema Etano-Butano-Pentano	87
VI.1.6 Sistema Metano-Butano-Pentano.....	89
VI.2 Análise para Otimização da Coluna	92
VI.2.1. Influência da Variação do Número de Estágios	93
VI.2.2 Influência da Variação da Pressão	96
VI.2.3 Influência da Variação da Temperatura da Fase Líquida.....	99
VI.2.4 Influência da Variação do Fluxo Molar da Fase Líquida.....	102
VI.2.5 Influência da Variação do Peso Molecular do Solvente	105
VI.2.6 Utilização da Equação de Peng-Robinson usando o Simulador ASPEN	110
VI.3 Simulação da Absorção de Corrente Gasosa Proveniente de um Incinerador	111
VI.3.1. Influência da Variação do Número de Estágios	112
VI.3.2 Influência da Variação da Pressão	113
VI.3.3 Influência da Variação da Temperatura da Fase Líquida.....	114
VI.3.4 Influência da Variação do Fluxo Molar da Fase Líquida.....	115
 Capítulo VII - CONCLUSÕES E SUGESTÕES	 117
 Capítulo VIII - BIBLIOGRAFIA	 120
 APÊNCIDE A	 126
 ABSTRACT	 171

LISTA DE FIGURAS

Fig. III.1	- Esquema de uma coluna de pratos	8
Fig. IV.1	- Diagrama para o balanço material	17
Fig. IV.2	- Razão L/V limite	19
Fig. V.1	- Esquema de um estágio arbitrário n	30
Fig. V.1b	- Exemplo de arquivo WDIN.DAT	59
Fig. V.2	- Tela inicial do programa auxiliar	64
Fig. V.3	- Janela para carregar um arquivo de dados existente	65
Fig. V.4	- Janela para selecionar os componentes	66
Fig. V.5	- Janela para acrescentar/alterar componentes	67
Fig. V.6	- Janela para seleção dos grupos funcionais da molécula de um componente	68
Fig. V.7	- Janela de visualização dos parâmetros críticos	68
Fig. V.8	- Janela de entrada das frações molares da fase líquida	69
Fig. V.9	- Janela de resultados com tabelas	70
Fig. V.10	- Janela de resultados com gráficos	71
Fig. V.11	- Quadros do fluxo líquido total e fluxo vapor total	72
Fig. V.12	- Quadro alteração da pressão	73
Fig. V.13	- Quadro número de estágios	73
Fig. V.14	- Quadro modelo dos coeficientes	74
Fig. V.15	- Quadro temperatura das alimentações	74
Fig. V.16	- Quadro eficiência de Murphree	75
Fig. V.17	- Esquema da interrelação entre os programas	76
Fig. VI.1	- Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C ₂ -C ₃ -n-dodecano	80
Fig. VI.2	- Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C ₂ -C ₄ -n-dodecano	82
Fig. VI.3	- Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C ₂ -C ₅ -n-dodecano	84
Fig. VI.4	- Perfil de temperatura na coluna para o sistema C ₃ -C ₄ -C ₅ -n-dodecano	86
Fig. VI.5	- Perfil de temperatura na coluna para o sistema C ₂ -C ₄ -C ₅ -n-dodecano	88
Fig. VI.6	- Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C ₄ -C ₅ -n-dodecano	90
Fig. VI.7	- Fração molar do componente saída vapor x número de estágios	93
Fig. VI.8	- Fração molar do componente saída líquida x número de estágios	94
Fig. VI.9	- Temperatura das correntes de saída x número de estágios	95
Fig. VI.10	- Fração molar do componente saída vapor x pressão da coluna	96
Fig. VI.11	- Fração molar do componente saída líquida x pressão da coluna	97
Fig. VI.12	- Temperatura das correntes de saída x pressão da coluna	98
Fig. VI.13	- Fração molar do componente saída vapor x temp. do líquido	99
Fig. VI.14	- Fração molar do componente saída líquida x temp. do líquido	100

Fig. VI.15 - Temperatura das correntes de saída x temp. do líquido	101
Fig. VI.16 - Fração molar do componente saída vapor x fluxo do líquido.....	102
Fig. VI.17 - Fração molar do componente saída líquida x fluxo do líquido.....	103
Fig. VI.18 - Temperatura das correntes de saída x fluxo do líquido.....	104
Fig. VI.19 - Fração molar do componente saída vapor x peso molecular do solvente	105
Fig. VI.20 - Fração molar do componente saída líquida x peso molecular do solvente	106
Fig. VI.21 - Temperatura das correntes de saída x peso molecular do solvente	107
Fig. VI.22 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x número de estágios.....	113
Fig. VI.23 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x pressão da coluna	114
Fig. VI.24 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x temperatura de alimentação do líquido.....	115
Fig. VI.25 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x fluxo molar de alimentação do líquido.....	116

LISTA DE TABELAS

Tab.VI.1 - Parâmetros constantes para as simulações.....	78
Tab.VI.2 - Resultados do fluxo de saída para o sistema C-C ₂ -C ₃ -n-dodecano.....	79
Tab.VI.3 - Perfil temperatura na coluna para o sistema C-C ₂ -C ₃ -n-dodecano.....	79
Tab.VI.4 - Resultados do fluxo de saída para o sistema C-C ₂ -C ₄ -n-dodecano.....	81
Tab.VI.5 - Perfil temperatura na coluna para o sistema C-C ₂ -C ₄ -n-dodecano.....	81
Tab.VI.6 - Resultados do fluxo de saída para o sistema C-C ₂ -C ₅ -n-dodecano.....	83
Tab.VI.7 - Perfil temperatura na coluna para o sistema C-C ₂ -C ₅ -n-dodecano.....	83
Tab.VI.8 - Resultados do fluxo de saída para o sistema C ₃ -C ₄ -C ₅ -n-dodecano.....	85
Tab.VI.9 - Perfil temperatura na coluna para o sistema C ₃ -C ₄ -C ₅ -n-dodecano.....	85
Tab.VI.10 - Resultados do fluxo de saída para o sistema C ₂ -C ₄ -C ₅ -n-dodecano.....	87
Tab.VI.11 - Perfil temperatura na coluna para o sistema C ₂ -C ₄ -C ₅ -n-dodecano.....	87
Tab.VI.12 - Resultados do fluxo de saída para o sistema C-C ₄ -C ₅ -n-dodecano.....	89
Tab.VI.13 - Perfil temperatura na coluna para o sistema C-C ₄ -C ₅ -n-dodecano.....	89
Tab.VI.14 - Parâmetros fixos para as simulações.....	92
Tab.VI.15 - Parâmetros variados para as simulações.....	92
Tab.VI.16 - Influência do número de estágios na composição da saída vapor.....	93
Tab.VI.17 - Influência do número de estágios na composição da saída líquida.....	94
Tab.VI.18 - Influência do número de estágios nas temperaturas das correntes de saída.....	95
Tab.VI.19 - Influência da pressão da coluna na composição da saída vapor.....	96
Tab.VI.20 - Influência da pressão da coluna na composição da saída líquida.....	97
Tab.VI.21 - Influência da pressão da coluna nas temperaturas das correntes de saída.....	98
Tab.VI.22 - Influência da temperatura da alimentação líquida na composição da saída vapor.....	99
Tab.VI.23 - Influência da temperatura da alimentação líquida na composição da saída líquida.....	100
Tab.VI.24 - Influência da temperatura da alimentação líquida nas temperaturas das correntes de saída.....	101
Tab.VI.25 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida na composição da saída vapor.....	102
Tab.VI.26 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida na composição da saída líquida.....	103
Tab.VI.27 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida nas temperaturas das correntes de saída.....	104
Tab.VI.28 - Influência do peso molecular do solvente na composição da saída vapor.....	105
Tab.VI.29 - Influência do peso molecular do solvente na composição da saída líquida.....	106
Tab.VI.30 - Influência do peso molecular do solvente nas temperaturas das correntes de saída.....	107

Tab.VI.31 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida na composição da saída líquida.....	109
Tab.VI.32 - Condições da alimentação vapor.....	111
Tab.VI.33 - Parâmetros variados para as simulações.....	112
Tab.VI.34 - Influência do número de estágios no fluxo molar de HCl na saída vapor	112
Tab.VI.35 - Influência da pressão da coluna no fluxo molar de HCl na saída vapor	113
Tab.VI.36 - Influência da temperatura da alimentação líquida no fluxo molar de HCl na saída vapor.....	114
Tab.VI.37 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida no fluxo molar de HCl na saída vapor.....	115

NOMENCLATURA

A, B, C	constantes da equação de Antoine
Cp_i^0	capacidade calorífica do vapor ideal
Cp_i	constantes da equação da capacidade do vapor ideal
h_n	entalpia molar total da fase líquida no estágio n (Joule/h)
H_n	entalpia molar total da fase vapor no estágio n (Joule/h)
$k_{n,i}$	constante de equilíbrio termodinâmico
$l_{n,i}$	fluxo molar do componente i na fase líquida no estágio n (kmol/h)
L_n	fluxo molar total da fase líquida no estágio n (kmol/h)
P	pressão total da coluna (atm)
$P_{vp,i}$	pressão de vapor do componente i (mmHg)
R	constante dos gases ideais (82.05 cm ³ atm/mol K)
T	temperatura (K)
$v_{n,i}$	fluxo molar do componente i na fase vapor no estágio n (kmol/h)
V_i^L	volume molar do líquido (cm ³ /mol)
V_n	fluxo molar total da fase vapor no estágio n (kmol/h)
Z	fator de compressibilidade
δ_k	parâmetro de solubilidade
Δh^{VAP}	entalpia de vaporização do componente i (Joule/mol)
ϕ_i	coeficiente de fugacidade do componente i na mistura vapor
γ_i	coeficiente de atividade do componente i na mistura líquida
$\eta_{n,i}$	eficiência de estágio de Murphree
ω	fator acêntrico

Subscritos:

B de bolha
c crítico
i componente
n estágio
o de referência
R reduzida

RESUMO

Os objetivos deste trabalho são a modelagem e a simulação de uma coluna de absorção de pratos multicomponentes, considerando-se os fenômenos físicos mais importantes que ocorrem no processo e a termodinâmica do equilíbrio de fases de maneira rigorosa.

O estudo da modelagem é feito no estado estacionário, sendo que a coluna é operada adiabaticamente. Um método desenvolvido inicialmente para colunas de destilação é aplicado para colunas de absorção. A resolução do sistema de equações não-lineares é feita pelo Método de Newton-Raphson.

Um software composto por 4 programas é desenvolvido de forma a permitir a simulação interativa, onde a alteração dos parâmetros necessários para os cálculos (arquivo de dados), é feita de forma simultânea e imediata. O procedimento interativo possibilita uma adequada escolha das condições operacionais e, portanto, permite a realização de simulações otimizadas.

As simulações realizadas apresentaram resultados muito próximos aos obtidos pelo simulador comercial ASPEN, o que serviu para validação do modelo. No estudo da variação de parâmetros para a otimização da coluna, chegou-se à conclusão de que, para o sistema estudado, a coluna apresenta maior eficiência quando operada sob pressão, com um aumento do fluxo molar e uma diminuição da temperatura da corrente de alimentação líquida e um aumento no peso molecular do solvente líquido.

Foi feita, ainda, a simulação da absorção em água de uma corrente gasosa proveniente de um incinerador de resíduos perigosos. A coluna de pratos mostrou-se capaz de enquadrar o padrão de lançamento de HCl na atmosfera de acordo com a norma brasileira, quando operada com maior pressão e com maior fluxo molar da corrente de alimentação líquida.

Palavras-chave: Colunas de pratos
Absorção de gases
Controle de poluição atmosférica
Processos de separação

CAPÍTULO I

OBJETIVOS DA TESE

Os atuais problemas com custos de energia e regulamentações ambientais, no tocante aos padrões de lançamento de gases na atmosfera, têm feito crescer a preocupação com os processos de separação difusionais. Dentre estes processos, as colunas de pratos para absorção de gases são processos de crescente interesse e motivação em seus estudos (Beggs, 1991, Bingham, 1990, Gomes e Maciel, 1994 e Maciel e Silveira, 1993).

A aplicação da computação aos processos químicos é um ramo dos mais importantes e que tem despertado o maior interesse na comunidade científica atualmente. Técnicas computacionais estão sendo progressivamente adaptadas à engenharia de processos e projetos e isto tem contribuído significativamente nas tarefas de síntese, projeto, otimização, análise e controle de processos. O mais recente progresso nesta área refere-se ao desenvolvimento dos simuladores comerciais os quais podem ser usados para a simulação, análise e otimização de processos, embora estas atividades ainda não sejam usualmente praticadas.

O objetivo deste trabalho é a modelagem e a simulação de uma coluna de absorção de pratos multicomponentes, e a utilização da mesma como equipamento de controle da poluição do ar de um incinerador de resíduos perigosos. É utilizado um método que foi inicialmente utilizado na destilação. Este procedimento, embora citado na literatura como uma metodologia possível, nunca foi apresentado. Além disso, para o estudo dinâmico das colunas de absorção e para aplicação das estratégias de controle, é necessário que se faça o estudo no estado estacionário, o mais rigoroso possível, e que se tenha em mãos o programa para posterior incorporação dos novos desenvolvimentos. Além disso, para se desenvolver o

programa de absorção com reação química, tem-se que deixar pronto o programa de absorção física, como ponto de partida.

Na modelagem são considerados os fenômenos físicos mais importantes que ocorrem no processo e a termodinâmica de equilíbrio de fases é tratada de maneira rigorosa. É utilizado o Método de Newton-Raphson para resolução das equações do sistema (Veggini e Gontarski, 1996).

Na simulação de uma coluna de absorção de pratos, o objetivo é obter as composições, fluxos e as temperaturas das correntes de saída líquida e vapor; para tanto é necessário o conhecimento das composições, fluxos e as temperaturas das correntes de entrada, da pressão e do número de estágios da coluna.

É desenvolvido um software (denominado ABSIM) composto por 4 programas. O primeiro é um programa com os cálculos da simulação propriamente dita, é desenvolvido na linguagem FORTRAN e é denominado Programa Principal (ABSORCAO.EXE).

O segundo é um programa de gerenciamento de arquivos de dados e de resultados do Programa Principal. Este programa permite a manipulação imediata e simultânea dos parâmetros (dados de entrada) a serem utilizados pelo Programa Principal, é desenvolvido na linguagem VISUAL BASIC e é denominado Programa Auxiliar (COLUNA.EXE).

O terceiro programa calcula os parâmetros UNIQUAC a serem utilizados para o cálculo dos coeficientes de atividade, é desenvolvido na linguagem FORTRAN e é denominado Programa Auxiliar de Cálculo 1 (UNIQUAC.EXE).

O quarto programa calcula a temperatura de bolha de uma mistura líquida, a uma determinada pressão e composição, também é desenvolvido em FORTRAN e é denominado Programa Auxiliar de Cálculo 2 (TBOLHA.EXE).

CAPÍTULO II

INTRODUÇÃO

II.1 ABSORÇÃO DE GASES

A absorção de gases (Perry e Chilton, 1980) é uma operação unitária em que um ou mais de um componente de uma mistura gasosa é dissolvido num líquido relativamente não volátil. A absorção pode ser um fenômeno puramente físico ou pode envolver a solubilização da substância no líquido seguida por uma reação com um ou mais de um constituinte do líquido. A operação reversa, denominada extração ou dessorção, é utilizada para transferir um ou mais componentes voláteis de uma mistura líquida para um gás.

Em geral, o gás e o líquido escoam em contracorrente para que seja maior a diferença de concentração e, portanto, maior a velocidade de absorção.

Nos casos mais simples de absorção (Foust et al., 1982) o absorvente líquido não se vaporiza, e o gás contém apenas um constituinte solúvel. Por exemplo, amônia é absorvida de uma mistura de ar e amônia pelo contato do gás com a água líquida na temperatura ambiente. A amônia é solúvel na água, mas o ar é quase insolúvel. A água, por sua vez, quase não se vaporiza na temperatura ambiente. Por isso, a única transferência de massa é da amônia da fase gasosa para a fase líquida. À medida que a amônia passa para a fase líquida, a sua concentração aumenta até que a amônia dissolvida fique em equilíbrio com a que está na fase gasosa. Atingindo o equilíbrio, não há mais transferência efetiva de massa.

Em outros casos de absorção, é possível que vários componentes sejam absorvidos pelo líquido e que parte do absorvente se vaporize.

Dentre as diferenças existentes no processo de absorção em relação à destilação, temos que, na alimentação, o líquido está abaixo do seu ponto de bolha e o gás está muito acima do seu ponto de orvalho. Além disso, as fases líquidas e gasosas, na alimentação, não contêm os mesmos componentes.

Os equipamentos usados para efetuar o contato contínuo entre um gás e um líquido podem ser:

- uma coluna composta com um recheio sólido;
- uma coluna vazia em que se faz a aspersão de um líquido, através do qual flui o gás;
- uma coluna com pratos ou bandejas de borbulhamento.

A escolha entre um tipo e outro de equipamento dependerá, entre outros, da natureza dos fluidos a serem utilizados, do tamanho da instalação e da necessidade ou não de resfriamento interno da coluna.

II.2 METODOLOGIA UTILIZADA

Naphtali e Sandholm (1971) apresentam uma metodologia aplicável aos cálculos de colunas de destilação. Nesta metodologia, as equações de conservação de massa e de energia e as equações de equilíbrio são agrupadas por estágios e então são linearizadas. O conjunto de equações resultante possui uma estrutura de blocos tri-diagonal que é facilmente resolvido utilizando o Método de Newton-Raphson. A matriz das derivadas parciais de todas as funções com respeito a todas as variáveis é calculada pelo Método de Eliminação de Gauss.

A mesma metodologia é aplicada para colunas de absorção de pratos, com a introdução de algumas modificações no programa original, as quais serão discutidas no Capítulo V. Uma das alterações na metodologia original refere-se ao método de resolução das matrizes, utilizando-se a Decomposição LU.

A principal vantagem deste método é que a convergência acelera à medida que a solução é aproximada. Além disso, a não idealidade da fase líquida pode ser levada em conta de maneira rigorosa, sem alterações no método.

II.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE

O capítulo III apresenta a utilização das colunas de absorção de pratos, com ênfase na aplicação do controle da poluição do ar. É apresentada a definição de coluna de pratos, a importância da incineração de resíduos perigosos na preservação do meio-ambiente e a necessidade da utilização de um equipamento para o controle da emissão dos gases, provenientes de um incinerador, antes do lançamento dos mesmos na atmosfera.

O Capítulo IV mostra as diferenças entre as colunas de recheio e as colunas de pratos na absorção de gases. Apresenta uma descrição dos estudos existentes com relação às colunas de pratos, exemplos de sistemas estudados na literatura e também resultados experimentais.

No Capítulo V estão descritas todas as equações necessárias para a modelagem de uma coluna de absorção de pratos. Também mostra o desenvolvimento dos programas utilizados e explica o procedimento iterativo na utilização do software desenvolvido.

O Capítulo VI apresenta os resultados obtidos na simulação para três casos. O primeiro, utilizando apenas hidrocarbonetos, é feita a comparação com os resultados obtidos em um simulador comercial. O segundo faz o estudo da variação de vários parâmetros para otimização da coluna. O terceiro realiza a simulação da absorção de uma corrente gasosa proveniente de um incinerador de resíduos perigosos.

O Capítulo VII apresenta as conclusões deste trabalho e as sugestões para continuidade dos estudos em absorção de gases.

CAPÍTULO III

COLUNA DE ABSORÇÃO DE PRATOS COMO EQUIPAMENTO DE CONTROLE DA POLUIÇÃO DO AR

III.1 COLUNAS DE PRATOS. DEFINIÇÃO.

Em uma coluna de pratos ou bandejas, a estrutura é cilíndrica e vertical com um certo número de pratos ou bandejas no seu interior (Theodore e Reynolds, 1987). Cada prato possui aberturas que podem ser perfuradas ou em formas de fendas. O líquido é introduzido no topo e flui em direção descendente. Um canal de descida, localizado em lados alternados de cada prato sucessivo, permite o movimento descendente do líquido até a saída pelo fundo da coluna. O gás entra pelo fundo da coluna e passa através das aberturas dos pratos, antes de sair pelo topo, e numa velocidade tal que evita a saída de líquido pelos furos dos pratos. O efeito global é um contato múltiplo, em contra-corrente, entre as fase líquidas e gasosas. A figura III.1 mostra o esquema de uma coluna de pratos.

As colunas de pratos podem ser utilizadas tanto na absorção de gases, como na destilação e na extração líquido-líquido.

Cada prato da coluna é considerado um estágio, pois no prato os fluidos são trazidos para um íntimo contato, ocorre a difusão interfase e os fluidos são separados. O número de pratos teóricos de uma coluna depende da dificuldade da separação e é determinado somente através dos balanços de massa e energia e das relações de equilíbrio.

O diâmetro da coluna, por outro lado, depende da quantidade de líquido e de gás que escoam através da coluna por unidade de tempo. O número atual de pratos requerido é maior que o número teórico devido às ineficiências do prato.

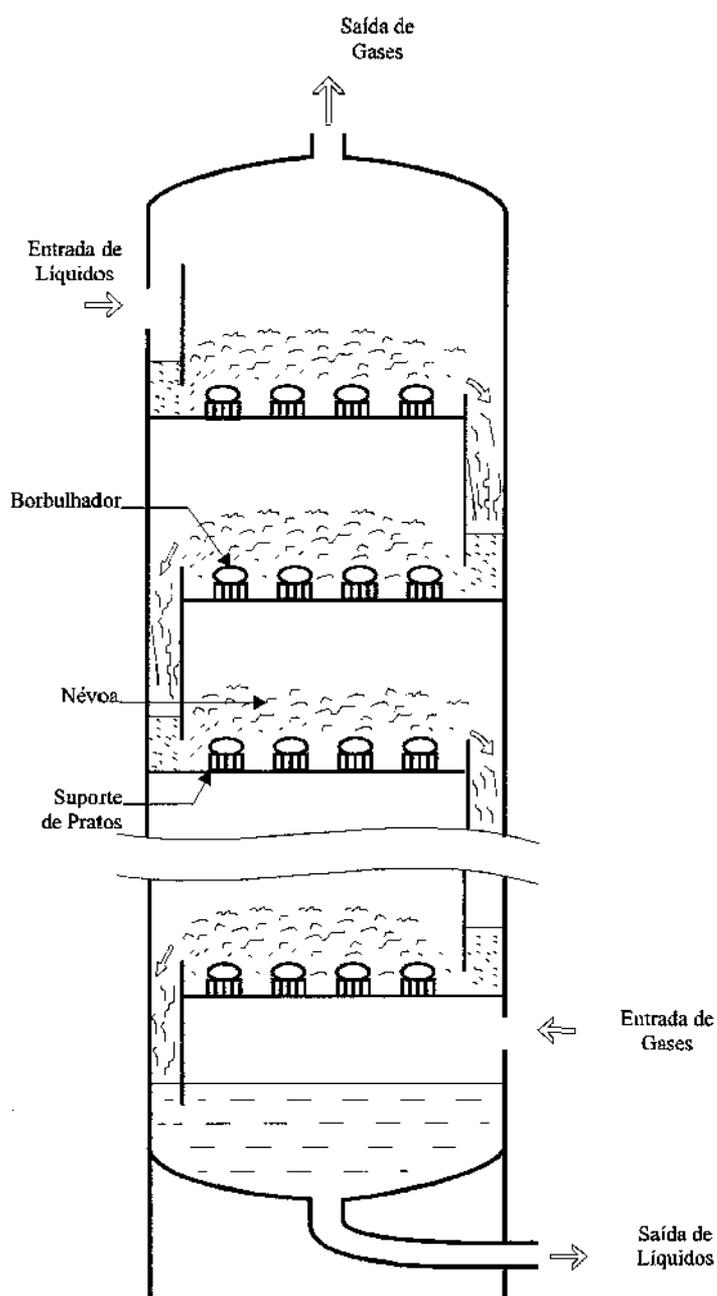


Figura III.1 - Esquema de uma coluna de pratos

III.2 INCINERAÇÃO

De acordo com Rocca et al.(1993), a incineração é um método de tratamento que se utiliza da decomposição térmica via oxidação, com o objetivo de tornar um resíduo menos volumoso, menos tóxico ou atóxico, ou ainda eliminá-lo, em alguns casos.

O desenvolvimento do processo de incineração teve início há muitos anos, com o enfoque voltado à queima de resíduos domiciliares ou patogênicos. Hoje, a aplicação deste processo no tratamento de resíduos perigosos passou a receber uma atenção maior, tendo em vista os problemas ambientais ocasionados pela disposição inadequada no solo de materiais tóxicos não degradáveis, altamente persistentes, e até mesmo daqueles não passíveis de disposição no solo.

De maneira geral, as unidades de incineração variam desde pequenas instalações, projetadas e dimensionadas para um resíduo específico, e operadas pelos próprios geradores, até grandes instalações de propósitos múltiplos, para incinerar resíduos de diferentes fontes. No caso de materiais tóxicos e perigosos, estas instalações requerem equipamentos adicionais de controle de poluição do ar, com conseqüente demanda de maiores investimentos.

Dentre os tipos de resíduos que apresentam maior potencial, no que diz respeito à adequabilidade ao processo de incineração, incluem-se: resíduos orgânicos constituídos basicamente de carbono, hidrogênio e/ou oxigênio; resíduos que contém carbono, hidrogênio, cloro com teor inferior a 30 % em peso e resíduos que apresentam seu poder calorífico inferior maior que 4700 kcal/kg (não necessitando de combustível auxiliar para queima).

As características dos resíduos e seu comportamento durante a combustão determinam como devem ser misturados, estocados e introduzidos na zona de queima. Alguns líquidos, com baixo ponto de fulgor, serão facilmente destruídos enquanto outros, incapazes de manter a combustão, deverão ser introduzidos através de uma corrente de gás quente ou aspergidos diretamente sobre a chama. Neste caso, pode ocorrer um fenômeno químico chamado craqueamento, no qual novas e indesejáveis substâncias podem ser formadas. Por exemplo, se o resíduo contiver certos compostos orgânicos de cloro, há o risco da formação do fosgênio (COCl_2)

que é um gás venenoso. Para evitar este tipo de problema, é necessário manter-se a temperatura de combustão na faixa de 1200 a 1400 °C e o tempo de detenção entre 0,2 a 0,5 segundos ou em alguns casos, de até 2 segundos.

A incineração de resíduos contendo enxofre, flúor, cloro, bromo e iodo resulta num efluente gasoso em cuja composição são encontrados estes poluentes. A forma mais comum de eliminá-los é fazer com que os gases da combustão passem através de uma coluna onde são lavados em contracorrente. O efluente líquido resultante da operação é recolhido na parte inferior da coluna.

Em resumo, a incineração é, provavelmente, a melhor solução para o tratamento de resíduos altamente persistentes, tóxicos e muito inflamáveis. Estão incluídos aqui solventes e óleos não passíveis de recuperação, defensivos agrícolas halogenados e vários produtos farmacêuticos.

III.3 CONTROLE DA EMISSÃO DE POLUENTES ATMOSFÉRICOS

Os gases quentes provenientes das operações de combustão em incineradores de resíduos perigosos devem ser resfriados antes de serem enviados para os equipamentos de controle de poluição do ar, os quais normalmente não são projetados para operar a altas temperaturas.

Os métodos usados para resfriar gases de combustão dividem-se em duas categorias: contato direto e contato indireto. O resfriamento por contato direto pode ser obtido através da diluição com ar ambiente, por resfriamento brusco com água e através do contato com sólidos que possuem alta capacidade de retenção de calor. Os métodos por contato indireto incluem convecção natural e radiação do sistema

de dutos, trocadores de calor com tiragem forçada e caldeiras de recuperação de calor.

Os poluentes na incineração de resíduos perigosos aparecem como consequência da combustão incompleta, bem como produtos de combustão de constituintes presentes nos resíduos e no ar de combustão.

Os produtos de combustão incompleta incluem o monóxido de carbono, hidrocarbonetos, aldeídos, aminas, ácidos inorgânicos, materiais orgânicos policíclicos, alguns componentes do resíduo ou produtos parcialmente degradados que escaparam da destruição térmica no incinerador. Nos incineradores bem projetados e operados esses produtos de combustão incompleta são emitidos em quantidades desprezíveis. De maneira geral, o produto final de combustão é constituído de dióxido de carbono e vapor d'água. Entretanto, dependendo da composição do resíduo incinerado e das condições, são gerados vários produtos. Por exemplo, na queima de hidrocarbonetos clorados são formados o cloreto de hidrogênio (HCl) e uma pequena quantidade de cloro (Cl_2). No caso de queima de fluoretos orgânicos é formado o fluoreto de hidrogênio (HF). A maior parte de enxofre presente no combustível auxiliar transforma-se em dióxido de enxofre (SO_2) e 1 a 5 % em trióxido de enxofre (SO_3). Além disso, há formação de óxido nítrico (NO) pela fixação térmica do nitrogênio do ar de combustão e dos compostos nitrogenados presentes no resíduo. As emissões de particulados incluem partículas de óxidos minerais e sais provenientes dos constituintes minerais no resíduo, bem como fragmentos da queima incompleta de materiais combustíveis.

Dentre os equipamentos utilizados para o controle da poluição do ar, pode-se destacar: pós-queimadores, lavadores venturi, colunas de recheio, coluna de pratos, precipitadores eletrostáticos.

As colunas de pratos quando aplicadas ao controle de poluição do ar são concebidas para a remoção de um ou mais poluentes de uma corrente gasosa contaminada. Considere, por exemplo, um processo em que uma mistura de ar com HCl gasoso entra em contato com água. O HCl é solúvel na água, e as moléculas que entram em contato com a superfície da água se dissolvem imediatamente. Entretanto, as moléculas de HCl estão dissipadas por todas as partes da fase gasosa, e elas somente podem alcançar a água pela difusão na fase gasosa. Quando o HCl dissolve na superfície da água, ele é dissolvido por toda a fase líquida em um segundo processo difusional. Consequentemente, a taxa de absorção é determinada pelas taxas de difusão nas fases líquida e gasosa. O equilíbrio é outro importante fator a ser considerado no controle da operação de sistemas de absorção. A taxa na qual o poluente será difundido em um absorvente líquido dependerá da distância do equilíbrio que é mantida no sistema.

CAPÍTULO IV

ESTUDOS DE COLUNAS DE ABSORÇÃO

IV.1 TIPOS DE COLUNAS DE ABSORÇÃO

De um modo geral, de acordo com Perry e Chilton (1980), as colunas de recheio são preferidas para operar com materiais corrosivos ou com pequenas quedas de pressão, nas plantas-piloto ou em operações de pequeno porte, ou com líquido espumantes. As colunas de pratos são preferidas para as operações em grande escala (pois são mais baratas) ou naquelas em que a velocidade do líquido é baixa (o que provocaria a molhagem inadequada do recheio de uma coluna) ou nos casos em que se deseja o resfriamento interno.

Existem muitas circunstâncias em que as colunas de recheio apresentam vantagens significativas. Entre elas citam-se:

1- Operações à vácuo. A queda de pressão ao longo de uma coluna de recheio pode ser projetada para um nível mais baixo do que com uma coluna de pratos, e ainda ter um contato vapor-líquido adequado.

2 - Os líquidos espumantes são, frequentemente, manuseados mais satisfatoriamente numa coluna de recheio.

3 - A retenção de líquido é, em geral, menor, de modo que a operação é melhor com as substâncias termicamente sensíveis ou nos processos em que possam ter reações laterais indesejáveis.

4 - A construção é, em geral, mais simples e mais barata quando o sistema de absorção corrói os materiais de construção usualmente adotados.

5 - A coluna de recheio será, habitualmente, mais barata que a de pratos, quando as colunas forem pequenas.

As colunas de pratos apresentam grandes vantagens em muitas áreas:

1 - São mais desejáveis quando o calor de solução exige o resfriamento interno, pois é fácil instalar serpentina de arrefecimento nos pratos.

2 - As colunas de pratos podem operar com taxas mais elevadas de líquidos, com um projeto apropriado para o fluxo de líquido.

3 - Quando as taxas de escoamento do líquido são muito baixas, as colunas de pratos têm vantagens, pois podem ser projetadas para reterem uma certa quantidade de líquido no prato.

4 - Alguns tipos de colunas de pratos podem ser preferidos quando existem depósitos de material sólido que devem ser periodicamente removidos. A limpeza das colunas de pratos pode ser realizada mediante janelas de visita, enquanto as colunas de recheio devem ser esvaziadas para a limpeza.

5 - O peso total de uma coluna de pratos é, em geral, menor que o de uma coluna de recheio projetada para a mesma tarefa. Quando o material do recheio tem pequena resistência ao esmagamento, torna-se imperioso o uso de diversas chapas para suportar o peso de uma coluna com grande altura de recheio.

6 - As colunas de pratos são preferidas, em geral, nas operações que exigem grande número de unidades de transferência ou de pratos teóricos. As colunas de recheio tendem a ser sujeitas à canalização das correntes de vapor ou de líquido, e a distribuição apropriada é difícil de se manter sem a adoção de dispositivos redistribuidores complicados.

IV.2 TIPOS DE SOLVENTES PARA A ABSORÇÃO

O solvente ideal é não-volátil, puro, não corrosivo, estável, não viscoso, não espumante, não é inflamável e dissolve infinitamente o soluto.

Infelizmente, este solvente ideal é raro de encontrar e a escolha se faz com base na alternativa mais desejável entre as diversas oferecidas. Quando é possível exercer esta escolha, a preferência deve recair sobre um líquido em que o soluto se dissolve muito bem. Algumas vezes, o gás de saída está saturado pelo solvente, e a perda desta substância pode ser onerosa. Por isto os solventes baratos devem ser preteridos aos mais caros, de maior ação solubilizante e menor volatilidade.

IV.3 COLUNAS DE RECHEIO

Em colunas de recheio, o dispositivo comumente utilizado para absorção gasosa (McCabe et al., 1993) consiste de uma coluna cilíndrica equipada com uma entrada gasosa e um espaço de distribuição no fundo; uma entrada de líquido e um distribuidor no topo; saídas gasosa e líquida no topo e no fundo, respectivamente; e uma massa de suporte sólido inerte, denominada recheio, que pode ser empacotada ou colocada de maneira aleatória. O líquido, na entrada da coluna, é distribuído na parte de cima do empacotamento. O gás entra pelo distribuidor de baixo e flui para cima pelos interstícios do empacotamento em contracorrente ao líquido. O empacotamento promove uma maior área de contato entre o líquido e o gás, que incentiva o contato entre as fases. O soluto presente no gás é então absorvido pelo líquido, que é enriquecido enquanto desce pela coluna, e o gás diluído sai pelo topo. O líquido concentrado deixa a coluna pela parte de baixo.

Os cálculos de colunas de recheio (Perry e Chilton, 1980) são baseados no princípio da difusão homogênea. Quando uma fase homogênea contém dois ou mais componentes cujas concentrações modificam-se de ponto para ponto, haverá

tendência de ocorrer uma transferência de massa que leve à uniformidade das concentrações. Este fenômeno é associado à agitação térmica das moléculas: numa região em que as moléculas de uma espécie estão concentradas, há tendência maior de escaparem do que para entrarem para esta região. A velocidade de difusão do material A num ponto de um fluido estacionário é, de acordo com a experiência e a teoria, proporcional ao gradiente de concentração no ponto:

$$N_A = -D_v \frac{\partial c}{\partial s} \quad (1)$$

onde: c = concentração

s = distância

D_v = coeficiente de difusão.

A velocidade de difusão nos gases é grande, e pequena nos líquidos. A taxa de transferência varia com o tempo e é proporcional à diferença entre a concentração no seio da fase e a concentração na interface.

Um ponto importante (McCabe et al., 1993) no projeto de uma coluna de recheio é a razão líquido-vapor (L/V). A partir do balanço material de uma região arbitrária da coluna, como mostra a figura IV.1, chega-se ao balanço de massa total:

$$L_a + V = L + V_a \quad (2)$$

E o balanço de massa para o componente a:

$$L_a x_a + V y = L x + V_a y_a \quad (3)$$

Os termos L e V representam o fluxo molar das fases líquida e vapor, respectivamente, no mesmo ponto da coluna, o mesmo ocorrendo para as concentrações x e y .

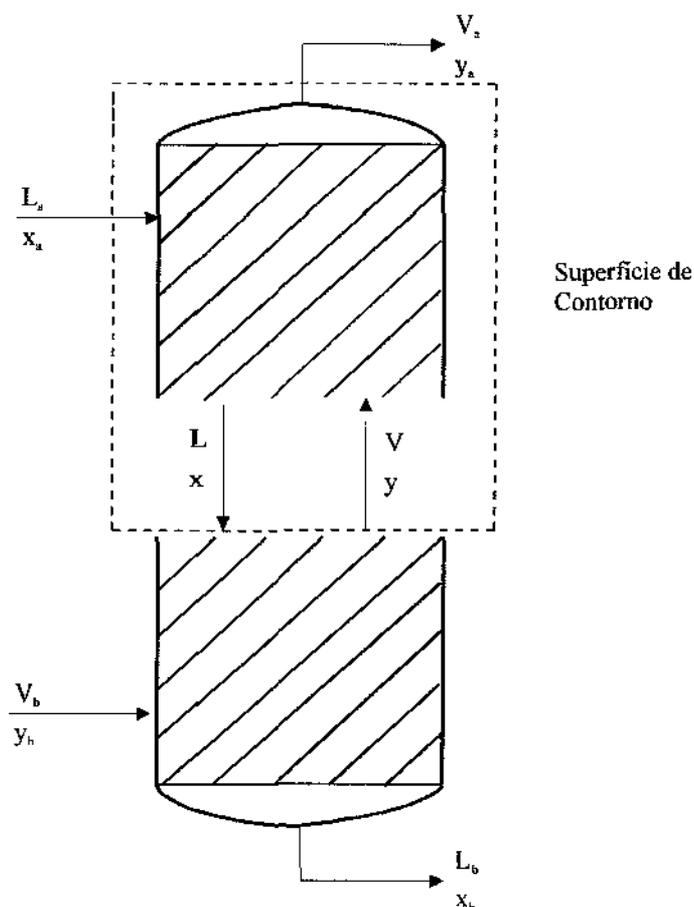


Figura IV.1 - Diagrama para o balanço material

A equação da linha de operação pode ser obtida a partir da equação (3):

$$y = \frac{L}{V}x + \frac{V_a y_a - L_a x_a}{V} \quad (4)$$

Na equação (4), x e y representam as frações molares do líquido e do vapor, respectivamente, em contato um com o outro em qualquer seção da coluna. A absorção de um componente solúvel de uma mistura gasosa faz com que o fluxo total do vapor V diminua e o de líquido L aumente. Esta mudança faz com que a linha de operação seja levemente curva.

A inclinação média da linha de operação é a razão L/V . Assim, para um dado fluxo de vapor, a redução do fluxo de líquido reduz esta inclinação.

Considerando a linha de operação ab como mostra a figura IV.2 e as concentrações x_a , y_a e y_b fixas, à medida que o fluxo de líquido L diminui, a inclinação da linha de operação também decresce, e a concentração x_b do soluto no produto de fundo aumenta. A concentração máxima x_b^* é atingida quando a linha de operação toca a curva de equilíbrio, como mostra a linha ab' da figura IV.2. Neste ponto determina-se a inclinação mínima e, assim, o fluxo mínimo de líquido. Nesta condição, é necessário uma coluna de altura infinita, pois a diferença de concentração, que promove a transferência de massa, torna-se nula no fundo da coluna. Portanto, para que haja a mudança especificada na composição do vapor, o fluxo de líquido deve ser superior ao valor mínimo encontrado.

O aumento do fluxo de solvente diminui a altura necessária para que ocorra a separação, uma vez que a força motriz para a transferência de massa ao longo da coluna, que é proporcional à distância vertical entre a linha de operação e a curva de equilíbrio, também aumenta. Entretanto, com o aumento do fluxo, o produto se torna mais diluído, o que dificulta a recuperação do soluto através de um processo de dessorção, ou “stripping”. O custo de energia desta etapa representa a maior parte do custo total da operação absorção-dessorção. Deste modo, a escolha do fluxo ideal de líquido deve ponderar os custos energéticos e de solvente.

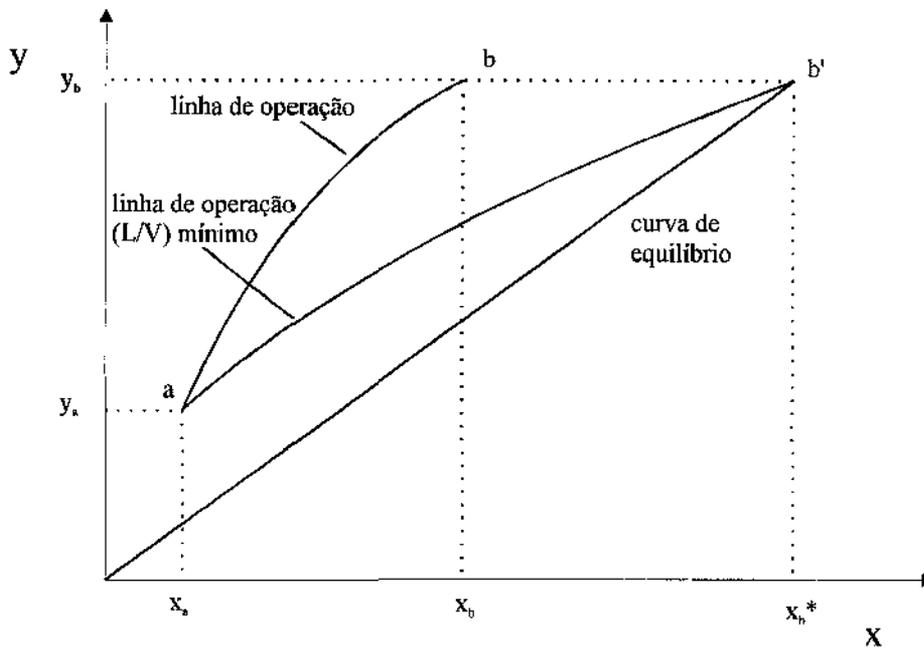


Figura IV.2 - Razão L/V limite

A inundação e a queda de pressão são dois parâmetros importantes na performance hidráulica das colunas de recheio (McNulty, 1994). Existem várias definições para inundação (Kister e Gill, 1991), mas na prática considera-se o fluxo acima daquele em que a coluna se torna ineficiente, ou seja, a sua capacidade máxima é atingida.

Vários modelos estão disponíveis para o “design” hidráulico de colunas de recheio (Kister e Gill, 1991 e Leva, 1992). Além disso, muitos fabricante de recheio dispõem de software específicos para o produto que comercializam (Hsieh et al., 1994).

Análises breves em sistemas ar-água admitem o início da inundação a uma queda de pressão de 2 in de coluna d’água por pé de altura de recheio. Para outros sistemas, a determinação da queda de pressão correspondente, ΔP_F , é obtida através da equação (5), quando os termos ρ_L e ρ_G forem expressos em lbm/ft^3 :

$$\Delta P_F = 2(\rho_L - \rho_G) / 62.2 \tag{5}$$

A queda de pressão deve variar de acordo com o tamanho e o tipo de recheio. Ainda assim, a equação (5) pode fornecer um guia prático para recheios de 1 a 2 in dispostos aleatoriamente.

Em geral, o diâmetro da coluna utilizado é aquele tal que a aproximação à inundação é igual a 0.8 ou menos, ou seja, para uma dada razão L/V , ajusta-se o diâmetro da coluna para valores de L e V de forma que se encontrem a 80 % ou menos de seus respectivos valores.

Os primeiros estudos de absorção de gases foram realizados para as colunas de recheio. Treybal (1969) apresenta uma metodologia em que as resistências à transferência de massa e de calor para a fase líquida foram levadas em conta. Posteriormente, Feintuch e Treybal (1978) apresentam uma metodologia para o projeto de colunas de recheio para sistemas multicomponentes, operando adiabaticamente.

Jaivong e Tiqian (1986) apresentam as equações para a absorção de gases em colunas de recheio, utilizando a teoria do filme com reação química irreversível de segunda ordem. É feito o estudo experimental da absorção de CO_2 em água para aplicação das equações apresentadas.

Bart e Burtscher (1994) apresentam estudos experimentais da absorção de gases ácidos contendo NO , NO_2 e SO_2 em uma solução de cromo VI em ácido sulfúrico. A absorção é acompanhada de reação química, produzindo os respectivos ácidos (HNO_3 e H_2SO_4) que são de interesse econômico. O cromo da solução é reutilizado através de uma célula eletrolítica de diafragma, em que a solução de lavagem é regenerada com alta eficiência. Neste processo, nenhum produto químico adicional é necessário e nenhum resíduo, cuja disposição traria problemas, é produzido. Os ácidos formados são posteriormente separados através da destilação em batelada.

Rascol et al.(1986) apresentam um modelo que representa o comportamento da transferência de massa na absorção de CO_2 e H_2S em solução de metil dietano amina (MDEA) e dietano amina (DEA) em colunas de recheio. A teoria do filme é usada para descrever a transferência de massa na fase líquida. Os autores mostram que com o aumento da preocupação com o meio-ambiente, o tratamento de gases torna-se cada vez mais importante.

Wiesner et al. (1996) apresentam a modelagem de uma absorção multicomponente seguida de reação química, para colunas de recheio. Óxidos de nitrogênio (NO_x), provenientes de efluentes gasosos de plantas químicas, são absorvidos em água ou em soluções de ácido nítrico diluídas, produzindo ácido nítrico. Os autores mostram um processo em que há uma combinação entre os interesses econômicos e os ecológicos.

IV.4 COLUNAS DE PRATOS

São poucos os casos de estudos de absorção de gases em colunas de pratos encontrados na literatura.

Coggan e Bourne (1969 a) mostram os efeitos de calor existentes em um processo de absorção em colunas de pratos:

- a) calor liberado pela absorção do soluto;
- b) calor transferido através das paredes da coluna e para a serpentina de refrigeração, causado pela diferença de temperatura entre o sistema gás/líquido e as vizinhanças;
- c) calor absorvido (ou liberado) causado pela evaporação (ou condensação) do solvente.

Posteriormente, em outro trabalho (1974 a), é apresentado mais um efeito de calor existente no processo de absorção:

d) calor sensível transferido pelo contato direto entre as fases líquida e vapor.

O fator b) pode ser suprimido retirando-se as serpentinas de refrigeração e aplicando revestimentos, de tal forma que a absorção ocorre sob condições adiabáticas. Trata-se de uma questão econômica decidir entre uma coluna de absorção adiabática e uma coluna isotérmica, a qual possui menos estágios mas necessita de resfriamento.

O fator a) e o fator d) são fatores sempre presentes em processos de absorção de gases. O fator c) encontra-se presente apenas no caso de utilização de solvente volátil. Tal efeito ajuda a absorção, limitando o aumento de temperatura em uma coluna adiabática.

Coggan e Bourne (1969 b) mostram, a partir do estudo de absorção nos sistemas metanol-ar-água e amônia-ar-água, que as colunas de pratos não devem ser projetadas antes de uma investigação nas variáveis pressão da coluna, razão L/G e o número de resfriadores. Como exemplo, é citado que é possível absorver mais metanol em uma coluna de 12 estágios com uma razão L/G igual a 0.25, do que em uma coluna de 100 estágios até com uma razão L/G duas vezes maior, simplesmente operando à pressão de 3 atmosferas e instalando 3 resfriadores.

Bourne et al.(1974 a) apresentam um método de simulação dinâmica em que o processo é descrito por equações diferenciais que expressam a taxa de variação da composição e da entalpia em cada estágio. A simulação é feita no estado não-estacionário e para resolução das equações diferenciais não-lineares é utilizado o método de Runge-Kutta de 4ª. ordem.

O trabalho mostra o perfil de temperatura na coluna para o sistema ar-amônia-água em uma coluna adiabática com 5 pratos, considerando todos os efeitos de calor. O máximo de temperatura, resultante do calor transferido da fase líquida para a fase vapor, predomina na parte inferior da coluna e produz um resfriamento do líquido. Esta transferência ocorre em parte como calor sensível, mostrado pelo aquecimento do gás, mas em maior extensão através da evaporação do solvente. Na parte superior da coluna, entretanto, esta transferência de calor é revertida. O gás transfere calor sensível para o líquido, condensando a água e diminuindo assim a sua temperatura.

Naphtali e Sandholm (1971) apresentam uma metodologia utilizada para colunas de destilação, em que as equações de conservação da massa e de energia e as relações de equilíbrio são agrupadas por estágios e então linearizadas. As equações são tomadas no estado estacionário e são resolvidas simultaneamente. É utilizado o método de Newton-Raphson para resolução do conjunto de equações não-lineares.

Segundo os autores, o método também é aplicável para as colunas de absorção de pratos, realizando apenas algumas modificações.

Este método envolve o cálculo das derivadas parciais de todas as funções em relação às variáveis nos pratos $n-1$, n e $n+1$. Deste modo, é necessário o cálculo das derivadas das entalpias das fases líquida e vapor, derivada da pressão de vapor, derivada do coeficiente de fugacidade e derivada do coeficiente de atividade. Quando as expressões são simples, a derivada é calculada analiticamente, porém, em expressões mais complicadas, a derivada é calculada numericamente. Este método requer a manipulação de um grande número de matrizes para a resolução do sistema.

Fredenslund et al. (1977) apresentam um exemplo da aplicação do método anteriormente descrito para colunas de destilação. Neste exemplo, são utilizados o

modelo UNIQUAC para o cálculo do coeficiente de atividade, a equação virial para o cálculo do coeficiente de fugacidade e a equação de Antoine para o cálculo da pressão de vapor. Para a entalpia das fase líquida e vapor é apresentada uma equação quadrática em relação à temperatura, porém o autor não menciona a origem da mesma e nem a origem dos parâmetros utilizados para os exemplos mostrados.

Shoda (1996) apresenta um estudo sobre a absorção de gases utilizando o simulador comercial HYSIM para o sistema metano-etano-propano-butano-pentano utilizando o n-dodecano, o n-decano ou a água como solvente. É apresentada a influência na otimização da coluna da variação do número de estágios, da temperatura do solvente e do fluxo molar do solvente. Também é apresentado o comportamento do perfil de temperatura obtido ao se variar os componentes da fase gasosa. São realizadas simulações utilizando componentes mais leves (metano, etano e propano) ou componentes mais pesados (butano e pentano) na mistura gasosa.

Vegini e Gontarski (1996) apresentam um estudo sobre a absorção de gases utilizando o simulador comercial ASPEN. Para diferentes misturas gasosas, desde as mais leves (metano, etano e propano) até as mais pesadas (propano, butano e pentano) , utilizando como solvente o n-dodecano, é apresentado o perfil de temperatura e o perfil de cada componente nas fases líquida e vapor, ao longo da coluna. Nas simulações são apresentados resultados utilizando modelos diferentes para o cálculo dos coeficientes de fugacidade e de atividade (equação de estado Peng-Robson para ambas as fases ou modelo UNIQUAC para a fase líquida e Gás Ideal para a fase vapor).

Bourne et al.(1974 b) apresentam resultados experimentais de absorção de gases em colunas de pratos, para o sistema ar-amônia-água. As condições utilizadas nos experimentos incluem concentração gasosa de 0 a 12 % de NH_3 , umidade da alimentação gasosa de 0 a 80 % e número de pratos variando entre 5 e 11. Os

resultados são comparados com o método proposto pelos autores em que são considerados todos os efeitos de calor no sistema.

Os autores afirmam que os vários efeitos de calor tornam a absorção um processo complexo, o qual não pode ser avaliado quantitativamente por métodos simples. Os perfis de temperaturas em um coluna de pratos podem se tornar irregulares, dependendo das condições de operação empregadas. A evaporação do solvente mostra uma regra importante na determinação dos perfis e das capacidades de uma coluna de pratos. Por exemplo, usando água à temperatura ambiente, não é realístico negligenciar a sua evaporação dentro da coluna. Este efeito de calor é muito mais importante do que a transferência de calor sensível entre as fases.

IV.5 RELAÇÃO ENTRE A MODELAGEM DE UMA COLUNA DE PRATOS E UMA COLUNA DE RECHEIO

Um método simples para projetar colunas de recheio ignora as diferenças entre o contato numa coluna de pratos e numa coluna de recheio. Neste método, inicialmente é determinado o número de pratos teóricos necessários para efetuar a separação desejada. Este número de pratos é então multiplicado pela altura equivalente de um prato teórico (HETP), obtendo-se a altura do recheio desejada. A HETP deve ser determinada experimentalmente pois depende do tipo e tamanho do recheio, dos fluxos de cada componente, das composições e das propriedades físicas das duas fases.

A grande importância da absorção e da dessorção como técnicas de separação industrial faz com que estas venham sendo largamente estudadas. Muitas destas operações, tais como a absorção de SO_2 em ácido sulfúrico, a absorção de cloro em água, a absorção de amônia em água e etc., tão importantes para a indústria química e que apresentam a ocorrência simultânea de liberação de calor durante a absorção, ainda não dispõe de um método rigoroso para projeto.

Bassyoni et al.(1970), McDaniel et al.(1970) e Rubac et al.(1969) contornaram o problema de projeto através de uma analogia com equipamentos em estágios. Uma coluna recheada é na realidade um equipamento de contato contínuo de maneira que a modelagem do fenômeno é mais representativa se feita através de balanço no elemento diferencial. Isto não foi realizado de forma rigorosa até 1968 quando Treybal (1969) propôs um método, o qual foi aplicado por Feintuch e Treybal (1978) e Raal e Khurana (1973). Antes disto, só se tem conhecimento de métodos empíricos e aproximados.

Feituch (1973) comparou alturas calculadas de recheio com valores experimentais de literatura e obteve, para diversos sistemas, alturas sempre inferiores às experimentais, com subdimensionamento de até 50 %. Raal e Khurana (1973) compararam recuperações de soluto e perfis de temperatura com valores por eles obtidos experimentalmente, para absorção de amônia do ar usando água como solvente e obtiveram diferenças substanciais, principalmente para altas vazões de solvente. Os autores diminuíram estas diferenças através de um aumento arbitrário da correlação de Shulman et al. (1955), especificamente para altas velocidades superficiais da fase líquida, sendo portanto uma sugestão insatisfatória, pois o trabalho de Shulman é bem fundamentado com vasto estudo experimental.

IV.6 CONCLUSÕES

Poucos trabalhos têm sido encontrados na literatura em relação à modelagem e simulação de colunas de absorção de pratos. O processo de destilação, apesar de possuir modelagem semelhante, é mais intensamente estudado. No entanto, as crescentes preocupações e as regulamentações ambientais têm feito crescer a importância e o interesse pela remoção seletiva de certos componentes em emissões gasosas.

Tendo em vista a existência de uma metodologia desenvolvida para colunas de destilação e aplicável para colunas de pratos, porém não disponível na literatura publicada, este trabalho faz a modelagem e a simulação de uma coluna de absorção de pratos, utilizando esta metodologia.

Algumas alterações na metodologia original são propostas, entre elas, a utilização de equações apropriadas para o cálculo das entalpias das fases líquida e vapor, a utilização de um método numérico em que não é necessário o cálculo analítico das derivadas de todas as funções inerentes ao processo físico (entalpias, pressão de vapor, coeficiente de fugacidade e coeficiente de atividade) e a possibilidade de alternativas de cálculo para os coeficientes de atividade e de fugacidade.

Além disso, é desenvolvido um programa para a realização dos cálculos de forma interativa, possibilitando a manipulação direta dos arquivos de dados e de resultados, sem necessidade de um programa auxiliar para a visualização destes arquivos.

CAPÍTULO V

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS

V.1 EQUAÇÕES PARA MODELAGEM DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS

Segundo Perry e Chilton (1980), os processos de transferência de energia e de massa numa coluna real de destilação são muito complicados para que se possa utilizar um modelo direto. Esta dificuldade é evitada com a introdução do conceito de estágio de equilíbrio. Pelo modelo de estágios de equilíbrio, as correntes de líquido e vapor que deixam um estágio de equilíbrio estão em completo equilíbrio uma com a outra, e se pode usar as relações termodinâmicas para determinar as concentrações nas duas correntes. A coluna hipotética composta por estágios de equilíbrio (ou pratos teóricos) em vez de pratos ou bandejas de borbulhamento realmente existentes é projetada para efetuar a separação especificada para a coluna real. Este conceito também é aplicado às colunas de absorção.

Recentemente, no entanto, Pescarini e Maciel (1996) desenvolveram o software DISNON que calcula as colunas de destilação segundo o modelo de estágios de não equilíbrio.

Krishnamurthy e Taylor (1985) descreveram o modelo de estágios de não equilíbrio para operação de absorção em estado estacionário. Em 1986, eles simularam a absorção da amônia em água, absorção de gases ácidos utilizando metanol resfriado como solvente e um processo em que um óleo de hidrocarboneto pesado é utilizado para absorver uma mistura de hidrocarbonetos leves.

Sivasubramanian et al. (1987) estudaram a absorção de gases ácidos utilizando metanol em uma coluna de recheio.

Grottoli et al. (1991) também descreveram uma modelagem de estágios de não equilíbrio aplicada à absorção no estado estacionário e aplicaram na simulação de dois casos: a recuperação de 96 % do benzeno contido em uma corrente gasosa utilizando um óleo de hidrocarbonetos e a absorção das frações mais pesadas de uma mistura gasosa de hidrocarbonetos utilizando uma corrente líquida de um óleo de hidrocarbonetos.

Kooijman e Taylor (1995) descreveram a simulação dinâmica de uma operação de absorção utilizando a modelagem de estágios de não equilíbrio.

No Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS) do DPQ/FEQ/UNICAMP todas estas modelagens de não equilíbrio estão em andamento, uma vez que demonstram ser uma grande alternativa para sobrepor os problemas na modelagem, segundo o conceito de estágios de equilíbrio.

Naphtali e Sandholm (1971) apresentam as equações que descrevem a destilação multicomponente em estado estacionário. As mesmas equações podem ser utilizadas para uma coluna de absorção (Maciel e Silveira, 1993), com as seguintes modificações: retirada do condensador e do refeedor, alimentação do vapor na base da coluna (estágio 1), alimentação do líquido no topo da coluna (estágio N) e ausência de saídas laterais.

Para o desenvolvimento da modelagem, proveniente em grande parte do trabalho de Fredenslund (1977), foram tomadas as seguintes considerações:

- Regime permanente;
- Balanços macroscópicos;
- Desvio da idealidade nos pratos dada pela eficiência de Murphree;

- Coeficiente de fugacidade do componente na fase gasosa calculado pela equação do virial;
- Coeficiente de atividade do componente na fase líquida calculado pelo modelo UNIQUAC ou pela equação de Scatchard & Hildebrand;
- Entalpia de vaporização calculada pela fórmula de Riedel, em contraste com o valor constante utilizado na referência;
- Entalpia das fases líquida e vapor calculada através de equações diferentes da utilizada na referência (vide itens V.2.4 e V.2.5);
- Pressão de vapor do componente calculada pela Equação de Antoine.

Um estágio arbitrário n é esquematizado na figura V.1.

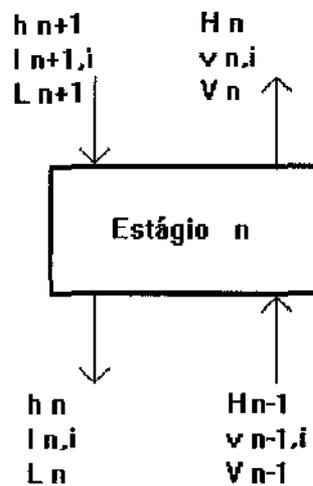


Figura V.1 - Esquema de um estágio arbitrário n

Onde: V : fluxo total da fase vapor
 L : fluxo total da fase líquida
 v : fluxo do componente na fase vapor

l : fluxo do componente na fase líquida

H : entalpia da fase vapor

h : entalpia da fase líquida

n : estágio

i : componente

Assim, para um estágio n , em estado estacionário, tem-se que:

Balanco de massa para o componente i :

$$F_1(n,i) = l_{n,i} + v_{n,i} - v_{n-1,i} - l_{n+1,i} = 0 \quad (6)$$

Balanco de energia:

$$F_2(n) = h_n + H_n - H_{n-1} - h_{n+1} = 0 \quad (7)$$

Relações de equilíbrio:

$$F_3(n,i) = \frac{\eta_{n,i} k_{n,i} V_n l_{n,i}}{L_n} - v_{n,i} + \frac{(1 - \eta_{n,i}) v_{n-1,i} V_n}{V_{n-1}} = 0 \quad (8)$$

As funções F são chamadas funções discrepância e $F_3(n,i)$ é obtido a partir da definição de Eficiência de Estágio de Murphree na fase vapor:

$$\eta_{n,i} = \frac{y_{n,i} - y_{n+1,i}}{k_{n,i} x_{n,i} - y_{n+1,i}} \quad (9)$$

ou

$$\eta_{n,i} k_{n,i} x_{n,i} - y_{n,i} + (1 - \eta_{n,i}) y_{n+1,i} = 0 \quad (10)$$

Sendo que x e y representam a fração molar dos componentes nas fases vapor e líquida, respectivamente. Em termos das variáveis da Figura V.1, a equação anterior torna-se:

$$\frac{\eta_{n,i} k_{n,i} l_{n,i}}{L_n} - \frac{v_{n,i}}{V_n} + \frac{(1-\eta_{n,i}) v_{n+1,i}}{V_{n+1}} = 0 \quad (11)$$

Multiplicando-se cada termo da equação acima por V_n , chega-se à equação (8).

O termo $k_{n,i}$ representa a constante de equilíbrio termodinâmico, sendo definido como a razão entre a composição de um componente na fase vapor e a composição deste mesmo componente na fase líquida, ou seja:

$$k_{n,i} = \left(\frac{y_i}{x_i} \right)_n \quad (12)$$

Nas equações (6), (7) e (8), as variáveis de interesse são $l_{n,i}$, $v_{n,i}$ e T_n . Porém, na equação (8) a constante de equilíbrio não pode ser calculada, pois a mesma é obtida a partir das frações molares das fases líquidas e vapor (ou seja, x_i e y_i). Através da definição do conceito de equilíbrio termodinâmico, é possível calcular a constante de equilíbrio a partir de outras variáveis, o que será visto a seguir.

V.1.1 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR

Em uma mistura líquida (Reid et al., 1987), na temperatura T e na pressão P , em equilíbrio com uma mistura vapor na mesma temperatura e pressão, a condição de equilíbrio termodinâmico, para cada componente i da mistura, é dada por:

$$f_i^L = f_i^V \quad (13)$$

A fugacidade de um componente na mistura depende da temperatura e da composição desta mistura. Para a fase vapor a composição é geralmente expressa pela fração molar y . Para relacionar f_i^v com a temperatura, pressão e fração molar, é introduzido o coeficiente de fugacidade :

$$\phi_i = \frac{f_i^v}{y_i P} \quad (14)$$

O coeficiente de fugacidade pode ser calculado a partir de dados P-V-T, usando uma equação de estado. Para uma mistura de gases ideais $\phi_i = 1$.

O coeficiente de fugacidade de um componente depende da temperatura, da pressão e, em uma mistura multicomponente, de todas as frações molares da fase vapor, não somente da fração molar do componente i . O coeficiente de fugacidade é, por definição, normalizado de tal modo que quando a pressão tende a zero, o coeficiente de fugacidade tende a 1, para todos os componentes. Para baixas pressões, igualar o coeficiente de fugacidade a 1 pode ser uma boa aproximação. Mas o que significa uma “baixa pressão”? Para misturas típicas de fluidos não-polares (ou fracamente polares), em uma temperatura próxima ou acima da temperatura normal de ebulição do componente menos volátil, uma baixa pressão pode ser algumas atmosferas. Entretanto, para misturas contendo ácidos carboxílicos fortemente associados, por exemplo ácido acético - água a 25 °C, os coeficientes de fugacidade podem diferir apreciavelmente da unidade, para pressões menores que 1 atmosfera. Para misturas contendo um componente de volatilidade muito baixa e outro de volatilidade alta, por exemplo decano-metano a 25 °C, o coeficiente de fugacidade do componente leve pode estar próximo de 1 para pressões de 10 a 20 atmosferas, enquanto que na mesma pressão, o coeficiente de fugacidade do componente pesado é tipicamente muito menor que a unidade.

A fugacidade do componente i na fase líquida é relatada à composição daquela fase através do coeficiente de atividade γ_i . A princípio, qualquer escala de composição pode ser usada, como molaridade, molalidade ou fração volumétrica, entretanto, para soluções típicas contendo não-eletrólitos de peso molecular normal (incluindo água), é mais usual medir a concentração em fração molar (x). O coeficiente de atividade γ_i é relacionado com x_i e com a fugacidade no estado padrão f_i^0 por:

$$\gamma_i = \frac{a_i}{x_i} = \frac{f_i^L}{x_i f_i^0} \quad (15)$$

O termo a_i representa a atividade e a fugacidade no estado padrão f_i^0 é a fugacidade do componente i na temperatura do sistema e em uma arbitrária composição e pressão. A escolha da pressão e da composição do estado padrão é escolhida por conveniência, mas é importante ter em mente que os valores numéricos de γ_i e a_i não possuem significado, a menos que f_i^0 seja claramente especificado.

Os coeficientes de atividade para a maioria das soluções de não-eletrólitos são baseados em um estado padrão onde, para cada componente i , f_i^0 é a fugacidade do puro líquido i na temperatura e pressão do sistema; isto é, a pressão arbitrariamente escolhida é a pressão total P e a composição arbitrariamente escolhida é $x_i = 1$. Frequentemente, este estado padrão refere-se a um estado hipotético, pois pode acontecer de um componente i fisicamente não existir como puro líquido na temperatura e pressão do sistema. Felizmente, para a maioria das misturas, é possível calcular a fugacidade no estado padrão por extrapolação com respeito à pressão; e, desde que as propriedades da fase líquida distante da região crítica não sejam sensíveis à pressão (exceto para altas pressões), tal extrapolação produz pequenos erros.

Sempre que a fugacidade no estado padrão é aquela do líquido puro na temperatura e pressão do sistema, o coeficiente de atividade tende a 1 quando a fração molar do componente i tende a 1.

Para o cálculo da fugacidade de um líquido puro em uma temperatura e pressão, é necessário duas propriedades termodinâmicas: a pressão de vapor, a qual depende somente da temperatura, e a densidade do líquido, a qual depende preliminarmente da temperatura e em menor extensão da pressão. A menos que a pressão seja muito alta, a pressão de vapor é a mais importante dessas duas propriedades. Além disso, são necessários dados volumétricos (equações de estado) para o vapor puro i na temperatura do sistema, mas a menos que a pressão de vapor seja alta ou haja dimerização na fase vapor, esta necessidade é de pequena importância, podendo ser negligenciada.

A fugacidade do líquido puro i na temperatura T e na pressão P é dada por:

$$f_i^0(T, P, x_i = 1) = P_{vp, i}(T) \phi_i^s(T) \exp \int_{P_{vp, i}}^P \frac{V_i^L(T, P)}{RT} dP \quad (16)$$

$P_{vp, i}$ é a pressão de vapor do componente i e o superscrito s significa saturação. O coeficiente de fugacidade de saturação ϕ_i^s é calculado a partir de dados volumétricos da fase vapor, para fluidos não-associados. Para temperaturas bem abaixo da crítica, aproxima-se da unidade.

O volume molar do líquido V_i^L é a razão entre o peso molecular e a densidade (massa/volume). Em temperaturas bem abaixo da crítica, o líquido é quase incompressível. Neste caso, o efeito da pressão na fugacidade da fase líquida é pequeno (a menos que a pressão seja muito alta ou que a temperatura seja muito baixa). O termo exponencial na equação (16) é chamado Fator de Poynting (FP).

A equação (13) dá uma relação fundamental rigorosa para o equilíbrio líquido vapor. Substituindo (14), (15) e (16) em (13) temos:

$$y_i P \phi_i = \gamma_i x_i P_{vp, i} \phi_i^s \exp \int_{P_{vp, i}}^P \frac{V_i^L}{RT} dP \quad (17)$$

O lado esquerdo da equação (17) representa a fugacidade do componente i na fase vapor e o lado direito representa a fugacidade do componente i na fase líquida:

$$f_i^v = y_i P \phi_i \quad (18)$$

$$f_i^l = \gamma_i x_i P_{vp, i} \phi_i^s (FP) \quad (19)$$

Supondo que a pressão do sistema seja baixa e que as pressões de saturação dos componentes do sistema estejam próximas da pressão do sistema, podemos simplificar a equação (17):

$$y_i P \phi_i = \gamma_i x_i P_{vp, i} \quad (20)$$

Substituindo (20) em (12) tem-se:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i P_{vp, i}}{\phi_i P} \quad (21)$$

Portanto, a constante de equilíbrio termodinâmico pode ser calculada a partir do conhecimento do coeficiente de fugacidade, do coeficiente de atividade e da pressão de vapor de cada componente e da pressão total do sistema.

Para componentes não-condensáveis (supercríticos), tem-se:

$$f_i^L = x_i \gamma_i^* H_{i, sol} \exp \left[\frac{\overline{V}_i^L (P - P_{sol}^s)}{R T} \right] \quad (22)$$

Onde $H_{i, sol}$ é a constante de Henry para o componente i no solvente sol , γ_i^* é o coeficiente de atividade do componente i normalizado assimetricamente (ou seja, o coeficiente de atividade tende a 1 quando a fração molar do componente i tende a 0), \overline{V}_i^L é o volume parcial molar do componente i na fase líquida e P_{sol}^s é a pressão de saturação do solvente.

Em absorção, normalmente a solubilidade é muito pequena ($x_i \ll 1$), tendo-se:

$$\gamma_i^* \exp \left[\frac{\overline{V}_i^L (P - P_{sol}^s)}{R T} \right] = 1 \quad (23)$$

que resulta na lei de Henry:

$$f_i^L = x_i H_{i, sol} \quad (24)$$

Em Perry e Chilton (1980) são apresentadas várias referências onde podem ser encontrados dados de equilíbrio necessários nos cálculos de colunas de absorção.

As propriedades físicas mais importantes necessárias para o design de colunas de absorção são os dados de equilíbrio líquido-vapor. Os dados de equilíbrio necessários para os cálculos incluem a solubilidade do gás no solvente. Para que a solubilidade seja completamente definida, os dados devem indicar a

temperatura, a concentração do gás na fase líquida, a pressão do gás na fase vapor e a pressão total do sistema.

Os dados de equilíbrio são apresentados de várias maneiras. Frequentemente a solubilidade do gás no líquido é dada em termos da constante da lei de Henry. Considera-se, neste caso, que a solubilidade do gás no líquido é diretamente proporcional à sua pressão parcial na fase vapor, tal que:

$$p_A = H x_A \quad (25)$$

Onde: p_A = pressão parcial do componente A na fase vapor

x_A = fração molar do componente A na fase líquida

H = constante de Henry

Onde vale a lei de Henry, a solubilidade é definida mediante a constante da lei e a temperatura. H é função da temperatura mas é relativamente independente da pressão do sistema quando esta tem valores baixos e moderados (onde a lei de Henry se aplica). A constante H para muitos gases e solventes é publicada na literatura.

Ocasionalmente o equilíbrio líquido-vapor pode ser dado pela lei de Raoult:

$$p_A = P_A x_A \quad (26)$$

Onde: P_A = pressão de vapor do componente A puro

Esta relação aplica-se a soluções ideais onde não existam interações entre o material dissolvido e o solvente. É necessário, no entanto, ter um grande cuidado em usar as pressões de vapor dos componentes puros para estimar o comportamento do gás na absorção. A não idealidade da fase líquida e da fase vapor podem provocar

desvios significativos em relação às previsões baseadas nas pressões de vapor dos componentes puros combinados com a lei de Raoult.

A lei de Henry vale para muitos gases quando a pressão parcial do gás é menor que 1 atm. Quando as pressões parciais são superiores a 1 atm, a constante H raramente independe da pressão parcial. Neste caso, H varia com a pressão parcial, e um dado valor vale apenas sobre uma faixa estreita de pressões

V.1.2 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR A ALTAS PRESSÕES

O cálculo do equilíbrio líquido-vapor para pressões altas é bastante diferente do cálculo realizado para pressões baixas e moderadas devido a várias razões.

O efeito da pressão nas propriedades da fase líquida é significativo somente a altas pressões. A pressões baixas e moderadas este efeito pode ser negligenciado ou aproximado. Uma aproximação comum é assumir que a fugacidade do líquido dependa da pressão (através do fator de Poynting), mas que o coeficiente de atividade seja independente da pressão a uma dada temperatura e composição. Tem-se:

$$\left[\frac{\partial \ln \gamma}{\partial P} \right]_{T,x} = \frac{\overline{V}_i^L - V_i^L}{R T} \quad (27)$$

Então, a consideração de que o coeficiente de atividade é independente da pressão é equivalente a assumir que na fase líquida, o volume parcial molar do componente i é igual ao volume molar do componente i puro. A altas pressões, especialmente na região crítica, esta consideração pode levar a sérios erros.

O coeficiente de fugacidade do componente i na fase vapor deve ser determinado a partir de equações de estado válida para altas pressões. Em contraste,

para pressões baixas e moderadas, pode-se utilizar a equação virial truncada no segundo termo.

Uma equação de estado, aplicável a todas as fases fluidas, é particularmente útil para o equilíbrio de fases quando a fase líquida e a fase vapor coexistem a altas pressões. Quando um dos componentes da mistura é supercrítico (ou seja, a temperatura do sistema é superior à temperatura crítica do componente), o coeficiente de atividade convencional não é útil, pois deve-se empregar estados padrões especiais para o coeficiente de atividade do componente supercrítico. Esta complicação é evitada quando todas as fugacidades são calculadas a partir de uma equação de estado.

V.2 PROPRIEDADES NECESSÁRIAS PARA A SIMULAÇÃO

V.2.1 PRESSÃO DE VAPOR

V.2.1.1 EQUAÇÃO DE ANTOINE

A pressão de vapor do componente i pode ser calculada através da Equação de Antoine (Reid et al., 1977):

$$P_{vp, i} = \exp\left(A - \frac{B}{T + C}\right) \quad (28)$$

Nesta equação, os parâmetros A , B e C de cada componente encontram-se tabelados em Reid et al.(1977), a temperatura é dada em Kelvin e a pressão de vapor é calculada em mmHg.

A faixa de temperatura em que esta equação é aplicável não é muito grande e, na maioria das vezes, corresponde a intervalos de pressão entre 0.01 e 2.0 bar. Para a água, por exemplo, a equação é válida para temperaturas no intervalo de 284 a 441 Kelvin.

V.2.2 COEFICIENTE DE FUGACIDADE

V.2.2.1 EQUAÇÃO VIRIAL

O coeficiente de fugacidade do componente i é determinado através da equação de estado virial (Smith e Van Ness, 1980):

$$\varphi_i = \exp\left(\frac{P}{RT} \left[B_{ii} + \frac{1}{2} \sum_j \sum_k \{y_j y_k (2\delta_{ji} - \delta_{jk})\} \right]\right) \quad (29)$$

$$\text{onde } \delta_{ji} = 2B_{ji} - B_{jj} - B_{ii} \quad (30)$$

$$\delta_{jk} = 2B_{jk} - B_{jj} - B_{kk} \quad (31)$$

$$B_{ij} = \frac{RT_{cij}}{P_{cij}} (B^0 + \omega_{i,j} B^1) \quad (32)$$

$$T_{cij} = \sqrt{T_{ci} T_{cj}} \quad (33)$$

$$P_{cij} = \frac{Z_{cij} RT_{cij}}{V_{cij}} \quad (34)$$

$$Z_{cij} = \frac{Z_{ci} + Z_{cj}}{2} \quad (35)$$

$$B^0 = 0.083 - \frac{0.422}{T_R^{1.6}} \quad (36)$$

$$B^1 = 0.139 - \frac{0.272}{T_R^{4.2}} \quad (37)$$

$$T_R = \frac{T}{T_{cij}} \quad (38)$$

Os parâmetros críticos de cada componente são obtidos em Reid et al.(1987), o valor da constante dos gases ideais (R) utilizada é igual a 82.05 cm³ atm/mol K, a temperatura T é dada em Kelvin e a pressão P em atm.

V.2.3 COEFICIENTE DE ATIVIDADE

V.2.3.1 MODELO UNIQUAC

O coeficiente de atividade de um componente i na fase líquida pode ser calculado através do modelo UNIQUAC (Fredenslund et al., 1977).

Por este modelo, a expressão para o coeficiente de atividade contém duas partes: a parte combinatorial (que leva em conta as diferenças no tamanho e na

forma das moléculas da mistura) e a parte residual (devido às interações energéticas). Portanto:

$$\ln \gamma_k = \ln \gamma_k^C + \ln \gamma_k^R \quad (39)$$

A contribuição combinatorial é dada pela seguinte expressão:

$$\ln \gamma_k^C = \ln \frac{\phi_k}{x_k} + 5q_k \ln \frac{\theta_k}{\phi_k} + l_k - \frac{\phi_k}{x_k} \sum_j x_j l_j \quad (40)$$

$$\text{onde: } l_k = 5(r_k - q_k) - (r_k - 1) \quad (41)$$

$$\theta_k = \frac{q_k x_k}{\sum_j q_j x_j} \quad (\text{fração de volume}) \quad (42)$$

$$\phi_k = \frac{r_k x_k}{\sum_j r_j x_j} \quad (\text{fração de superfície}) \quad (43)$$

As constantes r_k e q_k de cada componente puro são, respectivamente, as medidas do volume molecular de van der Waals e da área superficial molecular.

A contribuição residual é dada pela seguinte expressão:

$$\ln \gamma_k^R = q_k \left[1 - \ln \left(\sum_j \theta_j \tau_{jk} \right) - \sum_j \left(\frac{\theta_j \tau_{kj}}{\sum_i \theta_i \tau_{ii}} \right) \right] \quad (44)$$

$$\text{onde: } \tau_{ji} = \exp \left[-\frac{u_{ji} - u_{ii}}{RT} \right] \quad (45)$$

Os parâmetros $(u_{ji} - u_{ii})$ são obtidos a partir de dados binários experimentais.

A dependência do parâmetro τ_{ji} com a temperatura é linearizada da seguinte forma:

$$\tau_{ji} = A_{ji}^{(0)} + A_{ji}^{(1)}T \quad (46)$$

V.2.3.2 MÉTODO UNIFAC PARA O CÁLCULO DOS PARÂMETROS UNQUAC

As propriedades termodinâmicas de misturas líquidas podem ser estimadas a partir da contribuição de grupos (Fredenslund et al., 1977).

O objetivo básico de um método de contribuição de grupos consiste em utilizar dados de equilíbrio de fases existentes para prever o equilíbrio de fase de sistemas que não possuem dados disponíveis. O método pressupõe que: uma reduzida quantidade de dados de coeficiente de atividade, obtidos experimentalmente, são utilizados para obter parâmetros que caracterizam as interações entre pares de grupos estruturais em sistemas de não-eletrólitos. E esses parâmetros são utilizados para prever o coeficiente de atividade de outros sistemas que não tenham sido estudados experimentalmente mas contém os mesmos grupos funcionais. Um “grupo” é qualquer unidade estrutural conveniente, como por exemplo $-\text{CH}_3$, $-\text{COCH}_2$ e $-\text{CH}_2\text{Cl}$.

As suposições fundamentais dos métodos de contribuição de grupos são:

1 - O logaritmo do coeficiente de atividade é dado pela soma de duas contribuições: uma parte combinatorial e uma parte residual.

Para a molécula i em qualquer solução:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (47)$$

2 - A parte residual é dada pela soma das contribuições individuais de cada grupo do soluto na solução menos a soma das contribuições individuais de componente puro:

$$\ln \gamma_i^R = \sum_{k=1}^N \nu_k^i [\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)}] \quad (48)$$

N é o número de diferentes grupos na mistura.

O termo Γ_k representa o coeficiente de atividade residual do grupo k na solução; $\Gamma_k^{(i)}$ representa o coeficiente de atividade residual do grupo k em uma solução de referência contendo somente moléculas do tipo i; e $\nu_k^{(i)}$ é o número de grupos do tipo k na molécula i.

3 - A contribuição de um grupo individual em qualquer sistema contendo grupos dos tipos 1,2,... N é dada como função da temperatura e da fração de grupo.

A fração de grupo é definida por:

$$X_k = \frac{\sum_{i=1}^M \nu_k^{(i)} x_i}{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \nu_j^{(i)} x_i} \quad (49)$$

M = número de componentes

N = número de grupos

A mesma função é usada para representar Γ_k e $\Gamma_k^{(i)}$.

Portanto, para formular um método de contribuição de grupos específico para prever coeficiente de atividades, é necessário especificar:

- a equação usada para calcular γ_i^C .
- a equação usada para calcular Γ_k e $\Gamma_k^{(i)}$.
- a definição dos grupos funcionais usados para “construir” as moléculas.

O método UNIFAC é obtido a partir do modelo UNIQUAC com as definições anteriormente apresentadas. No método UNIFAC temos que:

1- A parte combinatorial do coeficiente de atividade é calculada da mesma maneira do modelo UNIQUAC. A parte combinatorial leva em conta as contribuições nas diferenças nos tamanhos e nas formas das moléculas. Por sua vez, estas são obtidas a partir das constantes de volume R_k e de área superficial Q_k .

2 - A parte residual é dada pela parte residual do modelo UNIQUAC, sendo a concentração substituída pela fração de grupo X_k .

3 - As constantes de volume R_k e de área superficial Q_k são obtidas a partir de dados da estrutura atômica e molecular, ou seja o volume molecular de van der Waals e a área superficial molecular:

$$R_k = \frac{V_k}{15.17} \quad \text{e} \quad Q_k = \frac{A_k}{2.5 \times 10^9} \quad (50)$$

Portanto, o coeficiente de atividade combinatorial para o grupo i é calculado por:

$$\ln \gamma_i^c = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + 5q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_{j=1}^M x_j l_j \quad (51)$$

$$\text{onde: } l_i = 5(r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (52)$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (\text{fração da área superficial molecular}) \quad (53)$$

$$\phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j} \quad (\text{fração do volume molecular}) \quad (54)$$

$j = 1, 2, \dots, M$ (número de componentes)

$$\text{Volume de van der Waals: } r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k \quad (55)$$

$$\text{Área superficial de van der Waals: } q_i = \sum_k v_k^{(i)} Q_k \quad (56)$$

$k = 1, 2, \dots, N$ (número de grupos na molécula i)

O coeficiente de atividade residual para o grupo k é dado por:

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \psi_{m k} \right) - \sum_m \left(\frac{\theta_m \psi_{k m}}{\sum_n \theta_n \psi_{n m}} \right) \right] \quad (57)$$

m e $n = 1, 2, \dots, N$ (todos os grupos)

A equação acima também é utilizada para o cálculo de $\Gamma_k^{(i)}$. Esta equação é similar àquela utilizada no modelo UNIQUAC para o cálculo de γ_i^R .

$$\theta_m = \frac{q_m X_m}{\sum_n q_n X_n} \quad (\text{fração da área superficial molecular do grupo}) \quad (58)$$

$$X_m = \frac{\sum_{i=1}^M v_m^{(i)} x_j}{\sum_{j=1}^M \sum_{n=1}^N v_n^{(i)} x_j} \quad (\text{fração de grupo}) \quad (59)$$

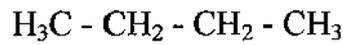
Na equação (57) o parâmetro ψ_{nm} é dado por:

$$\psi_{nm} = \exp \left(- \frac{a_{nm}}{T} \right) \quad (60)$$

Os parâmetros de grupos R_k e Q_k e os parâmetros de interação de grupos ψ_{nm} encontram-se tabelados em Fredenslund et al. (1977), para um grande número de diferentes grupos.

Portanto, para calcularmos os coeficientes de atividade dos componentes de uma mistura, a uma dada concentração e temperatura, é necessário apenas o

conhecimento dos tipos de grupos que formam as moléculas de cada componente. Por exemplo, a molécula de butano é formada por 2 grupos CH₃ e 2 grupos CH₂:



V.2.3.3 EQUAÇÃO DE SCATCHARD & HILDEBRAND

O coeficiente de atividade de um componente na fase líquida pode ser calculado através da equação de Scatchard & Hildebrand (Reid et al., 1987):

$$\gamma_k = \exp \left[\frac{V_k^L (\delta_k - \bar{\delta})^2}{RT} \right] \quad (61)$$

$$\text{onde: } \bar{\delta} = \sum_{i=1}^c \theta_i \delta_i \quad (62)$$

$$\theta_i = \frac{x_i V_i^L}{\sum_{i=1}^c x_i V_i^L} \quad (63)$$

Nas equações acima, V_k^L é o volume molar do líquido i puro na temperatura T e δ_k é o parâmetro de solubilidade. Em Borton (1983) estes parâmetros encontram-se tabelados para um grande número de componentes.

V.2.3.4 EQUAÇÃO DE PRAUSNITZ & SHAIR

De acordo com Wallas (1985), quando um gás for levemente solúvel no líquido (isto é, quando x_i tende a 0), observa-se que a fração molar do soluto é, numa dada temperatura, linearmente proporcional à sua fugacidade na fase gasosa, ou seja, as soluções são consideradas misturas homogêneas.

Em casos especiais de aplicação a processos de dissolução de gases em líquidos, assume-se que o solvente tenha pressão de vapor negligenciável e permaneça inteiramente na fase líquida. Se o gás está abaixo de sua temperatura crítica, a solubilidade pode ser representada ou predita pelos métodos convencionais apresentados pela termodinâmica do equilíbrio de fases.

Para o caso de gases acima de suas temperaturas críticas, métodos especiais foram desenvolvidos. Quando dados de solubilidade experimentais são disponíveis e os volumes molares e os parâmetros de solubilidade são conhecidos, a fugacidade efetiva do líquido superaquecido pode ser calculada a partir da equação de Scatchard & Hildebrand (Prausnitz e Shair, 1961 e Prausnitz, 1962). A correlação gráfica destes autores em termos de temperatura reduzida e a pressão crítica pode ser representada pela seguinte equação:

$$\ln \left(\frac{f_{2L}^0}{P_{C2}} \right) = 7.81 - \frac{8.06}{T_R} - 2.94 \ln T_R \quad (64)$$

onde: f_{2L}^0 = fugacidade padrão do soluto puro na fase líquida
 P_{C2} = pressão crítica do soluto
 T_R = temperatura reduzida do soluto

A equação (64) é aplicável para faixa de temperatura reduzida ente 0.7 e 2.5.

V.2.4 ENTALPIA DA FASE VAPOR

A entalpia de uma mistura vapor é obtida a partir das capacidades caloríficas a pressão zero dos componentes puros, juntamente com as correções dos efeitos de mistura e da pressão (Prausnitz et al., 1980).

Para uma mistura vapor, há um desvio da entalpia ideal que pode ser calculado a partir de uma equação de estado:

$$h^V = h^I + \Delta h \quad (65)$$

A entalpia de um componente i puro ideal na fase vapor, na temperatura T , relativa a uma temperatura de referência T_0 , é dada por:

$$h_i^I = \int_{T_0}^T C_{p_i}^0 dT \quad (66)$$

Para uma mistura vapor ideal de c componentes, a entalpia é dada por:

$$h^I = \sum_{i=1}^c y_i h_i^I \quad (67)$$

O termo $C_{p_i}^0$ é a capacidade calorífica do vapor ideal e pode ser relacionado com a temperatura pela seguinte equação (Reid et al., 1987):

$$C_{p_i}^0 = C_{p_1} + C_{p_2}T + C_{p_3}T^2 + C_{p_4}T^3 \quad (68)$$

Os termos acima são tabelados para cada componente em Reid et al.(1987) e são dados em J/mol K. A temperatura é dada em Kelvin.

Substituindo (68) em (66) e integrando, obtemos:

$$h_i^I = C_{p_1}(T - T_0) + \frac{C_{p_2}(T^2 - T_0^2)}{2} + \frac{C_{p_3}(T^3 - T_0^3)}{3} + \frac{C_{p_4}(T^4 - T_0^4)}{4} \quad (69)$$

Substituindo em (67):

$$h^I = \sum_{i=1}^c y_i \left[C_{p_1}(T - T_0) + \frac{C_{p_2}(T^2 - T_0^2)}{2} + \frac{C_{p_3}(T^3 - T_0^3)}{3} + \frac{C_{p_4}(T^4 - T_0^4)}{4} \right] \quad (70)$$

O termo Δh representa a correção de entalpia molar para a fase vapor a uma temperatura T e a uma pressão P, com relação ao vapor ideal na mesma temperatura e composição. A correção é dada por:

$$\Delta h = JP \sum_{i=1}^c \sum_{j=1}^c y_i y_j \left[B_{i,j} - T \frac{d B_{i,j}}{dT} \right] \quad (71)$$

onde J é um fator de correção apropriado (igual a 0.1013 J/cm³ atm).

O termo $B_{i,j}$ é calculado através da equação (32) e o termo $\frac{d B_{i,j}}{dT}$ é calculado numericamente a partir da derivada da mesma equação em relação à temperatura.

V.2.5 ENTALPIA DA FASE LÍQUIDA

A entalpia de uma mistura líquida é dada por (Prausnitz et al., 1980):

$$h^L = h^I + \sum_{i=1}^c x_i \overline{\Delta h}_i \quad (72)$$

O termo h^I é calculado através da equação (70), substituindo a fração molar da fase vapor pela fração molar da fase líquida.

O termo $\overline{\Delta h}_i$ representa a entalpia parcial molar do componente i e é calculada a partir de uma forma apropriada da equação de Gibbs-Helmholtz:

$$\left(\frac{\partial \ln f_i^L}{\partial T} \right)_{T,x} = - \frac{\overline{\Delta h}_i}{R T^2} \quad (73)$$

A fugacidade do componente i na fase líquida é dada pela seguinte equação:

$$f_i^L = \gamma_i x_i f_i^{(PO)} \exp\left(\frac{\bar{V}_i P}{R T}\right) \quad (74)$$

Para componentes condensáveis, $f_i^{(PO)}$ é a fugacidade do componente i puro na temperatura T , corrigido a pressão zero. Substituindo (74) em (73) e depois em (72), produz:

$$h^L = h^I - \sum_{i=1}^m x_i R T^2 \left(\frac{\partial \ln \gamma_i}{\partial T} \right)_{P,x} - \sum_{i=1}^m x_i R T^2 \left(\frac{d \ln f_i^{(PO)}}{dT} \right)_{puro} + \sum_{i=1}^m x_i P \left(\bar{V}_i - T \frac{d\bar{V}_i}{dT} \right) \quad (75)$$

Para baixas e moderadas pressões, o quarto termo da equação (75) pode ser negligenciado. O terceiro termo desta equação representa a entalpia da mistura líquida ideal (corrigida à pressão zero) relativa à entalpia do vapor ideal na mesma temperatura e composição (entalpia de vaporização). O segundo termo representa a entalpia excesso (ou entalpia de mistura da fase líquida).

A entalpia de vaporização é calculada através do método de Riedel, utilizando a fórmula de Watson (Reid et al., 1987):

$$\Delta h^{VAP} = \Delta h_B^{VAP} \left(\frac{1 - T_r}{1 - T_{B,r}} \right)^n \quad (76)$$

onde:

$$\Delta h_B^{VAP} = 1.093 R T_c \left[T_B, \frac{\ln P_c - 1.013}{0.930 - T_B} \right] \quad (77)$$

$$n = \left(0.00264 \frac{\Delta h_B^{VAP}}{RT_B} + 0.8794 \right)^{10} \quad (78)$$

A entalpia excesso é calculada a partir do modelo UNIQUAC:

$$h^E = R \frac{\sum_{i=1}^c q_i x_i \sum_{j=1}^c \theta_j \tau_{ji}}{\sum_{j=1}^c \theta_j \tau_{ji}} \quad (79)$$

$$\text{onde: } \tau_{ji} = A_{ji}^{(0)} + A_{ji}^{(1)} T \quad (80)$$

V.3 O MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

Com as equações anteriores, na forma implícita, surgem as funções denominadas discrepância, que quando anuladas indicam a resolução do sistema de equações formado.

Para a resolução do sistema de equações não-lineares, é utilizado o método de Newton-Raphson (Press et al., 1989), onde o Jacobiano é calculado numericamente. Seja um conjunto de N equações, envolvendo as variáveis x_i :

$$F_i(x_1, x_2, \dots, x_N) = 0 \quad (81)$$

Se denotarmos o vetor X como o vetor das variáveis x_i , então, nas vizinhanças de X , cada uma das funções F_i pode ser expandida em séries de Taylor:

$$F_i(X + \partial X) = F_i(X) + \sum_{j=1}^N \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \partial x_j + O(\partial X^2) \quad (82)$$

Negligenciando os termos de ordem igual e superior a 2, é obtido um conjunto de equações lineares para as correções ∂X que move cada função para perto do zero simultaneamente, denominado:

$$\sum_{j=1}^N \alpha_{i,j} \partial x_j = \beta_i \quad (83)$$

$$\text{onde: } \alpha_{i,j} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \quad \text{e} \quad \beta_i = -F_i \quad (84)$$

A equação matricial (83) pode ser resolvida pela Decomposição LU (Numerical Recipes, 1989). As correções obtidas (∂x_i) são então adicionadas ao vetor solução:

$$x_{i+1} = x_i + \partial x_i \quad (85)$$

Quando $(x_{i+1} - x_i)$ é suficientemente pequeno, o conjunto correto de valores de x é achado e a iteração acaba.

Conforme visto anteriormente, na modelagem de colunas de absorção de pratos, existem N.C equações (6), N equações (7) e N.C equações (8), ou seja, $N(2C + 1)$ equações para serem resolvidas, formando um sistema de equações não-lineares.

Em termos vetoriais, estas equações podem ser escritas da seguinte forma:

$$\bar{F}(x) = \begin{Bmatrix} \bar{F}_1 \\ \bar{F}_2 \\ \bar{F}_3 \end{Bmatrix} = \bar{0} \quad (86)$$

e

$$\bar{x} = \begin{Bmatrix} \bar{l} \\ \bar{v} \\ \bar{T} \end{Bmatrix} \quad (87)$$

O vetor \bar{l} contém todos os elementos $\bar{l}_{n,i}$, o vetor \bar{v} todos os elementos $\bar{v}_{n,i}$ e o vetor \bar{T} todos os elementos \bar{T}_n .

Sendo o vetor x_n o vetor das variáveis no estágio n e F_n o vetor das funções neste estágio, tem-se:

$$\overline{x}_n = \begin{bmatrix} l_{n,1} \\ l_{n,2} \\ \vdots \\ l_{n,c} \\ T_n \\ v_{n,1} \\ \vdots \\ v_{n,c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{n,1} \\ x_{n,2} \\ \vdots \\ x_{n,c} \\ x_{n,c+1} \\ x_{n,c+2} \\ \vdots \\ x_{n,2c+1} \end{bmatrix} \quad (88)$$

e

$$\overline{F}_n = \begin{bmatrix} F_{1n,1} \\ F_{1n,2} \\ \vdots \\ F_{1n,c} \\ F_{2c} \\ F_{3n,1} \\ F_{3n,2} \\ \vdots \\ F_{3n,c} \end{bmatrix} \quad (89)$$

A equação (89) é resolvida pelo Método de Newton-Raphson. Resolver esta equação significa achar o conjunto de valores dos vetores $\bar{l}_{n,j}$, $\bar{v}_{n,j}$ e \bar{T}_n , os quais fazem a equação (86) tornar-se igual a zero.

Com os valores de $\bar{l}_{n,j}$, $\bar{v}_{n,j}$ e \bar{T}_n conhecidos, temos as taxas e as composições dos produtos e os perfis de concentração e temperatura na coluna.

V.4 PROCEDIMENTO DE CÁLCULO PARA A SIMULAÇÃO

O programa para simulação de colunas de absorção de pratos é desenvolvido na linguagem FORTRAN. Tal programa é denominado Programa Principal (ABSORCAO.EXE) e suas etapas são descritas abaixo.

ETAPA 1: Leitura de dados.

Através de um arquivo de dados previamente gerado (WDIN.DAT) o programa lê os seguintes dados:

- Número de componentes.
- Nome dos componentes.
- Constantes que definem os modelos de coeficiente de atividade e coeficiente de fugacidade a serem utilizados nos cálculos:

tipogama: 1 \Rightarrow fase líquida ideal

2 \Rightarrow UNIQUAC c/ UNIFAC

3 \Rightarrow Scatchard & Hildebrand

tipofi: 1 \Rightarrow fase vapor ideal

2 \Rightarrow Equação virial

- Parâmetros UNIFAC (q , r , l e $A^{(0)}$ e $A^{(1)}$) para o cálculo dos coeficientes de atividade (somente se tipogama = 2).

- Parâmetros Scatchard & Hildebrand (δ e V^L) para o cálculo dos coeficientes de atividade (somente se tipogama = 3).

- Parâmetros físicos e críticos de cada componente: temperatura normal de ebulição, temperatura crítica, pressão crítica, volume molar crítico, fator de compressibilidade crítico e fator acêntrico.

- Parâmetros da equação de capacidade calorífica de cada componente. Tais parâmetros são utilizados para o cálculo das entalpias das fases líquida e vapor (Equação (70)).

- Parâmetros da equação da pressão de vapor de cada componente. Equação de Antoine (28).

- Número de estágios da coluna.

- Pressão da coluna, em atm.

- Eficiência de estágio de Murphree, para cada estágio.

- Especificações da alimentação vapor: temperatura, em °C, e fluxo molar de cada componente, em kmol/hora.

- Especificações da alimentação líquida: temperatura, em °C, e fluxo molar de cada componente, em kmol/hora.

A figura V.1 mostra um exemplo de arquivo WDIN.DAT.

ETAPA 2: Calcular as entalpias das alimentações líquida e vapor.

Subrotinas ENTVAP e ENTLIQ.

ETAPA 3 - Estimar os perfis iniciais de temperatura e fluxo dos componentes das fases líquida e vapor, em cada estágio.

Os fluxos totais e os fluxos de cada componente em cada estágio são estimados iguais aos fluxos das alimentações.

A estimativa inicial da temperatura em cada estágio é obtida a partir da distribuição em cada estágio da diferença de temperatura entre as fases líquidas e vapor dividada pelo número de estágios.

ETAPA 4 - Para cada estágio, na temperatura do estágio, calcular:

Pressão de vapor de cada componente (Subrotina PVAP);

Coefficiente de atividade de cada componente (Subrotina MQUAC);

Coefficiente de fugacidade de cada componente (Subrotina FUG);

ETAPA 5 - Para cada estágio, na temperatura do estágio, calcular:

Constante de equilíbrio K (Subrotina KFAC);

Entalpia da fase líquida (Subrotina ENTLIQ);

Entalpia da fase vapor (Subrotina ENTVAP).

ETAPA 6 - Armazenar os valores das variáveis fluxo do componente na fase vapor, fluxo do componente na fase líquida e temperatura na matriz X.

ETAPA 7 - Armazenar as funções, calculada com os valores da matriz X, na matriz FVEC.

ETAPA 8 - Resolver o conjunto de matrizes pelo método de Newton-Raphson (Subrotina NEWT).

ETAPA 9 - Trazer os valores da matriz X para as variáveis fluxo do componente na fase vapor, fluxo do componente na fase líquida e temperatura.

ETAPA 10 - Gravar os resultados em um arquivo de resultados (WDOUT).

ETAPA 11 - Fim do Programa.

Quando os cálculos dos coeficientes de atividade são feitos através do modelo UNIQUAC, os parâmetros necessários são gerados por um outro programa (também desenvolvido na linguagem FORTRAN) que é denominado Programa Auxiliar de Cálculo 1 (UNIQUAC.EXE).

Neste programa é utilizado o método UNIFAC (Fredeslund, 1977) para gerar os parâmetros UNIQUAC. As etapas deste programa são descritas abaixo:

ETAPA 1 - Entrada de Dados.

Em um arquivo denominado ARQUNIQ2.DAT, o programa lê os seguintes dados: número de componentes, número de grupos funcionais total e tipo e número de grupos funcionais presentes em cada componente.

ETAPA 2 - Calcular os parâmetros.

ETAPA 3 - Gravar os parâmetros UNIQUAC no arquivo WDIN.DAT.

ETAPA 4 - Fim do Programa.

Para o cálculo da temperatura de bolha de uma mistura líquida, a uma determinada pressão e composição, é desenvolvido outro programa na linguagem FORTRAN, denominado Programa Auxiliar de Cálculo 2 (TBOLHA.EXE).

Este programa, desenvolvido de acordo com a metodologia encontrada em Smith e Van Ness (1980), é utilizado para garantir que a alimentação líquida encontra-se abaixo de sua temperatura de bolha (ou seja, alimentação do topo constituída 100 % de líquido).

V.5 GERENCIAMENTO INTERATIVO DE ARQUIVOS

Devido à grande dificuldade na manipulação dos arquivos de dados e de resultados utilizados nos programas desenvolvidos na linguagem FORTRAN (arquivos WDIN.DAT, ARQUNIQ2.DAT, e WDOUT), é desenvolvido um programa na linguagem VISUAL BASIC, que permite a manipulação direta destes arquivos.

Tal programa é denominado Programa Auxiliar (COLUNA.EXE) e permite a alteração simultânea e imediata, visualizada na janela, dos seguintes dados: componentes, composição e fluxo molar das alimentações líquida e vapor, temperatura das alimentações líquida e vapor, pressão da coluna, número de estágios, eficiência de estágio de Murphree e tipo de equação utilizada para o cálculo dos coeficientes de fugacidade e coeficientes de atividade. Cada um dos dados acima são visualizados em janelas, sendo que as mesmas são acessadas pelo mouse ou pelo teclado.

Além das vantagens descritas acima, o Programa Auxiliar não permite que o usuário entre com especificações erradas, visto que as mesmas são limitadas (por exemplo, a pressão da coluna não pode ser igual ou menor que zero) e são selecionadas apenas pelo mouse. Deste modo, não existe a possibilidade de o usuário entrar com um valor numérico no lugar de uma letra ("string") ou vice-versa.

São criados três arquivos de dados:

- o arquivo COMP.DAT contém o nome dos componentes disponíveis para serem utilizados.
- o arquivo COMP2.DAT contém o tipo e o número de grupos funcionais da molécula de cada componente.

- o arquivo COMP5.DAT contém as constantes físicas e os parâmetros críticos, os parâmetros da equação de Antoine, os parâmetros da equação da capacidade calorífica e os parâmetros da equação de Scatchard & Hildebrand.

Os componentes selecionados pelo Programa Auxiliar serão gravados no arquivo WDIN.DAT para posterior utilização pelo Programa Principal.

V.5.1 FUNCIONAMENTO DO PROGRAMA AUXILIAR

A figura V.2 mostra a tela inicial do Programa Auxiliar, após ser carregado um arquivo de dados. Nela existem quadros cujos parâmetros podem ser alterados e quadros

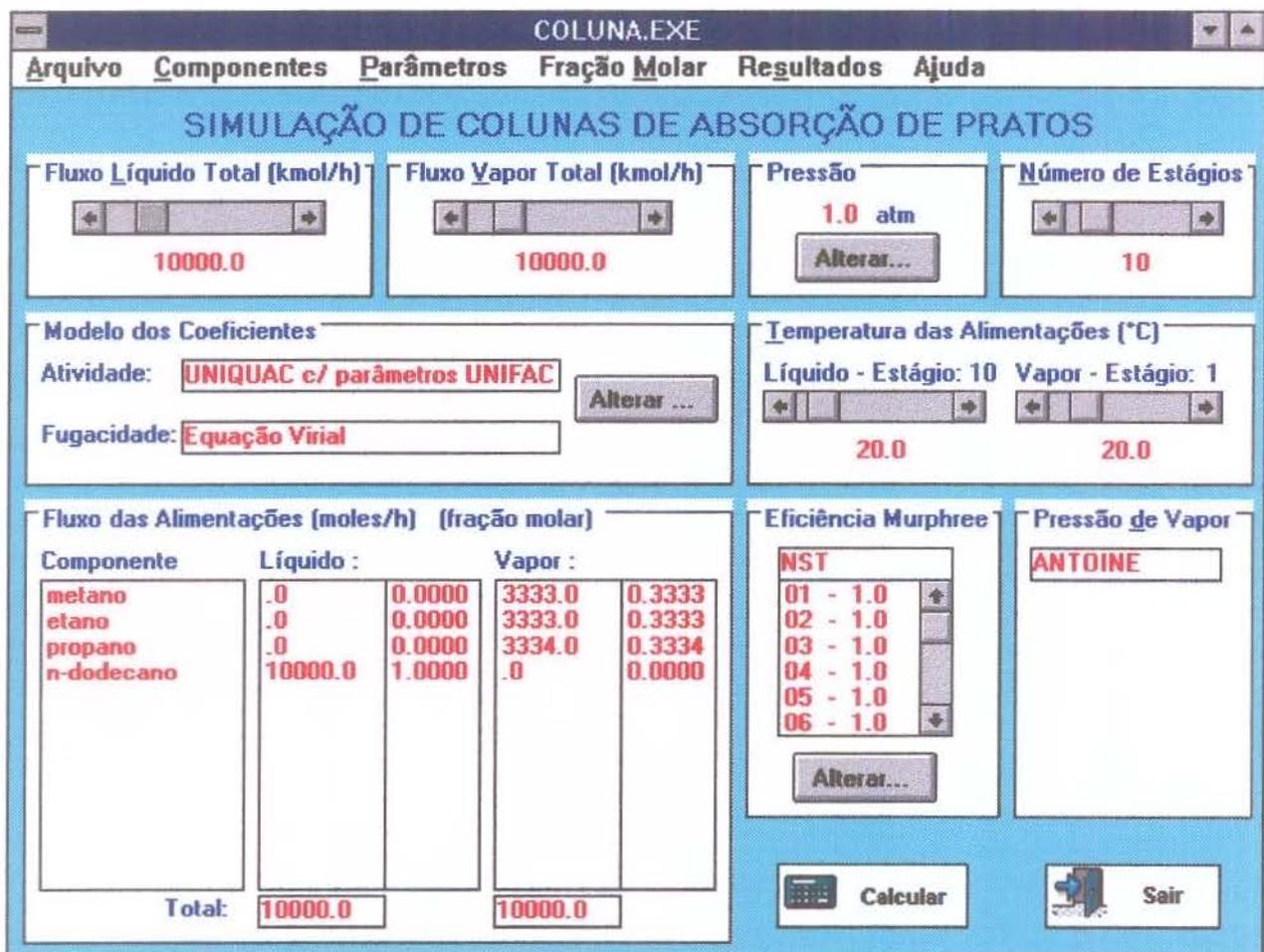


Figura V.2 - Tela inicial do Programa Auxiliar

que permitem a seleção de um determinado parâmetro. Enquanto não forem selecionados os componentes, o Botão de Comando Calcular não é apresentado na tela.

Barra de Menu

Na Barra de Menu existem 6 opções:

Arquivo: acessado pelo mouse ou pelas teclas Alt+A. Nesta opção, o usuário pode carregar um arquivo de dados gravado anteriormente, salvar um arquivo de dados novo ou alterado pelo usuário, salvar um arquivo de resultados ou sair do programa. Ao acessar o menu Abrir Arquivo de Dados aparece a janela mostrada na figura V.3.

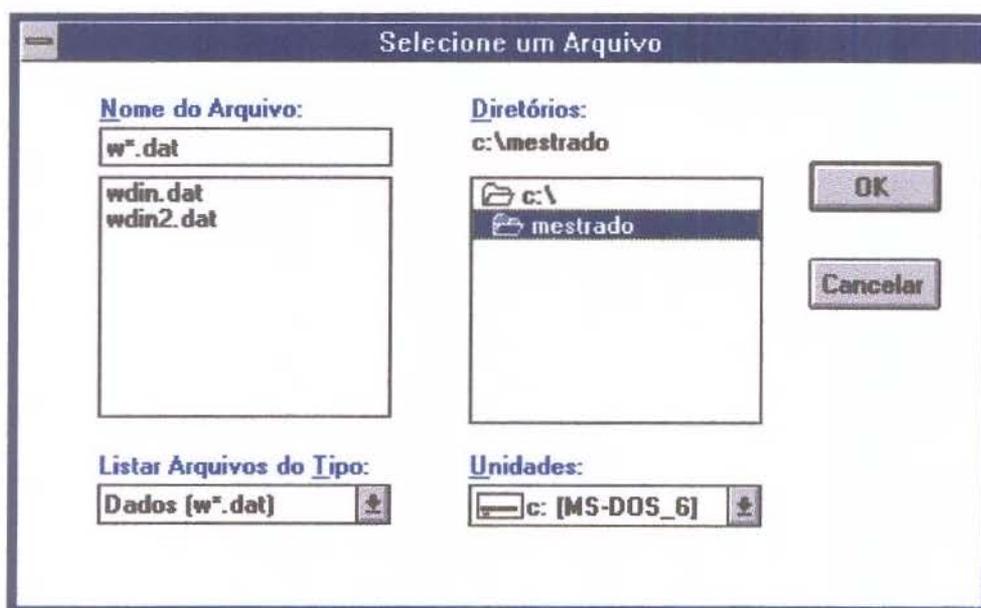


Figura V.3 - Janela para carregar um arquivo de dados existente.

Componentes: acessado pelo mouse ou pelas teclas Alt+C. Nesta opção o usuário pode selecionar os componentes do sistema a ser simulado ou ainda acrescentar/alterar novos componentes ao arquivo de dados iniciais (COMP.DAT, COMP2.DAT e COMP5.DAT).

A figura V.4 mostra a janela obtida após ser acessado o menu Selecionar.

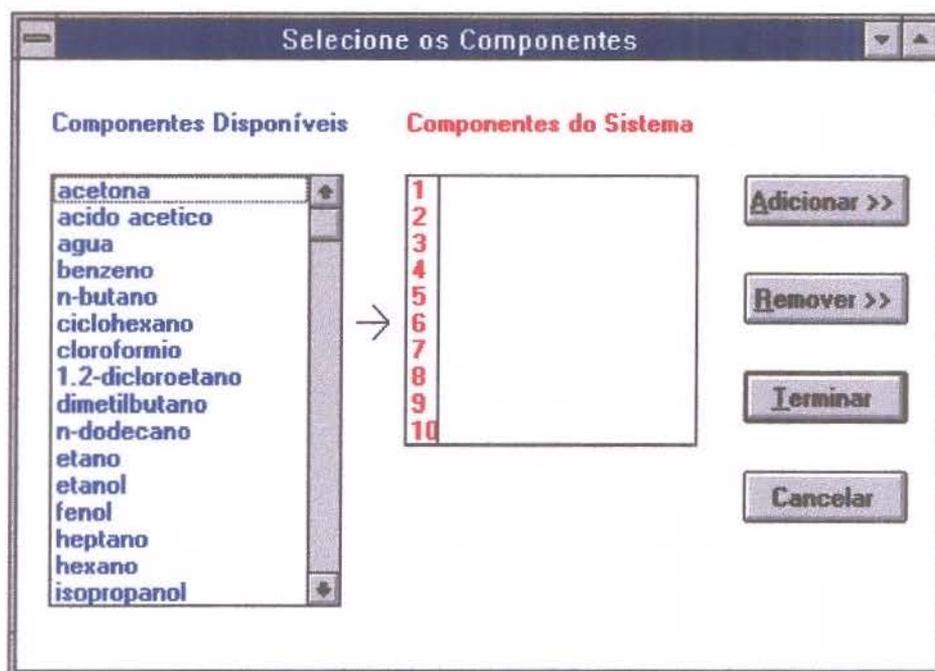


Figura V.4 - Janela para selecionar os componentes

A seleção dos componentes é feita utilizando o duplo clique no mouse na linha da tabela Componentes Disponíveis ou o clique no botão Adicionar, de tal modo que é possível selecionar no máximo dez componentes. Em caso de erro, um clique no botão Remover, retira o componente da tabela Componentes do Sistema.

Ao clicar o botão Terminar, o usuário deve escolher o modelo de coeficiente de atividade a ser utilizado nos cálculos. Caso a escolha seja por UNIQUAC com parâmetros UNIFAC, o programa imediatamente chama o Programa Auxiliar de Cálculo (UNIQUAC.EXE) para o cálculo dos parâmetros para os componentes selecionados.

A figura V.5 mostra a janela obtida após ser acessado o menu Alterar/Acrescentar.

Ao acrescentar um novo componente à lista dos componentes disponíveis, o usuário deve ter em mãos todas as propriedades necessárias do mesmo, preenchendo todos os quadros apresentados.

Propriedades do Componente

Escolha a Opção
 Alterar Acrescentar

Nome do Componente:

Parâmetros UNIFAC
 Tipos de moléculas:
 1 CH3
 1 CH3CO

Propriedades Críticas
 Tb (K) = Tc (K) =
 Pc (bar) = Vc (cm3/mol) =
 Zc = Omega =

Parâmetros Eq. Cp
 Cp A =
 Cp B =
 Cp C =
 Cp D =

Parâmetros Eq. Antoine
 Ant A =
 Ant B =
 Ant C =

Par. Scatchard & Hildebrand
 Delta (MPa^{1/2}) =
 Volume Molar (cm3/mol) =

Figura V.5 - Janela para acrescentar/alterar componentes

No caso dos parâmetros UNIFAC, ao clicar o botão Selecionar, é aberta a janela mostrada na figura V.6. O mesmo procedimento apresentado para selecionar os componentes é utilizado para selecionar os tipos de grupos funcionais, com a diferença que o usuário deve especificar a quantidade de cada grupo funcional, clicando a barra de rolagem vertical para cima ou para baixo.



Figura V.6 - Janela para seleção dos grupos funcionais da molécula de um componente

Parâmetros: acessado pelo mouse ou pelas teclas Alt+P, apenas depois de selecionados os componentes. Nesta opção o usuário pode visualizar os parâmetros críticos, da equação de pressão de vapor, da equação da capacidade calorífica, da equação de Scatchard & Hildebrand e os parâmetros UNIQUAC. A figura V.7 mostra a janela de visualização dos parâmetros críticos.

Comp.	Tb (K)	Tc (K)	Pc (atm)	Vc (cm ³ /mol)	Zc	Fator acêntrico
1	111.7	190.4	46	99.2	.288	.011
2	184.5	305.4	48.2	148.3	.285	.099
3	231.1	369.8	42.5	203	.281	.153
4	272.7	425.2	37.5	255	.274	.193
5	309.2	469.7	33.7	304	.263	.251
6	489.5	658.3	18.2	713	.24	.562

Figura V.7 - Janela de visualização dos parâmetros críticos

Fração Molar: acessado pelo mouse ou pelas teclas Alt+M, apenas depois de selecionados os componentes. Nesta opção o usuário define a fração molar das alimentações das fase líquida e vapor. Em ambas as opções, a soma das frações molares dos componentes será sempre igual a 1, pois a Barra de Rolagem Horizontal é limitada pelo valor 1 para o primeiro componente, e pelo valor 1 menos o valor das frações molares acumuladas, para os demais componentes.

A figura V.8 mostra a janela de entrada das frações molares na fase líquida.



Figura V.8 - Janela de entrada das frações molares da fase líquida

É importante observar que o usuário não têm acesso à fração molar do último componente da lista, pois esta fração é determinada automaticamente, ao se determinar as frações molares dos demais componentes, pois a soma das frações deve ser sempre igual a 1. Clicando o botão Equimolar, a fração molar é dividida entre todos os componentes. Clicando o botão Comp Puro, a fração molar para o componente selecionado é dada pelo valor 1.

Resultados: acessado pelo mouse ou pelas teclas Alt+S, apenas depois da utilização do Programa Principal (simulação). Nesta opção o usuário pode visualizar os resultados na tela ou imprimí-los. Ao imprimir, a folha de resultados obtida é igual àquelas mostradas no Apêndice A. Quando a opção selecionada for a Tela, os resultados são mostrados na forma de tabelas ou de gráficos. Os gráficos gerados podem ser da temperatura, fluxo de saída da fase líquida ou fluxo de saída da fase vapor contra o número de estágio.

A figura V.9 mostra a janela de resultados na forma de tabelas e a figura V.10 mostra a janela de resultados na forma de gráficos.

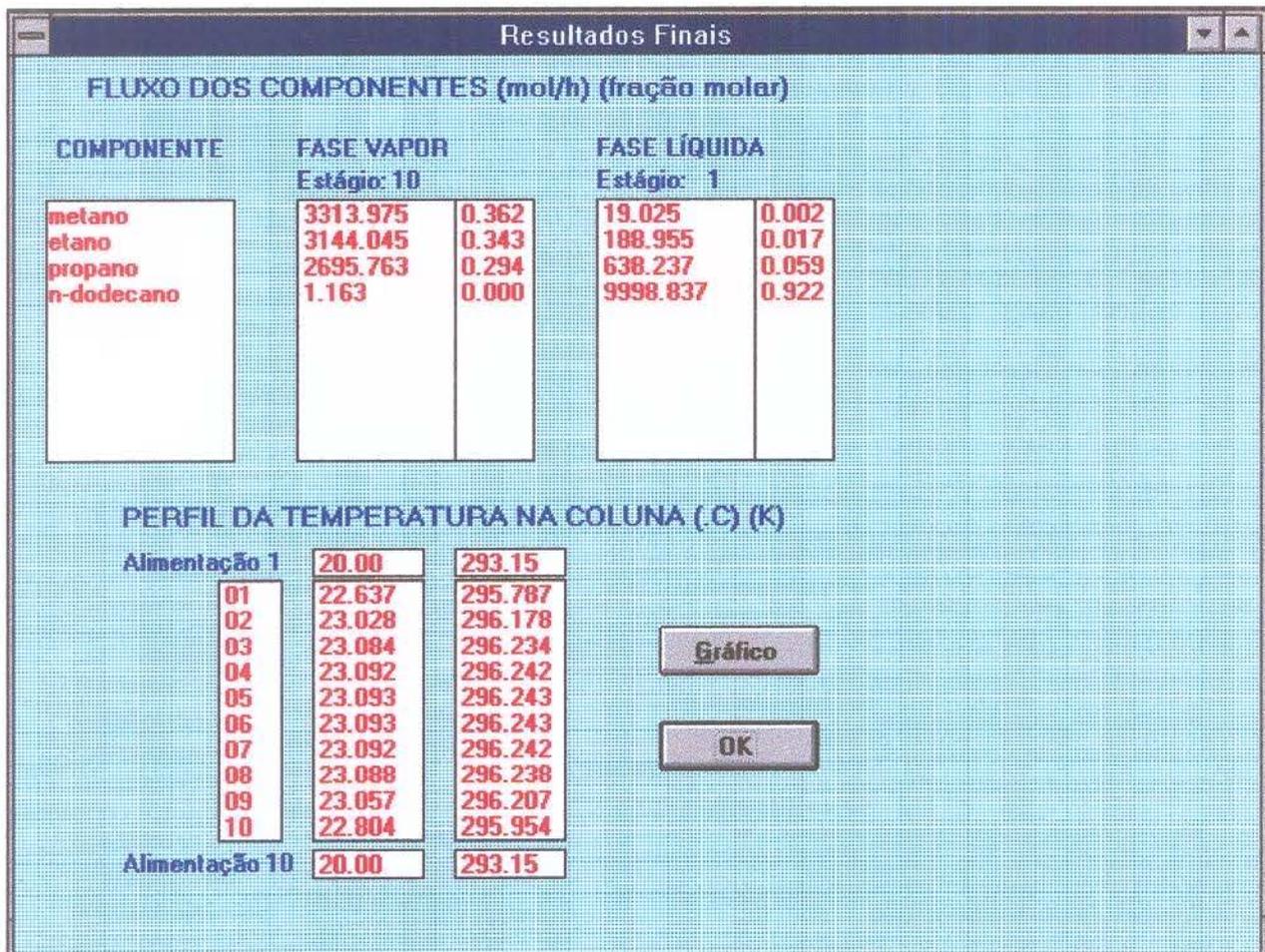


Figura V.9 - Janela de resultados com tabelas

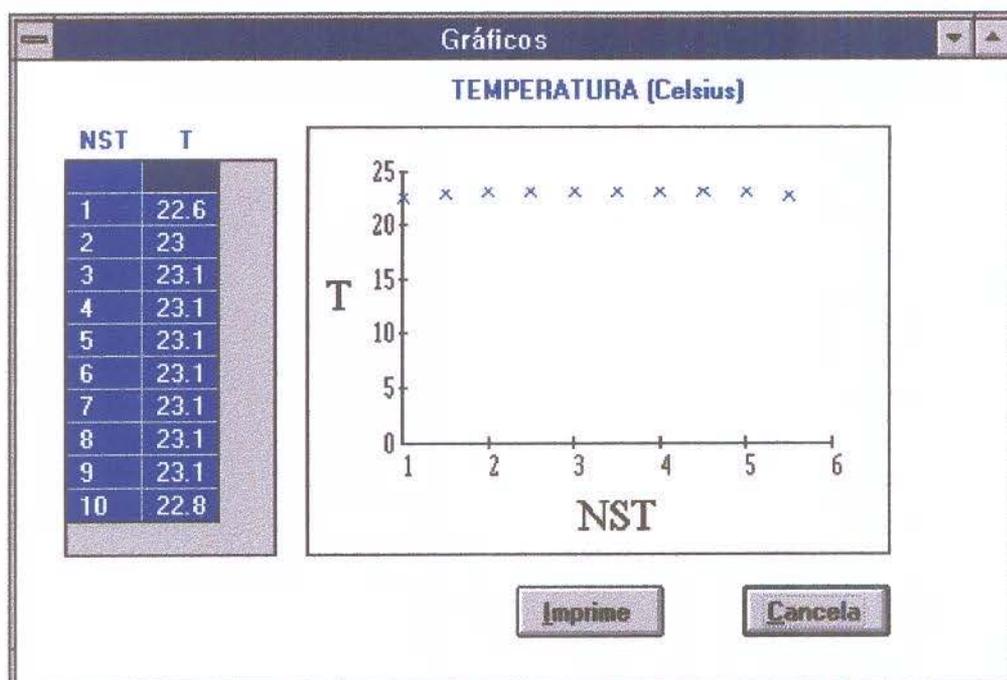


Figura V.10 - Janela de resultados com gráficos (temperatura x número do estágio).

Ajuda: acessado pelo mouse ou pelas teclas ALT+J. Apresenta na tela informações sobre o programa.

Quadros

Na tela inicial do Programa Auxiliar (figura V.3) existem 7 quadros que podem ser acessados a qualquer momento e que permitem a alteração, escolha ou seleção dos vários parâmetros. O quadro Fluxo das Alimentações não pode ser acessado, pois o mesmo é apenas informativo, sendo preenchido automaticamente, ao se alterar os componentes, o fluxo líquido total, o fluxo vapor total, a fração molar da fase líquida na alimentação ou a fração molar da fase vapor na alimentação.

Fluxo Líquido Total: acessado pelas teclas Alt+L ou pelo clique do mouse na Barra de Rolagem Horizontal. Esta opção define diretamente o fluxo líquido total ao se clicar as setas para a esquerda (fluxo menor) e para a direita (fluxo maior). Os valores

são limitados a um mínimo de 100 kmol/h e a um máximo de 50.000 kmol/h. Ao se iniciar o Programa Auxiliar, o quadro apresenta o valor padrão de 10.000 kmol/h.

Fluxo Vapor Total: acessado pelas teclas Alt+V ou pelo clique do mouse na Barra de Rolagem Horizontal. Esta opção define diretamente o fluxo líquido vapor ao se clicar as setas para a esquerda (fluxo menor) e para a direita (fluxo maior). Os valores são limitados a um mínimo de 100 kmol/h e a um máximo de 50.000 kmol/h. Ao se iniciar o Programa Auxiliar, o quadro apresenta o valor padrão de 20.000 kmol/h.

A figura V.11 mostra os quadros do Fluxo Líquido Total e do Fluxo Vapor Total.

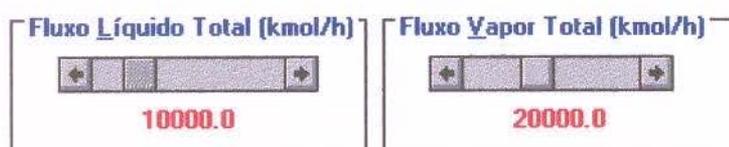


Figura V.11 - Quadros do Fluxo Líquido Total e Fluxo Vapor Total

Pressão: acessado pelas teclas Alt+E ou pelo clique do mouse no Botão de Comando Alterar. Neste caso, uma outra janela é aberta para alteração da pressão da coluna. Com isto, após a determinação da pressão da coluna, é iniciado o cálculo da temperatura de bolha da alimentação líquida. O valor calculado, através do Programa Auxiliar de Cálculo 2 (TBOLHA.EXE), é o limite superior da Barra de Rolagem Horizontal do quadro Temperatura das Alimentações - Líquido (vide figura V.15).

Ao se iniciar o Programa Auxiliar, o quadro apresenta o valor padrão de 5 atm. A figura V.12 mostra a janela Pressão da Coluna. O valor é limitado pelo mínimo de 0.5 e pelo máximo de 50.0 atm.



Figura V.12 - Janela Pressão da Coluna

Número de Estágios: acessado pelas teclas Alt+N ou pelo clique do mouse na Barra de Rolagem Horizontal. O valor é limitado pelo mínimo de 2 e pelo máximo de 50 estágios.

Ao se iniciar o Programa Auxiliar, o quadro apresenta o valor padrão de 5 estágios. A figura V.13 mostra o quadro Número de Estágios.

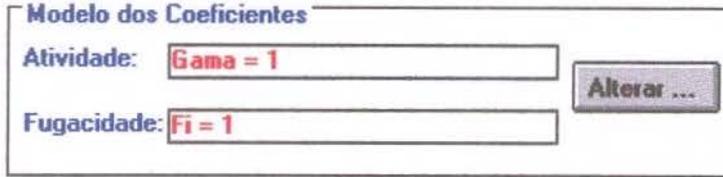


Figura V.13 - Quadro Número de Estágios

Modelo dos Coeficientes: acessado pelo clique do mouse no Botão de Comando Alterar.

Para o coeficiente de atividade o modelo inicial é para fase líquida ideal (gama = 1), porém o usuário tem a opção de selecionar os modelos UNIQUAC com UNIFAC ou Scatchard & Hildebrand para o cálculo do mesmo.

Para o coeficiente de fugacidade o modelo inicial é para fase vapor ideal ($f_i = 1$), porém o usuário tem a opção de selecionar Equação Virial. A figura V.14 mostra o quadro Modelo dos Coeficientes.



Modelo dos Coeficientes

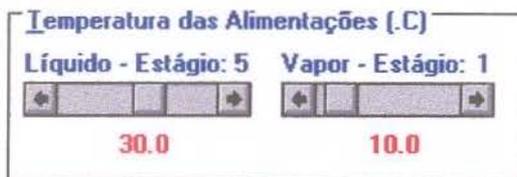
Atividade:

Fugacidade:

Figura V.14 - Quadro Modelo dos Coeficientes

Temperatura das Alimentações: acessado pelas teclas Alt+T (para o estágio 1) ou pelo clique nas Barras de Rolagem Horizontal (para os estágios 1 e nst). As temperaturas padrões no início do Programa Auxiliar são 10 e 30 °C, para os estágios 1 e nst, respectivamente.

O limite superior para o estágio nst (alimentação líquida) é determinado pela pressão da coluna e pela composição da fase líquida (via cálculo da temperatura de bolha, através do Programa Auxiliar de Cálculo 2). A figura V.15 mostra o quadro Temperatura das Alimentações.



Temperatura das Alimentações (.C)

Líquido - Estágio: 5 Vapor - Estágio: 1

Figura V.15 - Quadro Temperatura das Alimentações

Eficiência de Murphree: acessado pelo clique do mouse no Botão de Comando Alterar. A figura V.16 mostra o quadro Eficiência de Murphree.

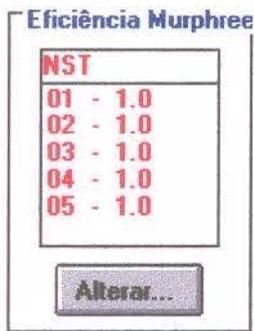


Figura V.16 Quadro Eficiência de Murphree

Botões de Comando

Sair

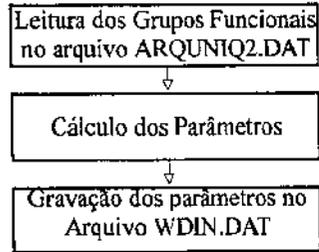
Ao clicar este botão, o usuário abandona o programa.

Calcular

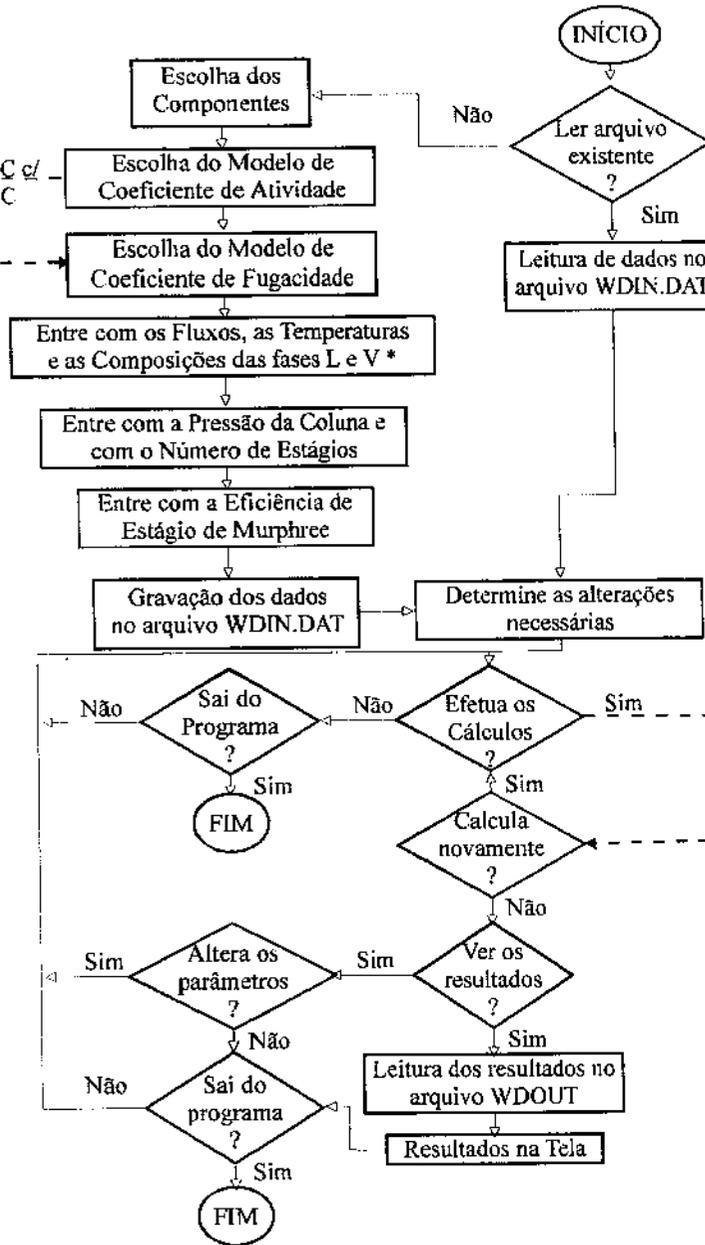
Ao clicar este botão, o Programa Auxiliar chama o Programa Principal (ABSORÇÃO.EXE) para o início dos cálculos. Este botão encontra-se visível somente depois de preenchidos todos os campos com os dados a serem utilizados pelo Programa Principal.

A figura V.17 mostra o esquema da inter-relação entre os programas desenvolvidos.

Programa Auxiliar de Cálculo 1



Programa Auxiliar



Programa Auxiliar de Cálculo 2

* Cálculo da Temperatura de Bolha da Alimentação Líquida

Programa Principal

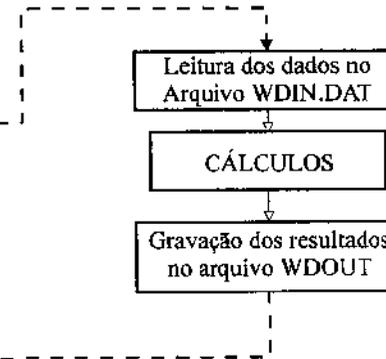


Figura V.17 - Esquema da Interrelação entre os programas

CAPÍTULO VI

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com o objetivo de verificar os resultados obtidos pelo programa desenvolvido, são feitas comparações com simulações obtidas no simulador comercial ASPEN. Também é feita a análise da variação de alguns parâmetros para verificação da melhor condição de operação da coluna. Posteriormente é realizada uma simulação de uma corrente gasosa proveniente de um incinerador de resíduos perigosos, porém, neste caso não existem dados experimentais disponíveis para comparação.

Um estudo muito importante que será apresentado neste capítulo é a exploração do perfil de temperatura na coluna. Em particular, nestes processos o estudo têm relevância, uma vez que na mistura gasosa que constitui a alimentação, podem haver componentes que são condensáveis e outros que não são. O calor de condensação, então, pode ter uma influência importante no perfil de temperatura resultante.

VI.1 COMPARAÇÃO COM RESULTADOS DO SIMULADOR ASPEN

Várias simulações do programa desenvolvido foram feitas para comparação com os resultados obtidos no Simulador ASPEN (Vegini e Gontarski, 1996). Foram feitas simulações variando os componentes da alimentação gasosa (sempre com 3 componentes), mantendo os demais parâmetros constantes. Na tabela VI.1, encontram-se os parâmetros constantes.

As composições estabelecidas para os casos estudos a seguir, introduzem numa primeira etapa, componentes mais pesados à mistura, do propano ao pentano, mantendo-se a predominância dos componentes mais leves (metano e etano) e numa

segunda etapa, os componentes predominantes são os mais pesados (butano e pentano), introduzindo-se os componentes mais leves à mistura, do metano ao propano.

Tabela VI.1 - Parâmetros constantes para as simulações

Solvente	n-Dodecano
Temperatura do líquido na Alimentação	20 °C
Fluxo do líquido na Alimentação	10.000 kmol/hora
Composição do gás na Alimentação	equimolar
Temperatura do gás na Alimentação	20 °C
Fluxo do gás na Alimentação	10.000 kmol/hora
Número de estágios	10
Pressão da coluna	1 atm
Eficiência de Estágio de Murphree	100 %
Modelo de coeficiente de atividade	UNIQUAC
Modelo de coeficiente de fugacidade	Fase vapor ideal

VI.1.1 SISTEMA METANO-ETANO-PROPANO (C-C₂-C₃)

A tabela VI.2 mostra os resultados obtidos pelo Simulador ASPEN e pelo Programa ABSIN com relação ao fluxo na saída da coluna, para as fases líquida e vapor. A tabela VI.3 mostra os resultados com relação ao perfil de temperatura no interior da coluna.

Tabela VI.2 - Resultados do fluxo na saída para o sistema C-C₂-C₃-n-dodecano

Componente	Fluxo na saída da coluna				Desvio no fluxo molar %
	Resultados obtidos no Simulador ASPEN		Resultados obtidos no Programa ABSIM		
	kmol/h	fração molar	kmol/h	fração molar	
Fase Vapor					
Metano	3302.413	0.361	3313.977	0.362	0.349
Etano	3152.833	0.344	3143.080	0.344	-0.310
Propano	2700.501	0.295	2689.423	0.294	-0.412
n-Dodecano	1.245	0.000	1.086	0.000	-14.641
Fase Líquida					
Metano	27.587	0.003	19.023	0.002	-45.019
Etano	177.167	0.016	189.920	0.018	6.715
Propano	639.499	0.059	644.577	0.059	0.788
n-Dodecano	9998.755	0.922	9998.914	0.921	0.002

Tabela VI.3 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₂-C₃-n-dodecano

Número do Estágio	Temperatura °C		Desvio %
	Resultados do Simulador ASPEN	Resultados do Programa ABSIM	
1	22.622	22.664	0.184
2	23.002	23.056	0.236
3	23.060	23.112	0.225
4	23.065	23.120	0.238
5	23.064	23.121	0.248
6	23.062	23.121	0.253
7	23.064	23.121	0.247
8	23.059	23.116	0.245
9	23.028	23.084	0.243
10	22.775	22.826	0.222

As tabelas anteriores mostram que os resultados obtidos pelo programa ABSIM, em comparação com o simulador ASPEN, praticamente coincidem para o perfil de temperatura (maior desvio de 0.253 %), enquanto que para o fluxo molar da fase líquida, componente metano, e para o fluxo molar da fase vapor, componente n-dodecano, os resultados não foram próximos (desvio de -45.019 e -14.641 %, respectivamente).

A figura VI.1 mostra o perfil de temperatura ao longo da coluna, com os valores do programa ABSIM e para o simulador ASPEN.

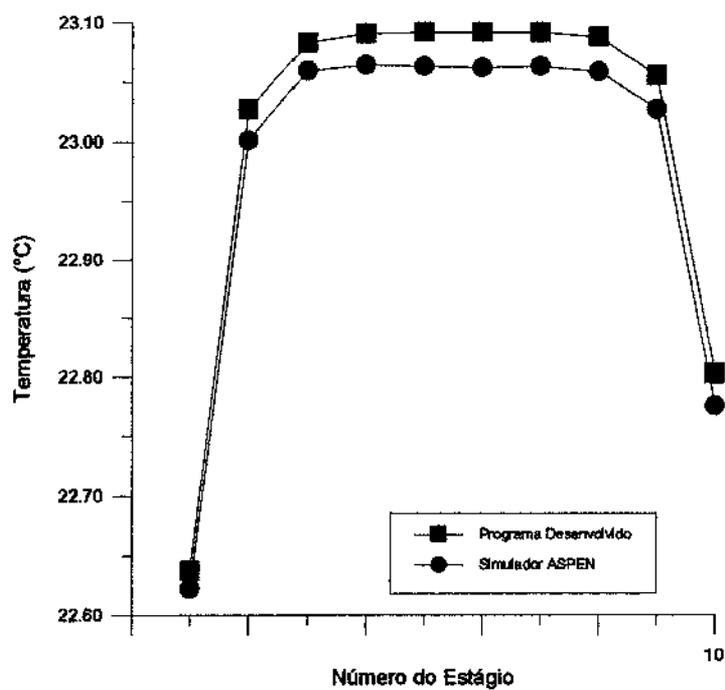


Figura VI.1 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₂-C₃-n-dodecano

VI.1.2 SISTEMA METANO-ETANO-BUTANO (C-C₂-C₄)

A tabela VI.4 mostra os resultados obtidos pelo simulador ASPEN e pelo programa ABSIM com relação ao fluxo na saída da coluna, para as fases líquida e vapor. A tabela VI.5 mostra os resultados com relação ao perfil de temperatura no interior da coluna.

Tabela VI.4 - Resultados do fluxo na saída para o sistema C-C₂-C₄-n-dodecano

Componente	Fluxo na saída da coluna				Desvio no fluxo molar %
	Resultados obtidos no Simulador ASPEN		Resultados obtidos no Programa ABSIM		
	kmol/h	fração molar	kmol/h	fração molar	
Fase Vapor					
Metano	3303.023	0.416	3313.739	0.418	0.323
Etano	3166.432	0.399	3155.401	0.398	-0.350
Butano	1472.188	0.185	1459.386	0.184	-0.877
n-Dodecano	1.484	0.000	1.327	0.000	-11.831
Fase Líquida					
Metano	26.977	0.002	19.261	0.002	-40.060
Etano	163.568	0.014	177.599	0.015	7.900
Butano	1867.812	0.155	1874.614	0.155	0.363
n-Dodecano	9998.516	0.829	9998.673	0.828	0.002

Tabela VI.5 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₂-C₄-n-dodecano

Número do Estágio	Temperatura °C		Desvio %
	Resultados do Simulador ASPEN	Resultados do Programa ABSIM	
1	29.820	29.889	0.230
2	30.999	31.098	0.319
3	31.142	31.244	0.325
4	31.155	31.259	0.334
5	31.149	31.252	0.329
6	31.123	31.221	0.313
7	31.014	31.124	0.353
8	30.712	30.826	0.371
9	29.828	29.920	0.308
10	27.222	27.301	0.291

As tabelas anteriores mostram que os resultados obtidos pelo programa ABSIM, em comparação com o Simulador ASPEN, praticamente coincidem para o perfil de temperatura (maior desvio de 0.371 %), enquanto que para o fluxo molar da fase líquida, componente metano, e para o fluxo molar da fase vapor, componente n-dodecano, os resultados não foram próximos (desvios de -40.060 e -11.831 %, respectivamente).

A figura VI.2 mostra o perfil de temperatura ao longo da coluna, com os valores do programa ABSIM e para o simulador ASPEN.

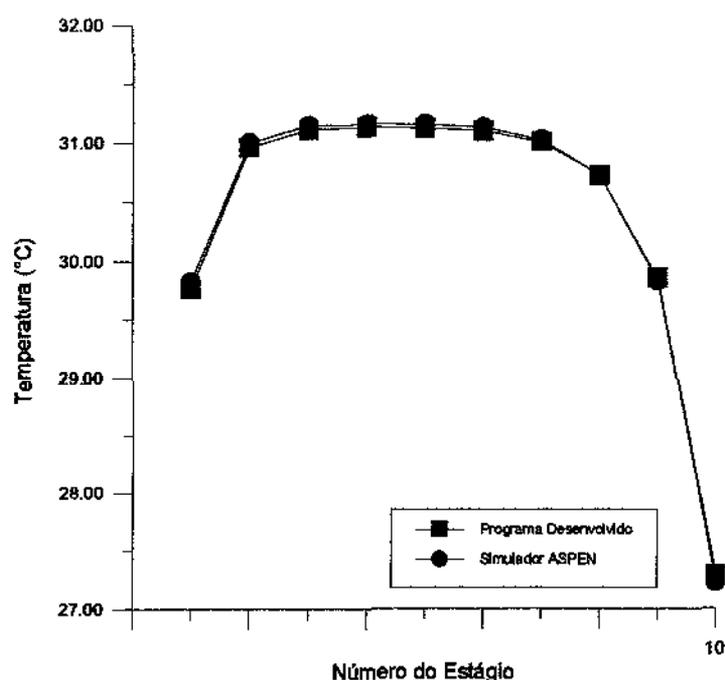


Figura VI.2 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₂-C₄-n-dodecano

VI.1.3 SISTEMA METANO-ETANO-PENTANO (C-C₂-C₅)

A tabela VI.6 mostra os resultados obtidos pelo simulador ASPEN e pelo programa ABSIM com relação ao fluxo na saída da coluna, para as fases líquida e vapor. A tabela VI.7 mostra os resultados com relação ao perfil de temperatura no interior da coluna.

Tabela VI.6 - Resultados do fluxo na saída para o sistema C-C₂-C₅-n-dodecano

Componente	Fluxo na saída da coluna				Desvio no fluxo molar %
	Resultados obtidos no Simulador ASPEN		Resultados obtidos no Programa ABSIM		
	kmol/h	fração molar	kmoles/h	fração molar	
Fase Vapor					
Metano	3301.677	0.510	3311.670	0.512	0.302
Etano	3172.407	0.490	3158.372	0.488	-0.444
Pentano	0.128	0.000	0.129	0.000	0.775
n-Dodecano	0.756	0.000	0.651	0.000	-16.129
Fase Líquida					
Metano	28.323	0.002	21.330	0.002	-32.785
Etano	157.593	0.012	174.628	0.013	9.755
Pentano	3339.872	0.247	3333.871	0.246	-0.180
n-Dodecano	9999.243	0.739	9999.349	0.739	0.001

Tabela VI.7 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₂-C₅-n-dodecano

Número do Estágio	Temperatura °C		Desvio %
	Resultados do Simulador ASPEN	Resultados do Programa ABSIM	
1	41.509	41.650	0.339
2	38.604	38.860	0.659
3	32.015	32.244	0.710
4	26.161	26.357	0.745
5	22.706	22.820	0.500
6	21.244	21.308	0.302
7	20.732	20.776	0.213
8	20.568	20.605	0.180
9	20.517	20.552	0.172
10	20.485	20.517	0.156

As tabelas anteriores mostram que os resultados obtidos pelo programa ABSIM, em comparação com o Simulador ASPEN, praticamente coincidem para o perfil de temperatura (maior desvio de 0.745 %), enquanto que para o fluxo molar da fase líquida, componente metano, e para o fluxo molar da fase vapor, componente n-dodecano, os resultados não foram próximos (desvios de -32.785 e -16.129 %, respectivamente).

A figura VI.3 mostra o perfil de temperatura ao longo da coluna, com os valores do programa ABSIM e para o simulador ASPEN.

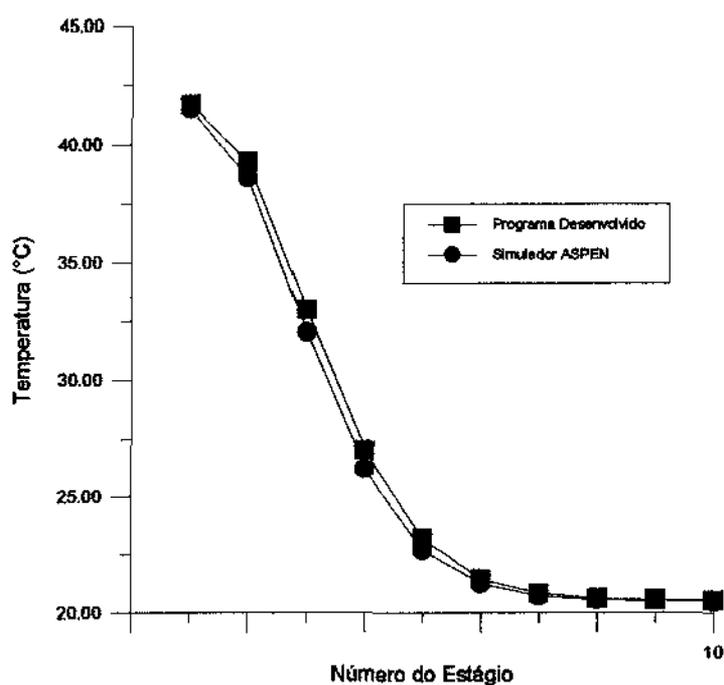


Figura VI.3 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₂-C₅-n-dodecano

VI.1.4 SISTEMA PROPANO-BUTANO-PENTANO (C₃-C₄-C₅)

A tabela VI.8 mostra os resultados obtidos pelo simulador ASPEN e pelo programa ABSIM com relação ao fluxo na saída da coluna, para as fases líquida e vapor. A tabela VI.9 mostra os resultados com relação ao perfil de temperatura no interior da coluna.

Tabela VI.8 - Resultados do fluxo na saída para o sistema C₃-C₄-C₅-n-dodecano

Componente	Fluxo na saída da coluna				Desvio no fluxo molar %
	Resultados obtidos no Simulador ASPEN		Resultados obtidos no Programa ABSIM		
	kmol/h	fração molar	moles/h	fração molar	
Fase Vapor					
Propano	2844.137	0.613	2833.915	0.608	-0.361
Butano	1786.376	0.385	1808.869	0.388	1.243
Pentano	11.284	0.002	14.637	0.003	22.908
n-Dodecano	1.475	0.000	1.378	0.000	-7.039
Fase Líquida					
Propano	485.863	0.032	499.085	0.033	2.649
Butano	1543.624	0.101	1524.131	0.099	-1.279
Pentano	3328.716	0.217	3319.363	0.216	-0.282
n-Dodecano	9985.525	0.651	9998.622	0.652	0.131

Tabela VI.9 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C₃-C₄-C₅-n-dodecano

Número do Estágio	Temperatura °C		Desvio %
	Resultados do Simulador ASPEN	Resultados do Programa ABSIM	
1	47.517	47.265	-0.533
2	49.050	48.934	-0.237
3	47.438	47.423	-0.031
4	45.274	45.381	0.235
5	43.156	43.361	0.472
6	41.343	41.632	0.694
7	39.959	40.284	0.807
8	38.887	39.203	0.806
9	37.737	38.017	0.736
10	35.667	35.891	0.624

As tabelas anteriores mostram que os resultados obtidos pelo programa ABSIM, em comparação com o simulador ASPEN, praticamente coincidem para o perfil de temperatura (maior desvio de 0.807 %) e para o fluxo molar da fase líquida (maior desvio de 2.642 %), enquanto que para o fluxo molar da fase vapor, apenas para o componente pentano os resultados não foram próximos (desvio de 22.908 %).

A figura VI.4 mostra o perfil de temperatura ao longo da coluna, com os valores do programa ABSIM e para o Simulador ASPEN.

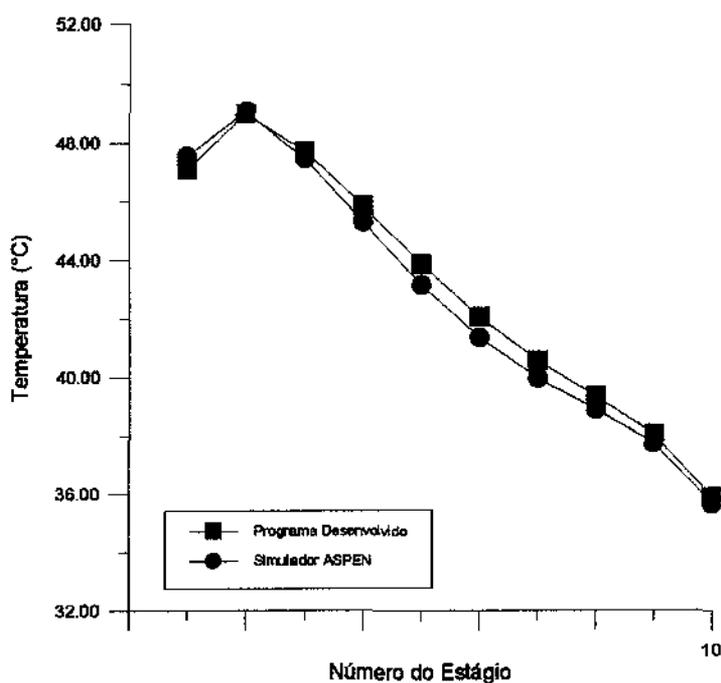


Figura VI.4 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C_3 - C_4 - C_5 -n-dodecano

VI.1.5 SISTEMA ETANO-BUTANO-PENTANO (C₂-C₄-C₅)

A tabela VI.10 mostra os resultados obtidos pelo simulador ASPEN e pelo programa ABSIM com relação ao fluxo na saída da coluna, para as fases líquida e vapor. A tabela VI.11 mostra os resultados com relação ao perfil de temperatura no interior da coluna.

Tabela VI.10 - Resultados do fluxo na saída para o sistema C₂-C₄-C₅-n-dodecano

Componente	Fluxo na saída da coluna				Desvio no fluxo molar %
	Resultados obtidos no Simulador ASPEN		Resultados obtidos no Programa ABSIM		
	kmol/h	fração molar	moles/h	fração molar	
Fase Vapor					
Etano	3183.119	0.641	3167.468	0.637	-0.494
Butano	1771.529	0.357	1795.623	0.361	1.342
Pentano	8.161	0.002	10.907	0.002	25.176
n-Dodecano	1.271	0.000	1.170	0.000	-8.632
Fase Líquida					
Etano	146.881	0.010	165.532	0.011	11.267
Butano	1558.471	0.104	1537.377	0.102	-1.372
Pentano	3331.839	0.222	3323.093	0.221	-0.263
n-Dodecano	9998.700	0.665	9998.830	0.665	0.001

Tabela VI.11 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C₂-C₄-C₅-n-dodecano

Número do Estágio	Temperatura °C		Desvio %
	Resultados do Simulador ASPEN	Resultados do Programa ABSIM	
1	46.826	46.573	-0.544
2	47.962	47.849	-0.237
3	46.079	46.089	0.022
4	43.717	43.850	0.303
5	41.460	41.711	0.602
6	39.637	39.960	0.807
7	38.327	38.665	0.875
8	37.318	37.635	0.842
9	35.922	36.213	0.804
10	32.146	32.383	0.731

As tabelas anteriores mostram que os resultados obtidos pelo programa ABSIM, em comparação com o simulador ASPEN, praticamente coincidem para o perfil de temperatura (maior desvio de 0.875 %), enquanto que para o fluxo molar da fase líquida, componente etano, e para o fluxo molar da fase vapor, componente pentano, os resultados não foram próximos (desvios de 11.267 e 25.176 %, respectivamente).

A figura VI.5 mostra o perfil de temperatura ao longo da coluna, com os valores do programa ABSIM e para o simulador ASPEN.

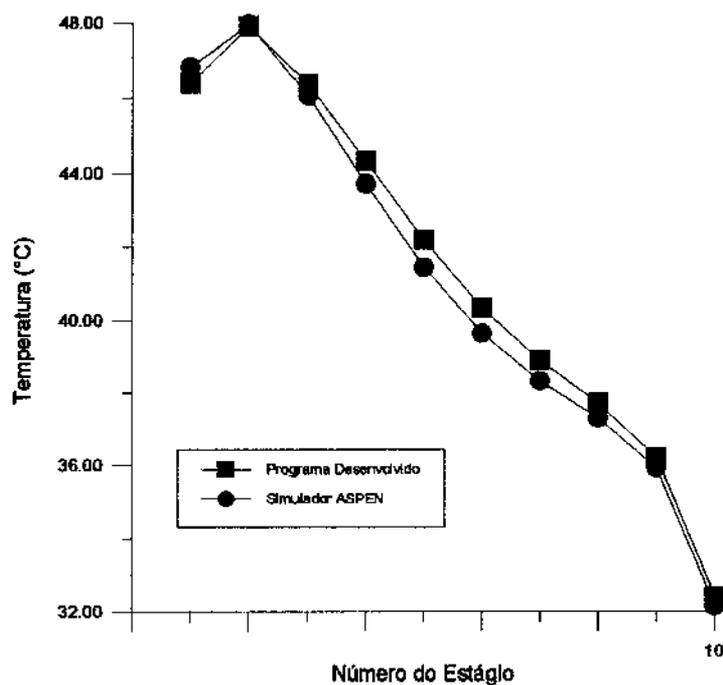


Figura VI.5 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema $C_2-C_4-C_5$ -n-dodecano

VI.1.6 SISTEMA METANO-BUTANO-PENTANO (C-C₄-C₅)

A tabela VI.12 mostra os resultados obtidos pelo simulador ASPEN e pelo programa ABSIM com relação ao fluxo na saída da coluna, para as fases líquida e vapor. A tabela VI.13 mostra os resultados com relação ao perfil de temperatura no interior da coluna.

Tabela VI.12 - Resultados do fluxo na saída para o sistema C-C₄-C₅-n-dodecano

Componente	Fluxo na saída da coluna				Desvio no fluxo molar %
	Resultados obtidos no Simulador ASPEN		Resultados obtidos no Programa ABSIM		
	kmol/h	fração molar	kmol/h	fração molar	
Fase Vapor					
Metano	3302.748	0.647	3311.974	0.644	0.279
Butano	1790.578	0.351	1819.338	0.354	1.581
Pentano	8.980	0.002	12.320	0.002	27.110
n-Dodecano	1.310	0.000	1.218	0.000	-7.553
Fase Líquida					
Metano	27.252	0.002	21.026	0.001	-29.611
Butano	1539.422	0.103	1513.662	0.102	-1.702
Pentano	3331.020	0.224	3321.680	0.224	-0.281
n-Dodecano	9998.689	0.671	9998.782	0.673	0.001

Tabela VI.13 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₄-C₅-n-dodecano

Número do Estágio	Temperatura °C		Desvio %
	Resultados do Simulador ASPEN	Resultados do Programa ABSIM	
1	46.935	46.708	-0.485
2	47.985	47.906	-0.164
3	46.145	46.194	0.107
4	43.819	44.002	0.415
5	41.571	41.869	0.712
6	39.730	40.090	0.897
7	38.399	38.764	0.942
8	37.393	37.732	0.899
9	36.005	36.313	0.847
10	31.847	32.091	0.760

As tabelas anteriores mostram que os resultados obtidos pelo programa ABSIM, em comparação com o simulador ASPEN, praticamente coincidem para o perfil de temperatura (maior desvio de 0.942 %), enquanto que para o fluxo molar da fase líquida, componente metano, e para o fluxo molar da fase vapor, componente pentano, os resultados não foram próximos (desvios de -29.611e 27.110 %, respectivamente).

A figura VI.6 mostra o perfil de temperatura ao longo da coluna, com os valores do programa ABSIM e para o simulador ASPEN.

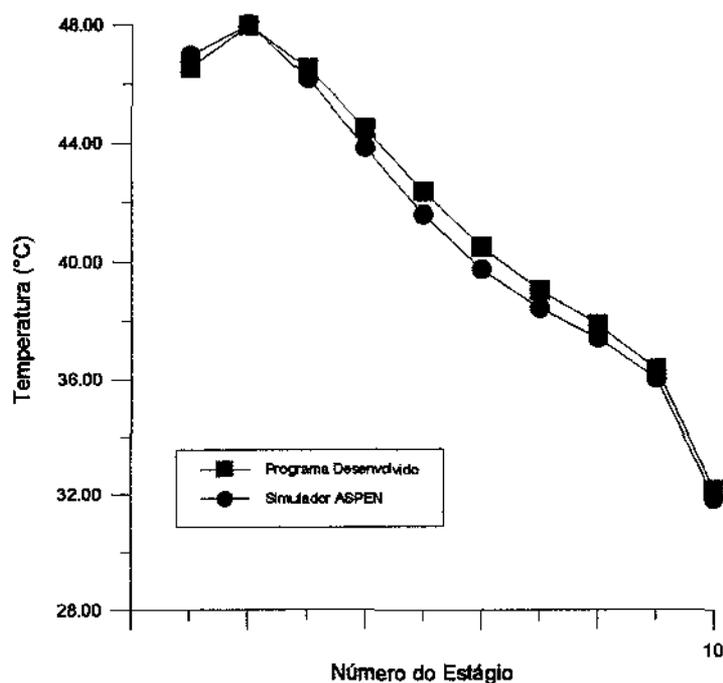


Figura VI.6 - Perfil de temperatura na coluna para o sistema C-C₄-C₅-n-dodecano

Analisando todos os resultados obtidos na comparação do programa ABSIM com o Simulador ASPEN, podemos verificar que para o perfil de temperatura, os desvios sempre foram pequenos, para todos os sistemas estudados (maior desvio de 0.942 %). Para os fluxos molares de alguns componentes nas fases líquida e vapor,

os desvios foram maior (até 45.019 %), porém estes casos aconteceram apenas para fluxos molares muito pequenos (em comparação com fluxos dos outros componentes no mesmo sistema).

Os resultados obtidos são importantes para análise e otimização de colunas de absorção de pratos, no entanto, não são comumente encontrados na literatura. Em particular, os resultados são de grande importância quando se deseja conhecer (para controlar) o processo com relação à temperatura dos estágios de uma coluna de absorção de pratos. Pode-se verificar que mudanças na composição da alimentação gasosa afetam de maneira significativa a temperatura na coluna, a qual pode assumir valores mais altos ou baixos. Em casos onde há a necessidade de introdução de resfriadores nos pratos internos da coluna, o conhecimento da forma como o perfil de temperatura varia, se mostra de grande valor, pois permite o resfriamento da coluna de maneira mais eficiente. Shoda (1996) utilizando o simulador comercial de processos HYSIM e Vegini e Gontarski (1996) utilizando o simulador ASPEN chegaram às mesmas conclusões.

VI.2 ANÁLISE PARA OTIMIZAÇÃO DA COLUNA

Várias simulações com o programa ABSIM foram feitas com o objetivo de verificar a influência do número de estágios, da pressão, da temperatura da fase líquida, do fluxo molar da fase líquida e do peso molecular do solvente na otimização da coluna. Considera-se que a otimização prevê uma concentração máxima do componente propano na saída líquida ou uma concentração máxima do componente metano na fase vapor. Na tabela VI.14 encontram-se os parâmetros fixos e na tabela VI.15 encontram-se os parâmetros variados.

Tabela VI.14 - Parâmetros fixos para as simulações

Alimentação :	
Componentes da Fase Vapor	Metano-Etano-Propano (equimolar)
Temperatura da Fase Vapor	20 °C
Fluxo da Fase Vapor	10.000 kmol/hora
Modelo dos Coeficientes :	
Atividade	UNIQUAC c/ UNIFAC
Fugacidade	Equação Virial

Tabela VI.15 - Parâmetros variados para as simulações

Número de Estágios	2 a 25
Pressão da Coluna	1 a 20 atm
Temperatura do Líquido na Alimentação	10 a 40 °C
Fluxo do Líquido na Alimentação	1.000 a 50.000 kmol/hora
Solventes utilizados	Octano, Nonano, Decano e Dodecano

VI.2.1 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DO NÚMERO DE ESTÁGIOS

A tabela VI.16 mostra a influência da variação do número de estágios no resultado obtido para a composição dos componentes na fase vapor. A figura VI.7 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no número de estágios da coluna não produz uma fase vapor mais rica em metano.

Tabela VI.16 - Influência do número de estágios na composição da saída vapor

Número de Estágios	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
2	0.362	0.343	0.295	0.000
5	0.362	0.343	0.295	0.000
10	0.362	0.343	0.295	0.000
15	0.362	0.343	0.295	0.000
20	0.362	0.343	0.295	0.000
25	0.362	0.343	0.295	0.000

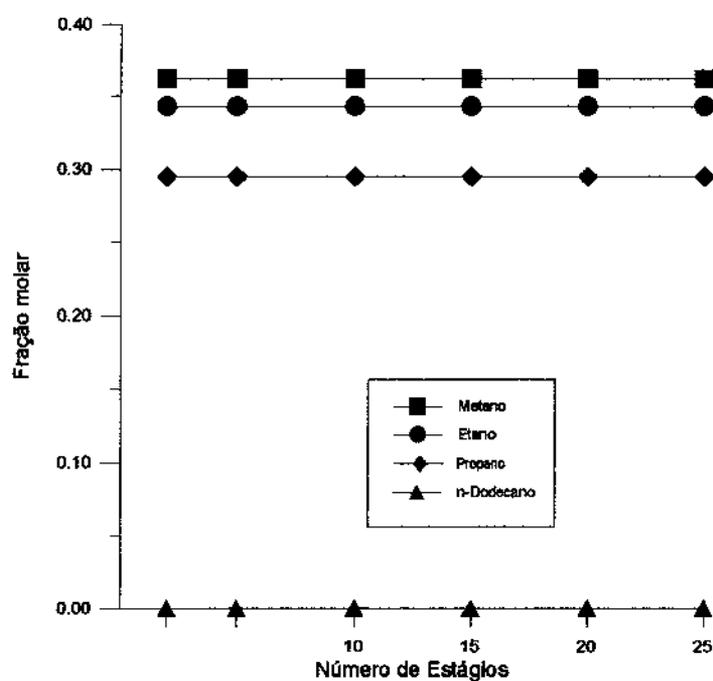


Figura VI.7 - Fração molar do componente na saída vapor x Número de Estágios

A tabela VI.17 mostra a influência da variação do número de estágios no resultado obtido para a composição dos componentes na fase líquida. A figura VI.8 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no número de estágios da coluna não produz uma fase líquida mais rica em propano.

Tabela VI.17 - Influência do número de estágios na composição da saída líquida

Número de Estágios	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
2	0.002	0.018	0.058	0.922
5	0.002	0.017	0.059	0.922
10	0.002	0.017	0.059	0.922
15	0.002	0.017	0.059	0.922
20	0.002	0.017	0.059	0.922
25	0.002	0.017	0.059	0.922

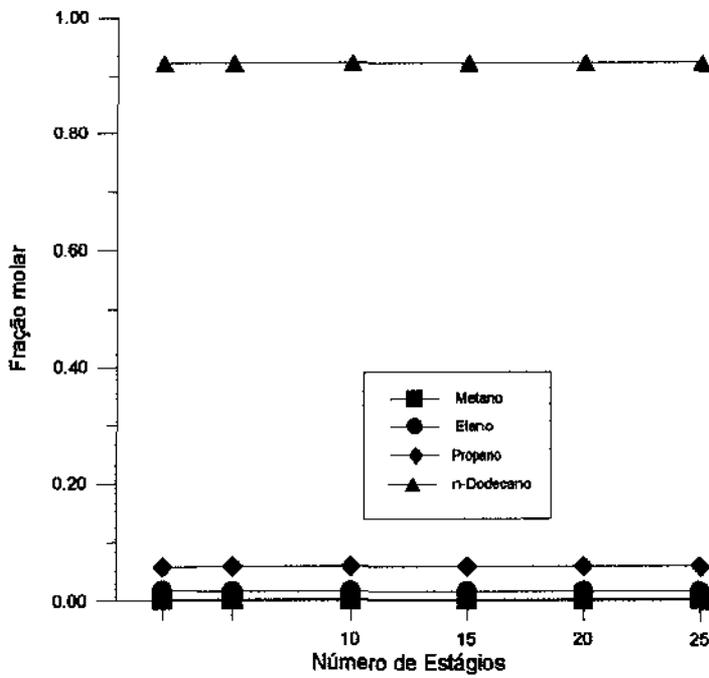


Figura VI.8 - Fração molar do componente na saída líquida x Número de Estágios

A tabela VI.18 mostra a influência da variação do número de estágios no resultado obtido para a temperatura das correntes de saída líquida e vapor. A figura VI.9 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no número de estágios da coluna não produz alterações nas temperaturas nas correntes de saída líquida e vapor.

Tabela VI.18 - Influência do número de estágios nas temperaturas das correntes de saída

Número de Estágios	Temperatura na saída da coluna °C	
	Fase Líquida	Fase Vapor
2	22.612	22.751
5	22.637	22.803
10	22.637	22.803
15	22.637	22.803
20	22.637	22.803
25	22.637	22.803

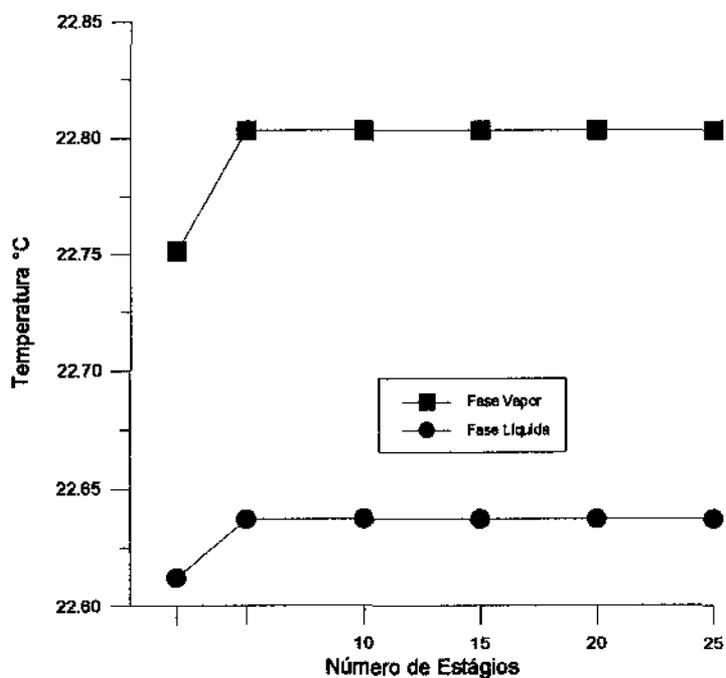


Figura VI.9 - Temperatura das correntes de saída x Número de Estágios

VI.2.2 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DA PRESSÃO

A tabela VI.19 mostra a influência da variação da pressão da coluna no resultado obtido para a composição dos componentes na fase vapor. A figura VI.10 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento da pressão da coluna produz uma fase vapor mais rica em metano.

Tabela VI.19 - Influência da pressão da coluna na composição da saída vapor

Pressão da Coluna (atm)	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
1	0.362	0.343	0.295	0.000
5	0.525	0.394	0.081	0.000
10	0.759	0.241	0.000	0.000
20	1.000	0.000	0.000	0.000

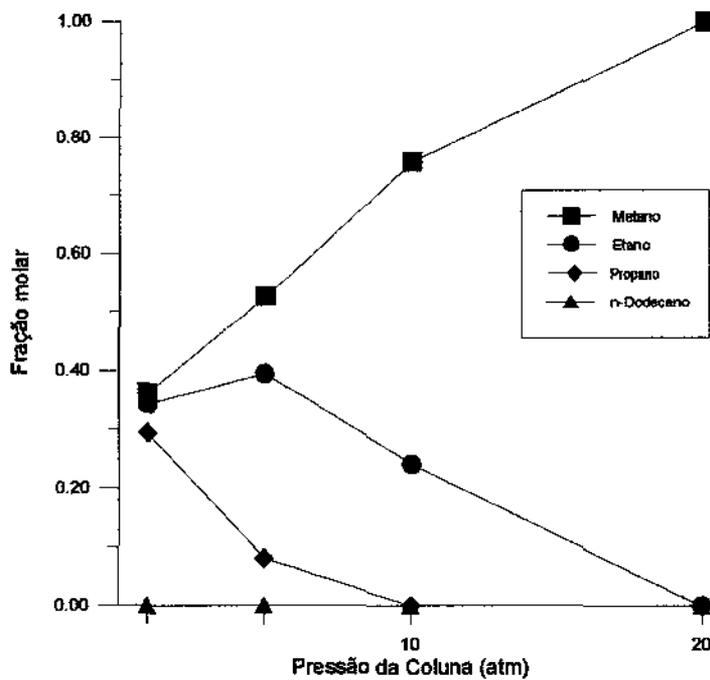


Figura VI.10 - Fração molar do componente na saída vapor x Pressão da Coluna

A tabela VI.20 mostra a influência da variação da pressão da coluna no resultado obtido para a composição dos componentes na fase líquida. A figura VI.11 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento da pressão da coluna produz uma fase líquida mais rica em propano.

Tabela VI.20 - Influência da pressão da coluna na composição da saída líquida

Pressão da Coluna (atm)	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
1	0.002	0.017	0.059	0.922
5	0.007	0.065	0.205	0.723
10	0.015	0.148	0.209	0.628
20	0.045	0.191	0.191	0.573

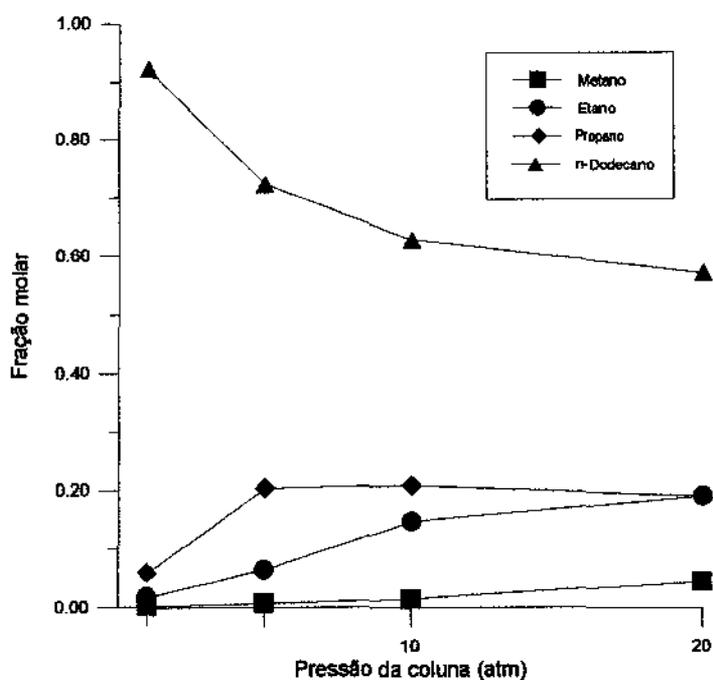


Figura VI.11 - Fração molar do componente na saída líquida x Pressão da Coluna

A tabela VI.21 mostra a influência da variação da pressão da coluna no resultado obtido para a temperatura das correntes de saída líquida e vapor. A figura VI.12 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento da pressão da coluna produz um aumento na temperatura da corrente líquida e uma diminuição na temperatura da corrente vapor.

Tabela VI.21 - Influência da pressão da coluna nas temperaturas das correntes de saída

Pressão da Coluna (atm)	Temperatura na saída da coluna °C	
	Fase Líquida	Fase Vapor
1	22.637	22.803
5	30.766	24.976
10	31.942	22.198
20	31.342	19.891

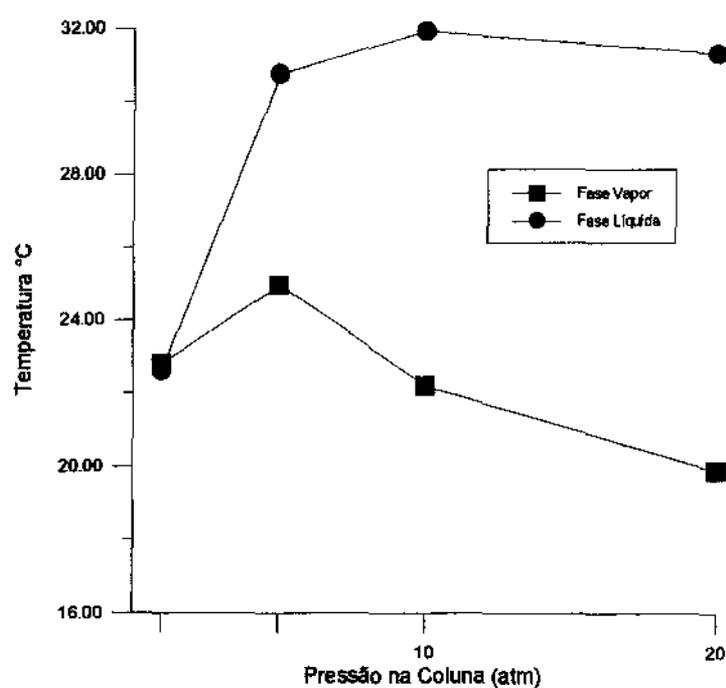


Figura VI.12 - Temperatura das correntes de saída x Pressão da coluna

VI.2.3 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DA TEMPERATURA DA FASE LÍQUIDA

A tabela VI.22 mostra a influência da variação da temperatura da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a composição dos componentes na fase vapor. A figura VI.13 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento na temperatura do líquido produz uma pequena diminuição na fração molar do metano na fase vapor.

Tabela VI.22 - Influência da temperatura da alimentação líquida na composição da saída vapor

Temperatura do Líquido °C	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
10	0.369	0.347	0.284	0.000
20	0.362	0.343	0.294	0.001
30	0.356	0.341	0.302	0.001
40	0.352	0.339	0.308	0.001

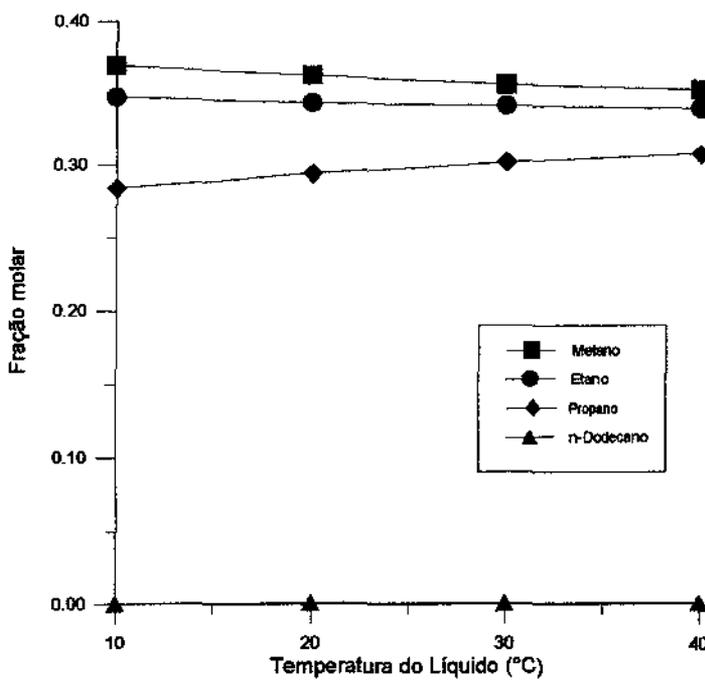


Figura VI.13 - Fração molar do componente na saída vapor x Temperatura do Líquido

A tabela VI.23 mostra a influência da variação da temperatura da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a composição dos componentes na fase líquida. A figura VI.14 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento da temperatura do líquido produz uma pequena diminuição na fração molar do propano na fase líquida.

Tabela VI.23 - Influência da temperatura da alimentação líquida na composição da saída líquida

Temperatura do Líquido °C	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
10	0.002	0.020	0.071	0.907
20	0.002	0.017	0.059	0.922
30	0.002	0.015	0.049	0.934
40	0.002	0.013	0.041	0.944

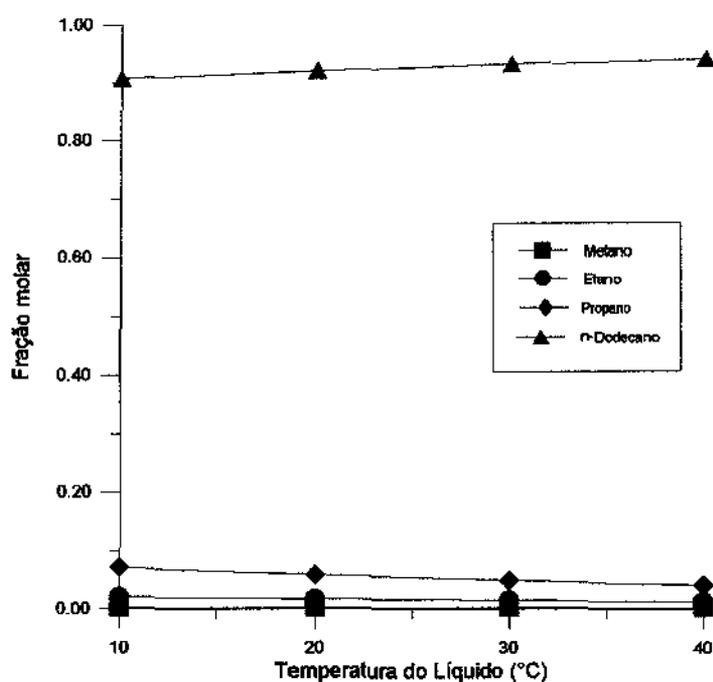


Figura VI.14 - Fração molar do componente na saída líquida x Temperatura do Líquido

A tabela VI.24 mostra a influência da variação da temperatura da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a temperatura das correntes de saída líquida e vapor. A figura VI.15 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento na temperatura da corrente de alimentação líquida produz um aumento significativo na temperatura das correntes líquida e vapor.

Tabela VI.24 - Influência da temperatura da alimentação líquida nas temperaturas das correntes de saída

Temperatura do Líquido °C	Temperatura na saída da coluna °C	
	Fase Líquida	Fase Vapor
10	15.082	13.805
20	22.637	22.803
30	30.381	31.941
40	38.266	41.401

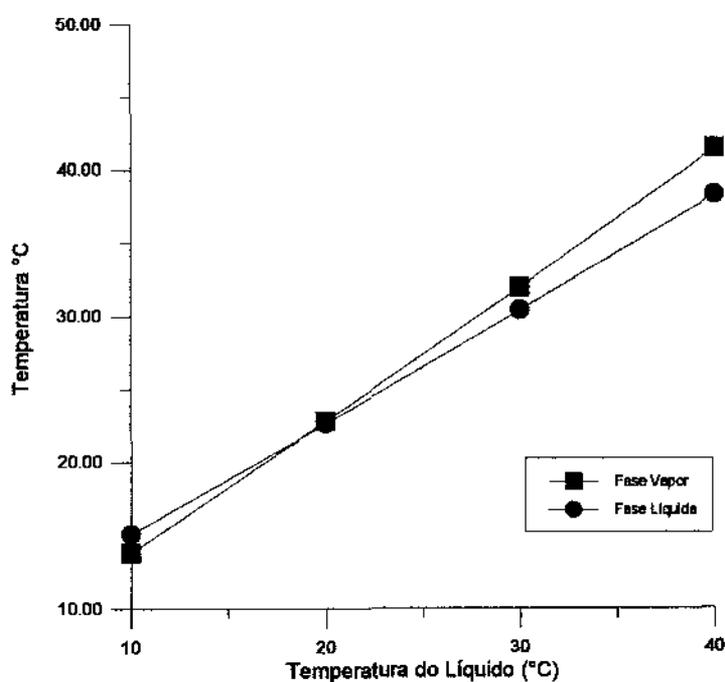


Figura VI.15 - Temperatura das correntes de saída x Temperatura do Líquido

VI.2.4 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DO FLUXO MOLAR DA FASE LÍQUIDA

A tabela VI.25 mostra a influência da variação do fluxo molar da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a composição dos componentes na fase vapor. A figura VI.16 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no fluxo molar do líquido produz uma fase vapor mais rica em metano.

Tabela VI.25 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida na composição da saída vapor

Fluxo do Líquido (kmol/h)	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
1000	0.336	0.334	0.329	0.001
10000	0.362	0.343	0.294	0.001
20000	0.396	0.355	0.248	0.001
50000	0.553	0.407	0.040	0.000

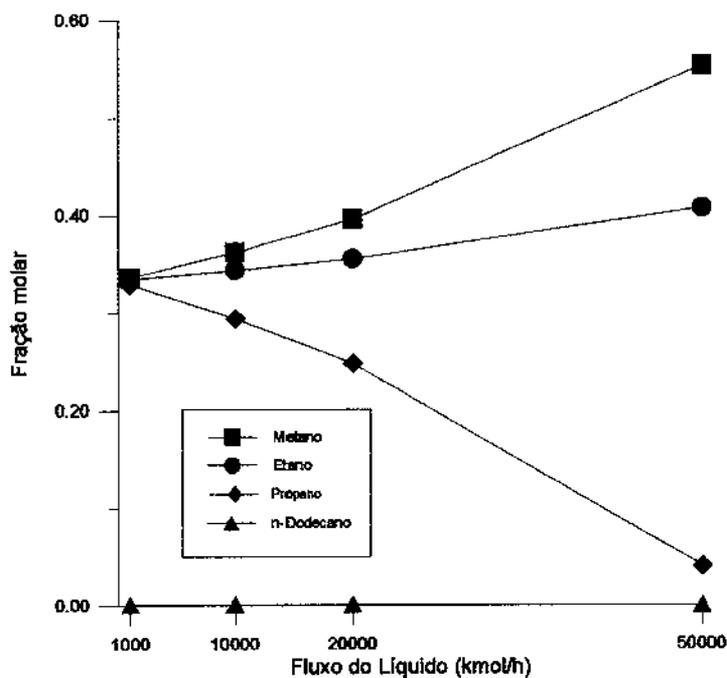


Figura VI.16 - Fração molar do componente na saída vapor x Fluxo do Líquido

A tabela VI.26 mostra a influência da variação do fluxo molar da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a composição dos componentes na fase líquida. A figura VI.17 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no fluxo molar do líquido produz uma pequena diminuição na fração molar do propano na fase líquida.

Tabela VI.26 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida na composição da saída líquida

Fluxo do Líquido (kmol/h)	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
1000	0.002	0.018	0.063	0.917
10000	0.002	0.017	0.059	0.922
20000	0.002	0.017	0.059	0.922
50000	0.002	0.018	0.057	0.923

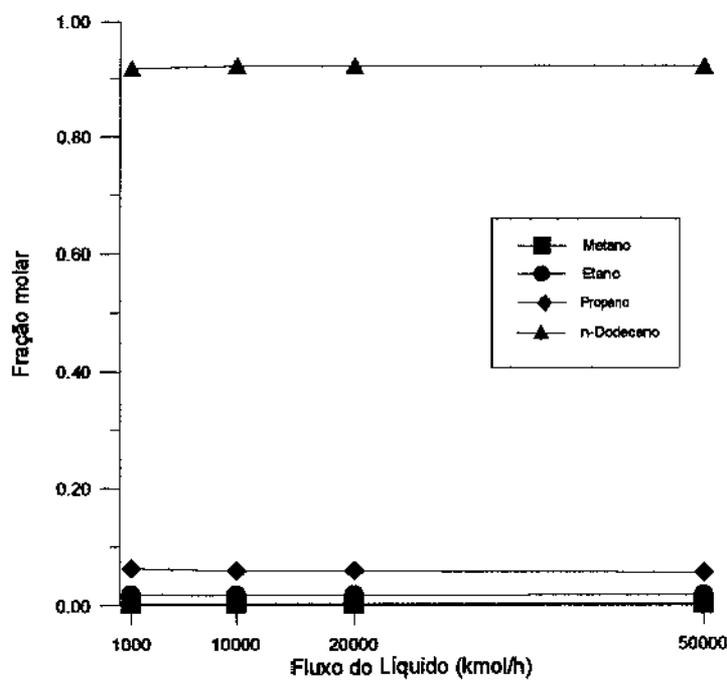


Figura VI.17 - Fração molar do componente na saída líquida x Fluxo do Líquido

A tabela VI.27 mostra a influência da variação do fluxo molar da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a temperatura das correntes de saída líquida e vapor. A figura VI.18 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento na temperatura da corrente de alimentação líquida produz um aumento na temperatura da corrente líquida e uma diminuição da temperatura da fase vapor.

Tabela VI.27 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida nas temperaturas das correntes de saída

Fluxo do Líquido (kmol/h)	Temperatura na saída da coluna °C	
	Fase Líquida	Fase Vapor
1000	19.920	22.089
10000	22.637	22.803
20000	22.864	22.450
50000	22.948	20.778

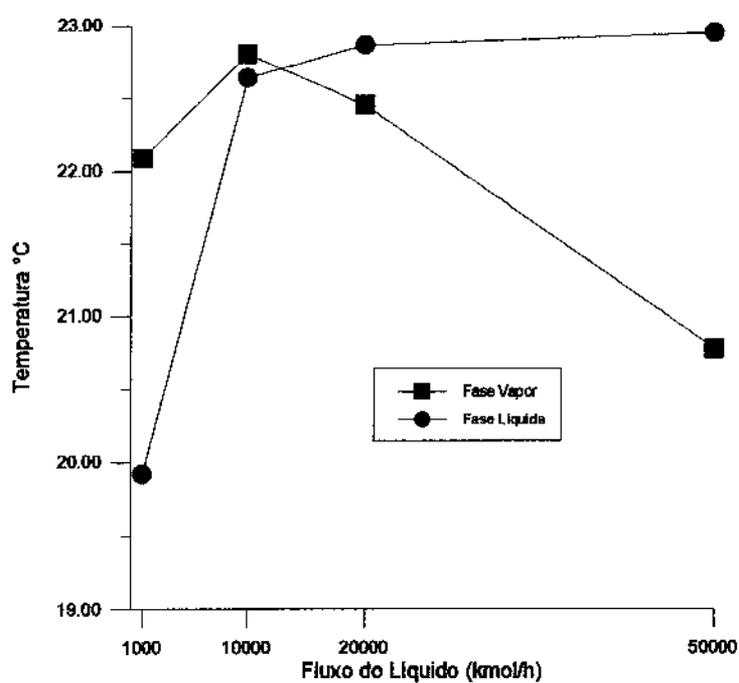


Figura VI.18 - Temperatura das correntes de saída x Fluxo do Líquido

VI.2.5 INFLUÊNCIA DO PESO MOLECULAR DO SOLVENTE

A tabela VI.28 mostra a influência da variação do peso molecular do solvente no resultado obtido para a composição dos componentes na fase vapor. A figura VI.19 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no peso molecular do líquido utilizado como solvente produz uma fase vapor mais rica em metano.

Tabela VI.28 - Influência do peso molecular do solvente na composição da saída vapor

Solvente utilizado	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
Octano	0.350	0.336	0.297	0.017
Nonano	0.356	0.340	0.299	0.005
Decano	0.358	0.342	0.298	0.002
dodecano	0.362	0.343	0.294	0.001

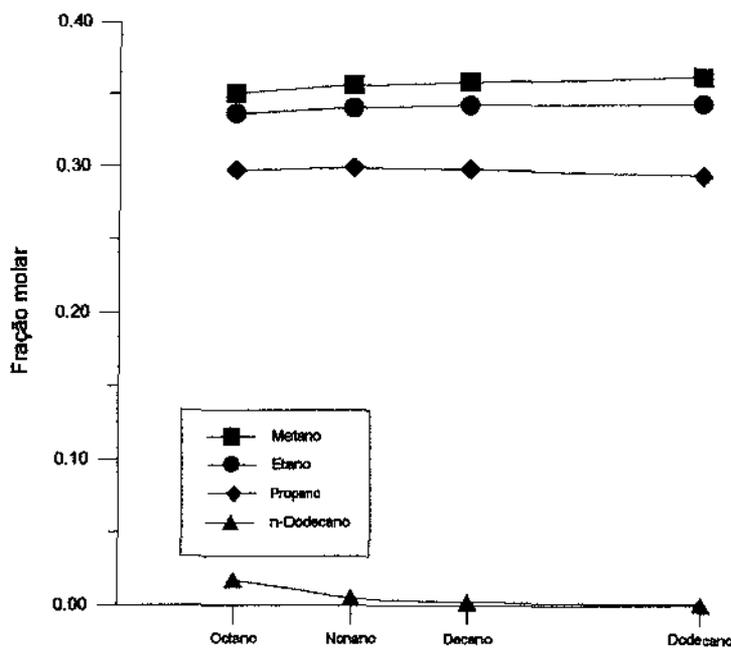


Figura VI.19 - Fração molar do componente na saída vapor x Peso Molecular do Solvente

A tabela VI.29 mostra a influência da variação do peso molecular do solvente no resultado obtido para a composição dos componentes na fase líquida. A figura VI.20 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no peso molecular do líquido produz um pequeno aumento na fração molar do propano na fase líquida.

Tabela VI.29 - Influência do peso molecular do solvente na composição da saída líquida

Solvente utilizado	Fração molar do componente			
	Metano	Etano	Propano	n-Dodecano
Octano	0.001	0.014	0.050	0.935
Nonano	0.001	0.015	0.051	0.933
Decano	0.002	0.016	0.054	0.928
Dodecano	0.002	0.017	0.059	0.922

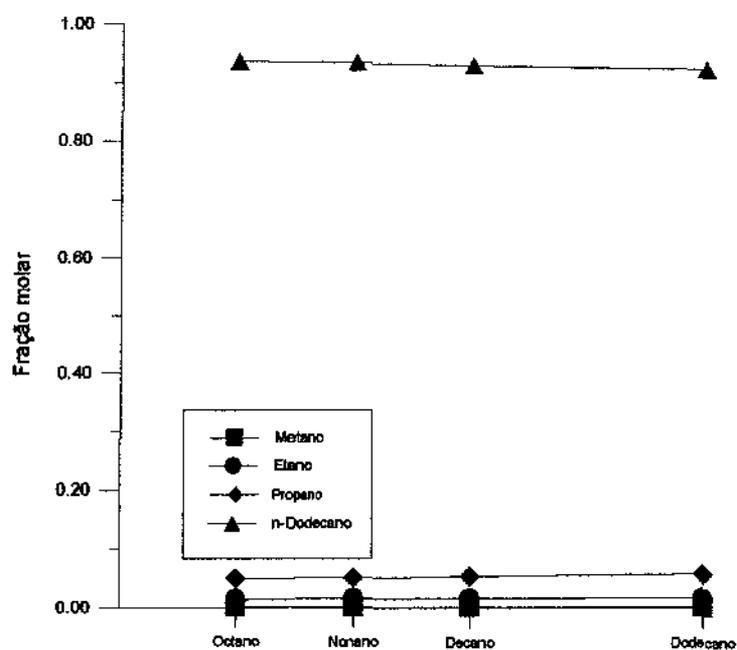


Figura VI.20 - Fração molar do componente na saída líquida x Peso Molecular do Solvente

A tabela VI.30 mostra a influência da variação do peso molecular do solvente no resultado obtido para a temperatura das correntes de saída líquida e vapor. A figura VI.21 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento no peso molecular do líquido produz um aumento na temperatura da corrente líquida e uma diminuição da temperatura da fase vapor.

Tabela VI.30 - Influência do peso molecular do solvente nas temperaturas das correntes de saída

Solvente utilizado	Temperatura na saída da coluna °C	
	Fase Líquida	Fase Vapor
Octano	20.248	23.257
Nonano	21.964	23.071
Decano	22.257	22.636
Dodecano	22.637	22.803

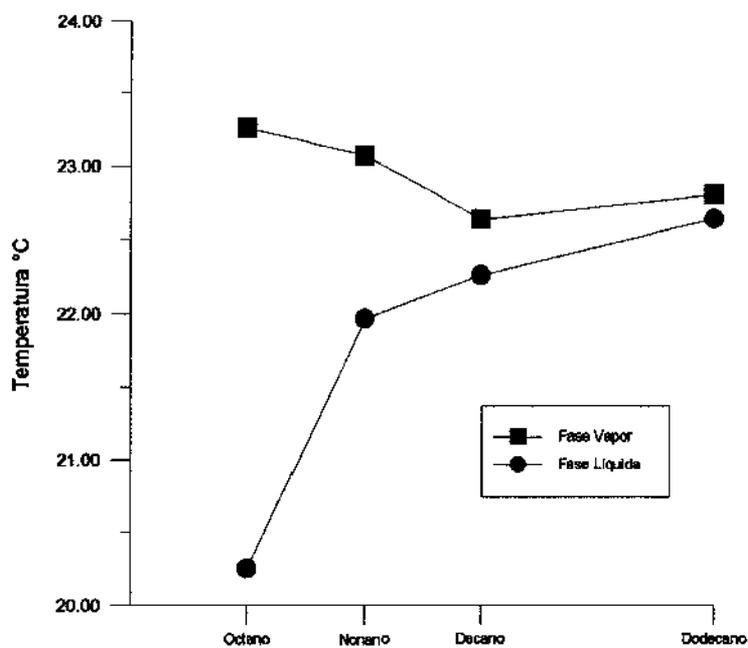


Figura VI.21 - Temperatura das correntes de saída x Peso Molecular do Solvente

Pelos resultados mostrados anteriormente pode-se afirmar que:

- o aumento no número de estágios da coluna não produz alterações nas composições e nas temperaturas das correntes de saída líquida e vapor. Isto ocorre porque, na pressão de 1 atmosfera, o sistema estudado (metano-propano-butano-dodecano) atinge o equilíbrio rapidamente, não permitindo uma maior transferência de massa entre as fases. Por exemplo, a corrente de alimentação vapor entra com uma fração molar de metano igual a 0.333 e sai da coluna com uma fração molar igual a 0.362.

- o aumento da pressão da coluna aumenta a fração molar do componente mais leve (metano) na corrente de saída vapor e aumenta a fração molar do componente mais pesado (propano) na corrente de saída líquida. A pressão influi diretamente na constante de equilíbrio termodinâmico (equação 21). A compressão dos componentes mais pesados (etano e propano) aumenta a absorção dos mesmos na fase líquida, condensando-os e deixando a fase vapor mais rica no componente mais leve (metano). Esta condensação transfere calor da fase vapor para a fase líquida, explicando assim a diminuição da temperatura da corrente de saída vapor e o aumento da temperatura da corrente de saída líquida.

- o aumento da temperatura da corrente líquida produz uma pequena diminuição do componente mais leve (metano) na corrente de saída vapor e do componente mais pesado (propano) na corrente de saída líquida. Esta pequena diminuição é resultado das alterações ocorridas na equação da constante de equilíbrio termodinâmico (equação 21), principalmente no que diz respeito à pressão de vapor dos componentes. O aumento das temperaturas das correntes de saída líquida e vapor já era esperado, devido à maior quantidade de calor introduzida na coluna, ao aumentar-se a temperatura da corrente de alimentação líquida.

- o aumento do fluxo molar da corrente líquida permite uma maior transferência de massa entre as fases líquida e vapor no interior da coluna, aumentando a fração molar do componente mais leve (metano) na corrente de saída líquida. O componente mais pesado (propano) apesar de ter sua fração molar diminuída (que é uma medida relativa) têm seu fluxo molar (que é uma medida absoluta) aumentado, na corrente de saída líquida. A tabela VI.31, repete os valores contidos na tabela VI.26, acrescentando os fluxos molares. O aumento da temperatura da corrente de saída líquida e a diminuição da temperatura da corrente de saída vapor é explicada pelos mesmos fenômenos anteriormente descritos para o aumento da pressão da coluna.

Tabela VI.31 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida na composição da saída líquida

Fluxo do Líquido (kmol/h)	Fração molar (ou fluxo molar) do componente							
	Metano		Etano		Propano		n-Dodecano	
	fração	fluxo	fração	fluxo	fração	fluxo	fração	fluxo
1000	0.002	1.941	0.018	19.956	0.063	68.639	0.917	998.825
10000	0.002	19.027	0.017	188.975	0.059	638.113	0.922	9998.837
20000	0.002	37.990	0.017	376.243	0.059	1268.536	0.922	19998.972
50000	0.002	95.619	0.018	950.873	0.057	3095.873	0.923	49999.365

- o aumento do peso molecular do solvente produz um pequeno aumento na fração molar do componente mais leve (metano) na corrente de saída vapor e na fração molar do componente mais pesado (propano) na corrente de saída líquida. Isto ocorre porque com o aumento do peso molecular, a volatilidade diminui e a tendência é um aumento do componente na fase líquida.

Portanto, as condições que permitem uma otimização do processo de absorção, para o sistema estudado, são:

- aumento da pressão da coluna;
- diminuição da temperatura da corrente de alimentação líquida;
- aumento do fluxo molar da corrente de alimentação líquida;

- aumento do peso molecular do solvente.

VI.2.6 UTILIZAÇÃO DA EQUAÇÃO CÚBICA DE PENG-ROBINSON USANDO O SIMULADOR ASPEN

Paralelamente ao desenvolvimento deste trabalho, e como contribuição a ele, foi feita a simulação para cada um dos seis casos mencionados anteriormente (itens VI.1.1 a VI.1.6) utilizando a equação de estado cúbica de Peng-Robinson, a qual representa bem o comportamento de misturas de hidrocarbonetos. O objetivo foi comparar os perfis de temperatura para cada um dos casos em relação ao procedimento gama-fi utilizado neste trabalho.

A conclusão obtida é que, embora os perfis sejam qualitativamente idênticos, quantitativamente os resultados diferem um pouco. Para os casos que contém variação dos componentes mais pesados, o máximo de temperatura não coincidiu. Em um dos casos, o máximo de temperatura deu maior com a equação de Peng-Robinson e nos outros dois, deu maior com o procedimento gama-fi.

VI.3 SIMULAÇÃO DA ABSORÇÃO DE UMA CORRENTE GASOSA PROVENIENTE DE UM INCINERADOR

Uma corrente gasosa proveniente de um incinerador de resíduos perigosos (Theodore e Reynolds, 1987) deve passar por um equipamento de controle de poluição, antes do lançamento da mesma na atmosfera. De acordo com a *NB 1265 - Incineração de Resíduos Sólidos Perigosos - Padrões de Desempenho* (ABNT, 1989) o padrão de emissão para HCl prevê um fluxo máximo de 1.8 kg/h ou 99 % de redução para resíduos com teor de Cl superior a 0.5 % .

É utilizada uma coluna de absorção de pratos para promover o controle anteriormente descrito. Para tanto é feita a simulação da mesma utilizando o programa ABSIM. O solvente utilizado é a água. As condições da alimentação vapor encontram-se na tabela VI.32.

Tabela VI.32 - Condições da alimentação vapor

COMPONENTE	Fluxo de entrada		
	kmol/hora	Kg/hora	fração molar
Água	2234.5	40198.49	0.5172
Dióxido de Carbono	123.6	5453.63	0.0287
Nitrogênio	1730.7	48436.77	0.4006
Oxigênio	228.4	7309.76	0.0529
Ácido Clorídrico	2.4	87.54	0.0006

Para atingir o preconizado pela norma anteriormente descrita, a corrente de saída vapor deverá ter um fluxo molar em HCl, no máximo, de 0.049 kmol/h (equivalente a 1.8 kg/h).

Novamente, serão variados alguns parâmetros (número de estágios, pressão da coluna, temperatura e fluxo molar do líquido na alimentação) para verificação da

melhor condição em que a coluna alcança os seus objetivos. A tabela VI.33 mostra a faixa de variação dos parâmetros selecionados.

Tabela VI.33 - Parâmetros variados para as simulações

Número de Estágios	2 a 20
Pressão da Coluna	1 a 20 atm
Temperatura do Líquido na Alimentação	10 a 40 °C
Fluxo do Líquido na Alimentação	1.000 a 100.000 kmol/hora

VI.3.1 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DO NÚMERO DE ESTÁGIOS

A tabela VI.34 mostra a influência da variação do número de estágios no resultado obtido para a composição do HCl na fase vapor. A figura VI.22 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, com o aumento do número de estágios da coluna, a corrente de saída vapor não alcança o padrão de emissão estabelecido.

Tabela VI.34 - Influência do número de estágios no fluxo molar de HCl na saída vapor

Número de Estágios	Fluxo de HCl na corrente de saída vapor	
	kmol/h	fração molar
2	2.347	0.001
5	2.351	0.001
10	2.353	0.001
15	2.351	0.343
20	2.351	0.343

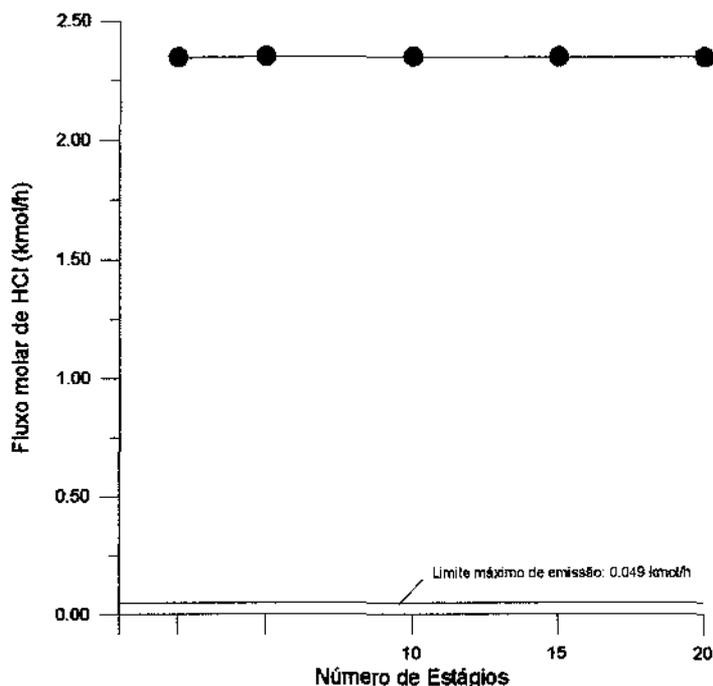


Figura VI.22 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x Número de Estágios

VI.3.2 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DA PRESSÃO

A tabela VI.35 mostra a influência da variação da pressão da coluna no resultado obtido para a composição do HCl na fase vapor. A figura VI.23 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento da pressão da coluna, próximo de 20 atm, faz com que a saída vapor ultrapasse o padrão de emissão estabelecido.

Tabela VI.35 - Influência da pressão da coluna no fluxo molar de HCl na saída vapor

Pressão da coluna (atm)	Fluxo de HCl na corrente de saída vapor	
	Kmol/h	fração molar
1	2.347	0.001
5	2.169	0.001
10	0.811	0.000
20	0.004	0.000

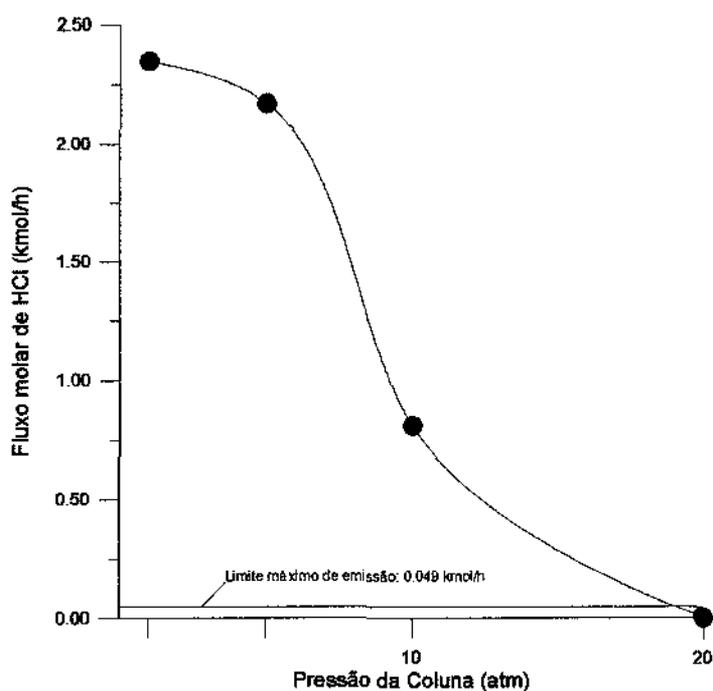


Figura VI.23 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x Pressão da Coluna

VI.3.3 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DA TEMPERATURA DA FASE LÍQUIDA

A tabela VI.36 mostra a influência da variação da temperatura da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a composição do HCl na fase vapor. A figura VI.24 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, com o aumento da temperatura da corrente de alimentação líquida, a corrente de saída vapor não alcança o padrão de emissão estabelecido.

Tabela VI.36 - Influência da temperatura da alimentação líquida no fluxo de HCl na saída vapor

Temperatura do Líquido (°C)	Fluxo de HCl na corrente de saída vapor	
	kmol/h	fração molar
10	2.350	0.001
20	2.351	0.001
30	2.352	0.001
40	2.353	0.001

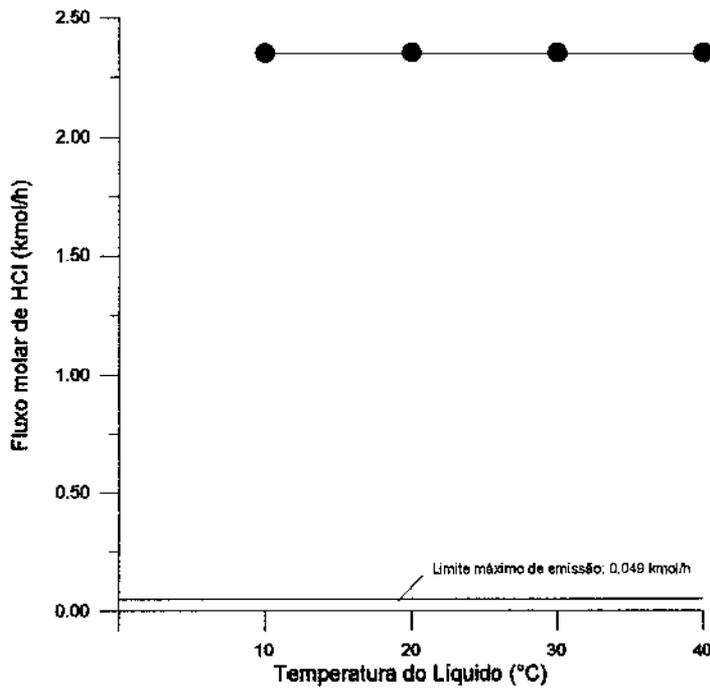


Figura VI.24 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x Temperatura de alimentação do líquido

VI.3.4 INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DO FLUXO MOLAR DA FASE LÍQUIDA

A tabela VI.37 mostra a influência da variação do fluxo molar da corrente de alimentação líquida no resultado obtido para a composição do HCl na fase vapor. A figura VI.25 mostra os resultados na forma gráfica. Conforme pode-se observar, um aumento do fluxo molar da alimentação líquida, possivelmente fará com que a saída vapor alcance o padrão de emissão estabelecido.

Tabela VI.37 - Influência do fluxo molar da alimentação líquida no fluxo de HCl na saída vapor

Fluxo do Líquido (kmol/h)	Fluxo de HCl na corrente de saída vapor	
	kmol/h	fração molar
1000	2.395	0.001
10000	2.351	0.001
20000	2.262	0.001
50000	1.384	0.001
100000	0.149	0.001

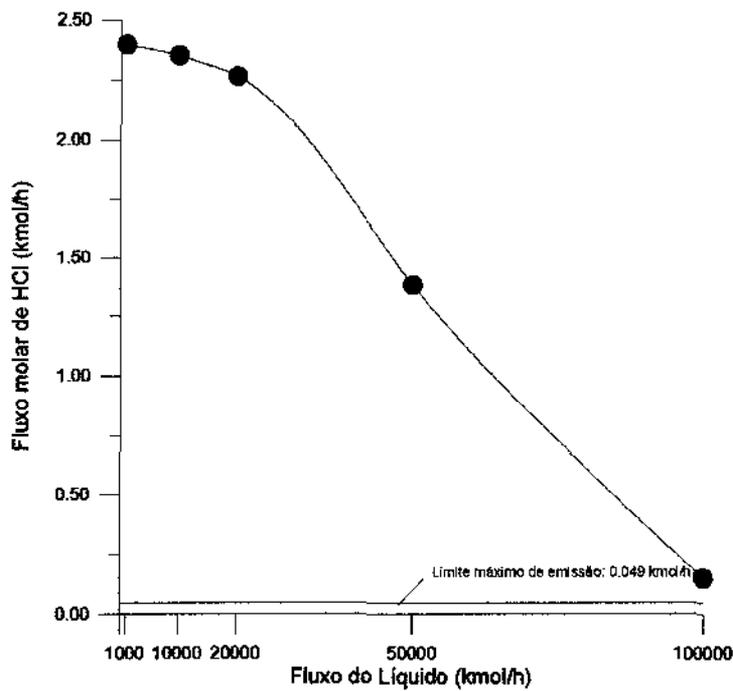


Figura VI.25 - Fluxo molar de HCl na saída vapor x Fluxo molar de alimentação do líquido

Pelos resultados mostrados anteriormente, pode-se afirmar que, o objetivo de lançar o HCl na atmosfera com um fluxo não superior a 1.8 kg/h ou 0.049 kmol/h, para atender ao padrão estabelecido na NB 1265, somente será conseguido se a coluna operar com uma combinação de alta pressão com alto fluxo molar de alimentação do líquido.

A decisão entre uma ou outra condição depende de considerações econômicas, pois, assim como a manutenção de alta pressão no interior da coluna possui um custo de energia envolvido, o aumento do fluxo de líquido no fundo da coluna pode exigir investimentos de grande monta, pois este líquido deverá ser tratado adequadamente, antes do lançamento do mesmo em corpos d'água.

CAPÍTULO VIII

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Os objetivos propostos para o trabalho foram atingidos. A modelagem e o software desenvolvidos para a simulação de uma coluna de absorção de pratos, utilizando uma metodologia desenvolvida anteriormente para colunas de destilação, apresentaram desempenho e robustez compatíveis com o existente no simulador comercial de processos ASPEN. Além disso, o efeito térmico demonstrado nestas colunas, mesmo para sistemas considerados ideais, o qual não é comumente mencionado na literatura, foi importante para um melhor entendimento no balanço de energia de colunas de absorção de pratos. Explicando melhor: aumentos significativos de temperatura foram observados ao longo da coluna. Se se observar este perfil do ponto de vista de um simulador comercial, surgem as questões, sobre qual o termo no balanço de energia que contribui para este aumento. Ao se fazer a modelagem e utilizar o software desenvolvido, verifica-se que não há termo adicional no balanço, mas que os termos de entalpia considerados como na destilação já incorporam as mudanças no perfil anormal de temperatura (anormal, considerando-se sistema ideal).

O estudo da variação de alguns parâmetros foi feito como o objetivo de otimizar o desempenho. Neste caso, foi verificado que, para o sistema estudado, a coluna apresenta maior eficiência quando operada sob pressão, com um maior fluxo molar e uma menor temperatura da alimentação líquida e com um solvente de maior peso molecular. Apesar de a variação do número de estágios da coluna não ter apresentado influência no aumento da absorção para o sistema estudado, esta situação não deve ser estendida para outros sistemas.

Para uma corrente gasosa proveniente de um incinerador de resíduos perigosos, a coluna de pratos mostrou-se um equipamento possível de ser utilizado para o controle da poluição atmosférica, reduzindo o fluxo de HCl lançado na atmosfera, de acordo com os padrões da NB 1265. Este objetivo somente é alcançado quando a coluna opera com uma combinação de alta pressão com alto fluxo molar da alimentação líquida. Este caso mostra a importância do estudo da simulação em sistemas em que não há dados experimentais disponíveis.

O desenvolvimento de um software, para o cálculo interativo, mostrou-se uma importante ferramenta de trabalho, possibilitando uma otimização e um aumento da produtividade na realização das simulações. A visualização imediata dos resultados na tela propicia uma rapidez na tomada de decisões durante as simulações.

Além disso, tem-se agora em mãos a modelagem e o software para dar o início aos trabalhos a serem comentados a seguir.

Fazendo parte de trabalhos futuros que poderão ser realizados no Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS) do DPQ/FEQ/UNICAMP, tem-se como metas:

- 1) Introduzir a equação de estado Peng-Robinson dentro de um procedimento de cálculo fi-fi. Ponto de partida: a modelagem desenvolvida neste trabalho e o software ABSIM.
- 2) Considerar o processo de absorção com reação química. Ponto de partida: idem ao item anterior.
- 3) Fazer a modelagem dinâmica de colunas de absorção de pratos. Ponto de partida: idem ao item anterior.

4) Aperfeiçoar os cálculos dos coeficientes de atividade e de fugacidade para representar os diversos tipos de sistemas. Ponto de partida: idem ao item anterior.

CAPÍTULO VIII

BIBLIOGRAFIA

- ABNT - ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS; "NB 1265 - Incineração de Resíduos Sólidos Perigosos - Padrões de Desempenho", ABNT, 1989.
- BART, H.J. e BURTSCHER, K.; "Sour Gas Absorption and Regenerative Distillation"; Icheme Symposium Series N° 128, A391-A402, 1994.
- BEGGS, H.D.; "Gas Production Operation"; Oil & Gas Consultants International Inc. 3rd printing. June, 1991.
- BINGHAM, M.D.; "Field Detection and Implications of Mercury in Natural Gas"; SPE Production Engineering; May, 1990.
- BORTON, A.F.M; Handbook of Solubility Parameters and Other Cohesion Parameters; CRC Press, 1983.
- BOURNE, J.R., STOCKAR, U.v. e COOGAN, G.C.; "Gas Absorption with Heat Effects. I. A New Computacional Method"; Ind. Eng. Chem., Process Des. Develop., Vol. 13(2):115-123, 1974 a.
- BOURNE, J.R., STOCKAR, U.v. e COOGAN, G.C.; "Gas Absorption with Heat Effects. II. Experimental Results"; Ind. Eng. Chem., Process Des. Develop., Vol. 13(2):124-132, 1974 b.

- COOGAN, G.C. e BOURNE, J.R.; "Gas Absorption with Heat Effects. I. A General Program for Adiabatic Plate Absorbers"; Trans. Instn Chem. Engrs., Vol. 47: T96-T106, 1969 a.
- COOGAN, G.C. e BOURNE, J.R.; "Gas Absorption with Heat Effects. II. Methods for Improving Separation"; Trans. Instn Chem. Engrs., Vol. 47: T160-T165, 1969 b.
- FEINTUCH, H.M.; Ph.D. Tesis, New York Univeristy, 1973.
- FEINTUCH, H.M. e TREYBAL, R.E.; "The Design of Adiabatic Packed Towers for Gas Absorption and Stripping"; Ind. Eng. Chem., Process Des. Develop., Vol. 17(4): 505-513, 1978.
- FOUST, A.S., WENZEL, R.E., CLUMP, C.W. et al.; Princípio das Operações Unitárias, 2ª edição; Editora Guanabara Dois, 1982.
- FREDENSLUND, A., GMEHLING, J. e RASMUSSEN, P.; Vapor-liquid Equilibria Using UNIFAC - a Group Contribution Method; Elsevier Scientific Publishing, 1977.
- GOMES, L.G. e MACIEL, M.R.W., "Otimização do Processo de Absorção Refrigerada de uma UPGN"; 10º Congresso Brasileiro de Engenharia Química, São Paulo, 13-16 de setembro de 1994.
- GROTTOLI, M.G., BIARDI, G. e PELLEGRINI, L.; "A New Simulation Model for a Real Trays Absorption Column", Computer & Chemical Engineering, Vol 15(3): 171-179, 1991.

HSIEH, C.L., McNULTY, K.J., SHSIKH, O.A et al.; "Improved User Friendly PC-base Program for Rating and Design of Trayed and Packed Fractionation Columns"; AICHE Spring National Meeting, March 30, 1994.

JAIVONG, C. e TIQIAN, J.; "Study on Chemical Absorption with Second-order Irreversibel Reaction in the Film Flow of Non-newtonian Power Law Fluids"; Journal of Chemical Industry and Engineering (China), Vol. 1(1): 45-56, 1986.

KISTER, H.Z. e GILL, D.R.; Industrial Chemical Engineering Progress, Vol 87(2):32-42, 1980.

KOOIJMAN, N.A., TAYLOR, R.; "A Nonequilibrium Model for Dynamic Simulation of Tray Distillation Columns", AICHE Journal, Vol. 41 (8):1852-1863, 1995.

KRISHNAMURTHY, R. E TAYLOR, R.; "A Nonequilibrium Stage of Multicomponent Separation Processes - Part I: Model Description and Method of Solution", AICHE Journal, Vol. 31 (3):449-456, 1985.

KRISHNAMURTHY, R. E TAYLOR, R.; "Absorber Simulation and Design Using a Nonequilibrium Model", Can. J. Chem. Eng., Vol. 64:96-105, 1986.

LEVA, M.; Chemical Engineering Progress, Vol. 88(1): 65-72, 1992.

MACIEL, M.R.W. e SILVEIRA, A.M.; "Rigorous Modelling and Simulation of Absorption Tower for Waste Minimization", The 11th International Congress of Chemical Engineering, Chemical Equipment Design and Automation, August 29 - September 3, Praha, Czech Republic, 1993.

- McCABE, W.L., SMITH, J.C. e HARRIOTT, P.; Unit Operations of Chemical Engineering, 5th edition, McGraw-Hill, 1993.
- McDANEIL, R., BASSYONI, A.A. e HOLLAND, C.D.; "Use of Results of Field Tests in the Modeling of Packed Distillation Columns and Packed Absorbers - III"; Chemical Engineering Science, Vol. 25:633-651, 1970.
- McNULTY, K.J.; "Effective Design for Absorption and Stripping"; Chemical Engineering, McGraw Hill, 1994.
- NAPHTALI, L.M. e SANDHOLM, D.P.; "Multicomponent Separation Calculations by Linearization"; AIChE Journal, Vol. 17 (1):148-153, 1971.
- PERRY, R.H. e CHILTON, C.H.; Manual de Engenharia Química, 5^a edição; 1980.
- PESCARINI, M.H. e MACIEL, M.R.W; "Development of a Software for Simulation Separation Processes Using a Nonequilibrium Stage Model"; Computer & Chemical Engineering, Vol. 20:279-284, 1996.
- PRESS, W.H., FLANNERY, B.P., TEUKOLSKY, S.A et al.; Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing (FORTRAN Version); Cambridge University Press, 1990.
- PRAUSNITZ, J.M.; "Solubility Thermodynamics in Chemical Engineering"; J. Phys. Chem., Vol. 66:640-645, 1962.
- PRAUSNITZ, J.M. e SHAIR, F.H.; "A Thermodynamic Correlation of Gas Solubilities"; AIChE Journal, Vol. 7:682-687, 1961.

- PRAUSNITZ, J.M., ECKERT, C.A. e O'CONNELL, J.P.; Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria; Prentice Hall, 1980.
- RASCOL, E., MEYER, M. e PREVOST, M.; "Simulation and Parameter Sensitivity Analysis of Acid Gas Absorption into Mixed Alkanolamine Solutions"; European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 6. Part B.; Vol. 20:S1401-S1406, 1996.
- REID, R.C., PRAUSNITZ, J.M. e POLING, B.E.; The Properties of Gases and Liquids, 4th edition; McGraw-Hill, 1987.
- REID, R.C., PRAUSNITZ, J.M. e SHERWOOD, T.K.; The Properties of Gases and Liquids, 3rd edition; McGraw-Hill, 1977.
- RAAL, J.D. e KHURANA, M.K.; "Gas Absorption with Large Effects in Packed Columns", Can. J. Chem. Eng., Vol. 51: 162, 1973.
- ROCCA, A.F.C., IACOVONE, A.M.M.B., BARROTTI, A.J. et al.; Resíduos Sólidos Industriais, 2^a edição; CETESB/ASCETESB, 1993.
- RUBAC, R.E., McDANIEL, R. e HOLLAND, C.D.; "Packed Distillation Columns and Absorbers and Steady State Operation", AIChE Journal, Vol. 15:568, 1969.
- SHODA, E.T.; "Análise de Flexibilidade e Otimização de Colunas de Absorção Através de Simulador Comercial de Processos", Projeto de Iniciação Científica - Projeto PIBIC/CNPq; Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS), DPQ/FEQ/UNICAMP, 1996.

- SHULMAN, H.L, ULLRICH, C.F. e WELLS, N.; "Performance of Packed Columns: I. Total, Static and Operating Holdups", AICHE Journal, Vol. 1(2):247, 1955.
- SIVASUBRAMANIAN, M.S., TAYLOR, R. e KRISHNAMURTHY, R.; "A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Processes. Part IV: A New Approach to Packed Column Design", AICHE Journal, Vol. 33 (2):325-327, 1987.
- SMITH, J.M. e VAN NESS, H.C.; Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, 3ª edição; Editora Guanabara Dois, 1980.
- THEODORE, L. e REYNOLDS, J.; Introduction to Hazardous Waste Incineration; John Wiley & Sons, 1987.
- TREYBAL, R.E.; "Adiabatic Gas Absorption and Stripping in Packed Towers"; Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 61(7): 36-41, 1969.
- VEGGINI, A.A. e GONTARSKI, C.A.U.; "Avaliação de um Simulador para Colunas de Absorção", Projeto do Curso de Doutorado; Laboratório de Desenvolvimento de Processos de Separação, (LDPS) DPQ/FEQ/UNICAMP, 1996.
- WALLAS, S.M.; Phase Equilibria in Chemical Engineering; Butterworth Publishers, 1985.
- WIESNER, U., M. WITTIG e A. GÓRAK; "Design and Optimization of a Nitric Acid Recovery Plant from Nitrous Waste Gases"; European Symposium on Computer Aided Process Engineering - 6. Part B.; Vol. 20:S1425-S1430, 1996.

APÊNCIDE A

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Fase Vapor Ideal

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3313.977	0.181	19.023	0.001
2	3143.080	0.172	189.921	0.009
3	2689.423	0.147	644.577	0.030
4	1.086	0.000	9998.914	0.461

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.664	295.814
02	23.056	296.206
03	23.112	296.262
04	23.120	296.270
05	23.121	296.271
06	23.121	296.271
07	23.121	296.271
08	23.116	296.266
09	23.084	296.234
10	22.826	295.976

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) n-butano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Fase Vapor Ideal

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3313.739	0.139	19.261	0.001
2	3155.401	0.133	177.599	0.005
3	1459.386	0.061	1874.614	0.052
4	1.327	0.000	9998.673	0.276

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	29.889	303.039
02	31.098	304.248
03	31.245	304.395
04	31.259	304.409
05	31.252	304.402
06	31.221	304.371
07	31.124	304.274
08	30.826	303.976
09	29.920	303.070
10	27.301	300.451

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) n-pentano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Fase Vapor Ideal

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3311.670	0.171	21.330	0.001
2	3158.372	0.163	174.628	0.004
3	.129	0.000	3333.871	0.082
4	.651	0.000	9999.349	0.246

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	41.650	314.800
02	38.860	312.010
03	32.244	305.394
04	26.357	299.507
05	22.820	295.970
06	21.308	294.458
07	20.776	293.926
08	20.606	293.756
09	20.552	293.702
10	20.517	293.667

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) n-butano(2) n-pentano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Fase Vapor Ideal

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3311.974	0.322	21.026	0.001
2	1819.338	0.177	1513.662	0.051
3	12.320	0.001	3321.680	0.112
4	1.218	0.000	9998.782	0.337

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	46.708	319.858
02	47.906	321.056
03	46.194	319.344
04	44.002	317.152
05	41.869	315.019
06	40.091	313.241
07	38.764	311.914
08	37.732	310.882
09	36.313	309.463
10	32.091	305.241

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

etano(1) n-butano(2) n-pentano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Fase Vapor Ideal

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3167.468	0.212	165.532	0.004
2	1795.623	0.120	1537.377	0.034
3	10.908	0.001	3323.093	0.074
4	1.170	0.000	9998.830	0.222

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	46.573	319.723
02	47.849	320.999
03	46.089	319.239
04	43.850	317.000
05	41.711	314.861
06	39.960	313.110
07	38.665	311.815
08	37.635	310.785
09	36.213	309.363
10	32.383	305.533

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

propano(1) n-butano(2) n-pentano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Fase Vapor Ideal

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	2833.915	0.203	499.085	0.011
2	1808.869	0.129	1524.131	0.033
3	14.637	0.001	3319.363	0.072
4	1.378	0.000	9998.622	0.217

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	47.265	320.415
02	48.934	322.084
03	47.423	320.573
04	45.381	318.531
05	43.361	316.511
06	41.632	314.782
07	40.284	313.434
08	39.203	312.353
09	38.017	311.167
10	35.911	309.061

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3313.975	0.181	19.025	0.001
2	3144.045	0.172	188.955	0.009
3	2695.763	0.147	638.237	0.029
4	1.163	0.000	9998.837	0.461

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.637	295.787
02	23.028	296.178
03	23.084	296.234
04	23.092	296.242
05	23.093	296.243
06	23.093	296.243
07	23.092	296.242
08	23.088	296.238
09	23.057	296.207
10	22.804	295.954

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 2

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 2 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 2		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3313.862	0.121	19.138	0.001
2	3142.701	0.114	190.299	0.006
3	2703.853	0.098	630.148	0.019
4	1.158	0.000	9998.842	0.308

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.613	295.763
02	22.752	295.902

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 5

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 5 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 5		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3313.975	0.121	19.025	0.001
2	3144.041	0.114	188.959	0.006
3	2695.783	0.098	638.217	0.020
4	1.163	0.000	9998.837	0.307

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.637	295.787
02	23.027	296.177
03	23.079	296.229
04	23.056	296.206
05	22.804	295.954

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do sistema = 150 atm

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 15 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 15		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3313.975	0.121	19.025	0.001
2	3144.045	0.114	188.955	0.006
3	2695.763	0.098	638.237	0.020
4	1.163	0.000	9998.837	0.307

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.637	295.787
02	23.028	296.178
03	23.084	296.234
04	23.092	296.242
05	23.093	296.243
06	23.093	296.243
07	23.093	296.243
08	23.093	296.243
09	23.093	296.243
10	23.093	296.243
11	23.093	296.243
12	23.092	296.242
13	23.088	296.238

14	23.057	296.207
15	22.804	295.954

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1 atm

Número de estágios = 20

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 20 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 20		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3313.975	0.362	19.025	0.002
2	3144.045	0.343	188.955	0.017
3	2695.763	0.294	638.237	0.059
4	1.163	0.000	9998.837	0.922

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.637	295.787
02	23.028	296.178
03	23.084	296.234
04	23.092	296.242
05	23.093	296.243
06	23.093	296.243
07	23.093	296.243
08	23.093	296.243
09	23.093	296.243
10	23.093	296.243
11	23.093	296.243
12	23.093	296.243
13	23.093	296.243

14	23.093	296.243
15	23.093	296.243
16	23.093	296.243
17	23.092	296.242
18	23.088	296.238
19	23.057	296.207
20	22.804	295.954

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecâno(4)

Pressão do Sistema = 1 atm

Número de estágios = 25

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 25 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 25		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3313.975	0.362	19.025	0.002
2	3144.045	0.343	188.955	0.017
3	2695.763	0.294	638.237	0.059
4	1.163	0.000	9998.837	0.922

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.637	295.787
02	23.028	296.178
03	23.084	296.234
04	23.092	296.242
05	23.093	296.243
06	23.093	296.243
07	23.093	296.243
08	23.093	296.243
09	23.093	296.243
10	23.093	296.243
11	23.093	296.243
12	23.093	296.243
13	23.093	296.243

14	23.093	296.243
15	23.093	296.243
16	23.093	296.243
17	23.093	296.243
18	23.093	296.243
19	23.093	296.243
20	23.093	296.243
21	23.093	296.243
22	23.092	296.242
23	23.088	296.238
24	23.057	296.207
25	22.804	295.954

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 5.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3232.633	0.175	100.367	0.002
2	2427.972	0.131	905.028	0.022
3	500.239	0.027	2833.761	0.068
4	.206	0.000	9999.794	0.241

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	30.768	303.918
02	31.727	304.877
03	31.729	304.879
04	31.587	304.737
05	31.333	304.483
06	30.902	304.052
07	30.196	303.346
08	29.091	302.241
09	27.447	300.597
10	24.977	298.127

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 10.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3092.092	0.253	240.908	0.005
2	981.586	0.080	2351.414	0.049
3	.141	0.000	3333.859	0.070
4	.064	0.000	9999.937	0.209

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	31.943	305.093
02	29.489	302.639
03	26.965	300.115
04	25.575	298.725
05	24.925	298.075
06	24.613	297.763
07	24.393	297.543
08	24.080	297.230
09	23.445	296.595
10	22.198	295.348

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 20.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	2553.546	0.333	779.454	0.015
2	.058	0.000	3332.942	0.064
3	.000	0.000	3334.000	0.064
4	.022	0.000	9999.978	0.191

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	31.343	304.493
02	24.780	297.930
03	21.406	294.556
04	20.360	293.510
05	20.042	293.192
06	19.940	293.090
07	19.907	293.057
08	19.896	293.046
09	19.892	293.042
10	19.891	293.041

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 10.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3312.806	0.123	20.194	0.001
2	3111.794	0.116	221.206	0.007
3	2546.011	0.095	787.989	0.024
4	.484	0.000	9999.516	0.302

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	15.083	288.233
02	14.417	287.567
03	14.325	287.475
04	14.312	287.462
05	14.311	287.461
06	14.310	287.460
07	14.308	287.458
08	14.298	287.448
09	14.232	287.382
10	13.806	286.956

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 30.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3315.047	0.119	17.953	0.001
2	3170.724	0.114	162.276	0.005
3	2812.061	0.101	521.939	0.016
4	2.616	0.000	9997.384	0.311

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	30.382	303.532
02	31.862	305.012
03	32.067	305.217
04	32.094	305.244
05	32.098	305.248
06	32.099	305.249
07	32.098	305.248
08	32.097	305.247
09	32.083	305.233
10	31.941	305.091

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 40.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3316.022	0.117	16.978	0.001
2	3192.801	0.113	140.199	0.004
3	2903.241	0.103	430.759	0.014
4	5.623	0.000	9994.378	0.315

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	38.266	311.416
02	41.000	314.150
03	41.424	314.574
04	41.491	314.641
05	41.501	314.651
06	41.503	314.653
07	41.503	314.653
08	41.502	314.652
09	41.494	314.644
10	41.401	314.551

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	1000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3331.059	0.112	1.941	0.001
2	3313.046	0.111	19.954	0.006
3	3265.347	0.110	68.653	0.021
4	1.175	0.000	998.825	0.306

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	19.920	293.070
02	19.962	293.112
03	20.022	293.172
04	20.106	293.256
05	20.224	293.374
06	20.392	293.542
07	20.629	293.779
08	20.964	294.114
09	21.440	294.590
10	22.089	295.239

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	20000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3295.014	0.132	37.987	0.001
2	2956.796	0.118	376.204	0.006
3	2065.218	0.083	1268.782	0.020
4	1.028	0.000	19998.972	0.307

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.865	296.015
02	23.076	296.226
03	23.091	296.241
04	23.092	296.242
05	23.092	296.242
06	23.089	296.239
07	23.081	296.231
08	23.049	296.199
09	22.929	296.079
10	22.450	295.600

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) n-dodecano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	50000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3237.390	0.184	95.610	0.001
2	2382.110	0.136	950.891	0.006
3	237.492	0.014	3096.508	0.019
4	.635	0.000	49999.365	0.308

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.948	296.098
02	22.962	296.112
03	22.858	296.008
04	22.707	295.857
05	22.503	295.653
06	22.242	295.392
07	21.929	295.079
08	21.580	294.730
09	21.208	294.358
10	20.778	293.928

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) octano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	3319.297	0.117	13.703	0.000
2	3184.943	0.112	148.057	0.005
3	2811.319	0.099	522.681	0.017
4	155.161	0.005	9844.839	0.312

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	20.248	293.398
02	22.395	295.545
03	23.117	296.267
04	23.368	296.518
05	23.456	296.606
06	23.487	296.637
07	23.498	296.648
08	23.500	296.650
09	23.480	296.630
10	23.257	296.407

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) nonano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3317.931	0.119	15.069	0.000
2	3176.364	0.113	156.636	0.005
3	2791.296	0.100	542.704	0.017
4	45.749	0.002	9954.251	0.311

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	21.964	295.114
02	23.015	296.165
03	23.255	296.405
04	23.310	296.460
05	23.323	296.473
06	23.326	296.476
07	23.326	296.476
08	23.324	296.474
09	23.300	296.450
10	23.071	296.221

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

metano(1) etano(2) propano(3) decano(4)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	.0	0.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	10000.0	1.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 20.0°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	3333.0	0.333
2	3333.0	0.333
3	3334.0	0.333
4	.0	0.000

Modelo de Coeficiente de Atividade:

UNIQUAC C/ UNIFAC

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	3316.575	0.119	16.425	0.001
2	3165.330	0.114	167.670	0.005
3	2758.489	0.099	575.511	0.018
4	13.137	0.000	9986.863	0.310

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	22.258	295.408
02	22.778	295.928
03	22.862	296.012
04	22.876	296.026
05	22.878	296.028
06	22.878	296.028
07	22.878	296.028
08	22.875	296.025
09	22.851	296.001
10	22.636	295.786

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente Fluxo (Kmol/h) (fração molar)

1 10000.0 1.000

2 .0 0.000

3 .0 0.000

4 .0 0.000

5 .0 0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente Fluxo (kmol/h) (fração molar)

1 2234.5 0.517

2 123.6 0.029

3 1730.7 0.401

4 228.8 0.053

5 2.4 0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	1003.675	0.109	11230.825	0.333
2	123.366	0.013	.235	0.000
3	1724.762	0.187	5.938	0.000
4	228.043	0.025	.757	0.000
5	2.351	0.000	.049	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.303	355.453
05	82.302	355.452
06	82.300	355.450
07	82.279	355.429
08	82.113	355.263
09	80.814	353.964
10	71.146	344.296

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 2

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 2 - Temperatura = 20.0 °C

Componente Fluxo (Kmol/h) (fração molar)

1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente Fluxo (kmol/h) (fração molar)

1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 2		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	1032.358	0.332	11202.142	0.999
2	123.346	0.040	.254	0.000
3	1724.431	0.554	6.269	0.001
4	228.000	0.073	.800	0.000
5	2.347	0.001	.053	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	81.059	354.209
02	71.589	344.739

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

SPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 5

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 5 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 5		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	1003.737	0.163	11230.763	0.500
2	123.365	0.020	.235	0.000
3	1724.761	0.280	5.939	0.000
4	228.043	0.037	.757	0.000
5	2.351	0.000	.049	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.300	355.450
02	82.279	355.429
03	82.113	355.263
04	80.814	353.964
05	71.147	344.297

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 15

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 15 - Temperatura = 20.0 °C

Componente Fluxo (Kmol/h) (fração molar)

1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente Fluxo (kmol/h) (fração molar)

1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 15		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	1003.675	0.326	11230.825	0.999
2	123.366	0.040	.235	0.000
3	1724.762	0.560	5.938	0.001
4	228.043	0.074	.757	0.000
5	2.351	0.001	.049	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.303	355.453
05	82.303	355.453
06	82.303	355.453
07	82.303	355.453
08	82.303	355.453
09	82.303	355.453
10	82.302	355.452

11	82.300	355.450
12	82.279	355.429
13	82.113	355.263
14	80.814	353.964
15	71.146	344.296

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 20

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 20 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 20		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	1003.675	0.163	11230.825	0.500
2	123.366	0.020	.235	0.000
3	1724.762	0.280	5.938	0.000
4	228.043	0.037	.757	0.000
5	2.351	0.000	.049	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.303	355.453
05	82.303	355.453
06	82.303	355.453
07	82.303	355.453
08	82.303	355.453
09	82.303	355.453
10	82.303	355.453

11	82.303	355.453
12	82.303	355.453
13	82.303	355.453
14	82.303	355.453
15	82.302	355.452
16	82.300	355.450
17	82.279	355.429
18	82.113	355.263
19	80.814	353.964
20	71.146	344.296

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 5.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	9.697	0.002	12224.803	0.498
2	122.914	0.030	.686	0.000
3	1696.435	0.413	34.265	0.001
4	224.608	0.055	4.192	0.000
5	2.169	0.001	.231	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	119.881	393.031
02	91.561	364.711
03	41.761	314.911
04	22.031	295.181
05	20.307	293.457
06	20.209	293.359
07	20.202	293.352
08	20.200	293.350
09	20.195	293.345
10	20.179	293.329

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 10.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	4.853	0.001	12229.647	0.496
2	121.631	0.031	1.969	0.000
3	1638.992	0.413	91.708	0.004
4	217.495	0.055	11.305	0.000
5	.811	0.000	1.589	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	119.024	392.174
02	50.712	323.862
03	22.348	295.498
04	20.502	293.652
05	20.413	293.563
06	20.395	293.545
07	20.380	293.530
08	20.366	293.516
09	20.347	293.497
10	20.305	293.455

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 10.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	814.273	0.141	11420.227	0.500
2	123.362	0.021	.239	0.000
3	1724.662	0.298	6.038	0.000
4	228.030	0.039	.770	0.000
5	2.350	0.000	.050	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.302	355.452
05	82.302	355.452
06	82.298	355.448
07	82.269	355.419
08	82.042	355.192
09	80.298	353.448
10	67.799	340.949

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 20.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	2.470	0.001	12232.030	0.490
2	118.030	0.032	5.570	0.000
3	1525.226	0.413	205.475	0.008
4	202.819	0.055	25.981	0.001
5	.004	0.000	2.396	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	117.064	390.214
02	34.986	308.136
03	21.246	294.396
04	20.735	293.885
05	20.710	293.860
06	20.704	293.854
07	20.696	293.846
08	20.681	293.831
09	20.639	293.789
10	20.524	293.674

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 30.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	1195.150	0.183	11039.350	0.500
2	123.370	0.019	.231	0.000
3	1724.863	0.263	5.837	0.000
4	228.056	0.035	.744	0.000
5	2.352	0.000	.048	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.303	355.453
05	82.302	355.452
06	82.300	355.450
07	82.285	355.435
08	82.165	355.315
09	81.206	354.356
10	73.825	346.975

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 40.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	10000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	1388.802	0.200	10845.699	0.500
2	123.374	0.018	.227	0.000
3	1724.966	0.249	5.735	0.000
4	228.069	0.033	.731	0.000
5	2.353	0.000	.047	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.303	355.453
05	82.302	355.452
06	82.301	355.451
07	82.291	355.441
08	82.206	355.356
09	81.515	354.665
10	76.033	349.183

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	20000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	48.706	0.012	22185.794	0.500
2	122.934	0.029	.666	0.000
3	1715.804	0.405	14.896	0.000
4	226.887	0.054	1.913	0.000
5	2.262	0.001	.138	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	76.267	349.417
02	57.156	330.306
03	31.353	304.503
04	21.582	294.732
05	20.216	293.366
06	20.075	293.225
07	20.061	293.211
08	20.060	293.210
09	20.059	293.209
10	20.058	293.208

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	1000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5°C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap. kmol/h	fração molar	Fluxo Liq. kmol/h	fração molar
1	2111.900	0.252	1122.600	0.500
2	123.577	0.015	.023	0.000
3	1730.106	0.206	.594	0.000
4	228.724	0.027	.076	0.000
5	2.395	0.000	.005	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	82.303	355.453
02	82.303	355.453
03	82.303	355.453
04	82.303	355.453
05	82.303	355.453
06	82.303	355.453
07	82.303	355.453
08	82.302	355.452
09	82.294	355.444
10	81.615	354.765

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	50000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	47.254	0.012	52187.246	0.499
2	117.513	0.029	6.088	0.000
3	1667.278	0.406	63.422	0.001
4	220.280	0.054	8.520	0.000
5	1.384	0.000	1.016	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	44.418	317.568
02	22.017	295.167
03	20.142	293.292
04	20.064	293.214
05	20.061	293.211
06	20.060	293.210
07	20.060	293.210
08	20.060	293.210
09	20.059	293.209
10	20.056	293.206

SIMULAÇÃO DE COLUNAS DE ABSORÇÃO DE PRATOS MULTICOMPONENTES

ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA:

Componentes:

agua(1) dióxido de carbono(2) nitrogênio(3) oxigênio(4) ácido clorídrico(5)

Pressão do Sistema = 1.0 atm

Número de estágios = 10

ALIMENTAÇÃO LÍQUIDA: Estágio 10 - Temperatura = 20.0 °C

Componente	Fluxo (Kmol/h)	(fração molar)
1	100000.0	1.000
2	.0	0.000
3	.0	0.000
4	.0	0.000
5	.0	0.000

ALIMENTAÇÃO VAPOR: Estágio 1 - Temperatura = 82.5 °C

Componente	Fluxo (kmol/h)	(fração molar)
1	2234.5	0.517
2	123.6	0.029
3	1730.7	0.401
4	228.8	0.053
5	2.4	0.001

Modelo de Coeficiente de Atividade:

Scatchard & Hildebrand

Modelo de Coeficiente de Fugacidade:

Equação Virial

RESULTADOS DOS CÁLCULOS:

Componente	Estágio 10		Estágio 1	
	Fluxo Vap.	fração molar	Fluxo Liq.	fração molar
1	44.860	0.023	102189.640	0.998
2	104.987	0.054	18.613	0.000
3	1590.555	0.816	140.145	0.001
4	209.613	0.107	19.187	0.000
5	.149	0.000	2.252	0.000

Perfil da Temperatura na Coluna

Estágio	°C	K
01	32.572	305.722
02	20.411	293.561
03	20.066	293.216
04	20.059	293.209
05	20.058	293.208
06	20.058	293.208
07	20.057	293.207
08	20.057	293.207
09	20.056	293.206
10	20.052	293.202

ABSTRACT

The objectives of this work are the modeling and the simulation of a plate, multicomponent absorption column, considering the main phenomena taking place in the process and the rigorous thermodynamic of phase equilibria.

The problem is considered in the steady-state and adiabatically. A method initially developed for distillation columns is now applied for absorption columns. The solution of the non linear system of equations is carried out by the Newton-Raphson Method.

A software made by four programs is developed in such way to allow an interactive simulation, where the necessary parameter alteration for the calculations is made simultaneously and immediately. The interactive procedure allows suitable choice of the operating conditions and, therefore, allows for optimized solutions.

The results of the simulations were near to the ones obtained by the commercial simulator ASPEN, what was important for the model validation. Operation under high pressure has larger efficiency, the same with low temperature for solvent feed and solvent with higher molecular weight.

Finally, in this work, it was carried out a simulation of an absorption process using water as the solvent from a gaseous stream of an incinerator of hazardous waste. This is very important for waste minimization considerations, in particular, in this case, related to the HCl emission.