

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO :
SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

ESTUDO DAS CARACTERÍSTICAS DAS DISPERSÕES FORMADAS SOBRE
PRATOS PERFURADOS SEM VERTEDOR NA DESTILAÇÃO DE SISTEMAS
BINÁRIOS HOMOGÊNEO E HETEROGÊNEO

Autora : Carla Saori Nakamura

Orientadora : Prof^ª Dr^ª Teresa M. K. Ravagnani

Dissertação submetida à Comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) como parte dos requisitos necessários para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - SP

Agosto - 1995

UNIDADE	3C
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	N145e
V.	F.
T. (C) L.	25.874
PROC.	43.3195
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	72.11,00
DATA	02/10/95
N.º CPD	

CM-00077409-8

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

N145e Nakamura, Carla Saori
Estudo das características das dispersões formadas sobre pratos perfurados sem vertedor na destilação de sistemas binários homogêneo e heterogêneo. / Carla Saori Nakamura.--Campinas, SP: [s.n.], 1995.

Orientadora: Teresa M. K. Ravagnani.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. Álcool. 3. Azeótropo. 4. Hidrodinâmica. I.Ravagnani, Teresa M. K.. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Esta versão corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida por Carla Saori Nakamura e aprovada pela banca examinadora em 30 de agosto de 1995.

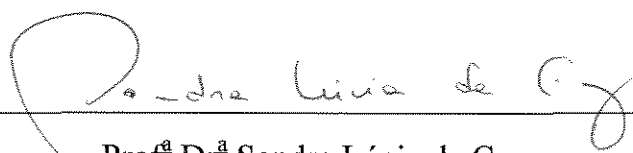
Teresa M. K. Ravagnani

Prof^a Dr^a Teresa Massako Kakuta Ravagnani

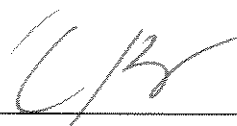
Dissertação de mestrado defendida e aprovada em 30 de agosto de 1995
pela Banca Examinadora constituída pelos Professores:



Prof^a Dr^a Teresa Massako Kakuta Ravagnani



Prof^a Dr^a Sandra Lúcia da Cruz



Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

Aos meus pais

AGRADECIMENTOS

À Prof^a Dr^a Teresa M. K. Ravagnani pela orientação prestada.

Ao Prof. Dr. João Alexandre F. R. Pereira.

À Área de Concentração : Sistemas de Processos Químicos e Informática da
FEQ/UNICAMP.

Ao CNPq, pelo auxílio financeiro.

Aos amigos.

RESUMO

Na separação de sistemas líquido-líquido miscíveis, o processo mais utilizado é a destilação e, sendo assim, seu estudo se torna bastante necessário. O projeto de uma coluna de destilação requer o conhecimento do comportamento hidrodinâmico do sistema destilante. Um dos parâmetros hidrodinâmicos mais importantes é o “hold-up” (do gás ou do líquido), que é diretamente relacionado com a área interfacial e tempo de contato entre as duas fases da dispersão. O “hold-up” de gás ou de líquido é facilmente determinado pela medida da altura de líquido retido. No presente trabalho, a altura de líquido retido foi medida em pratos perfurados sem vertedor em uma coluna de 5,5cm de diâmetro interno. Foram utilizados dois sistemas submetidos a destilação e em refluxo total, o sistema homogêneo etanol-butanol e o heterogêneo água-butanol, que são classificados segundo Zuiderweg e Harmens (1958) como sistemas neutro e negativo respectivamente.

Vários experimentos foram realizados variando-se a área livre de escoamento do prato (10 a 21%), as vazões e as composições das fases vapor e líquida. Os efeitos dessas variáveis sobre os regimes de escoamento, a altura de líquido retido, a altura da dispersão, o “hold-up” líquido e a faixa de operação da coluna foram estudados.

Foram observados três tipos de regimes de escoamento sobre o prato : “Froth”, “Spray” e transição entre estes dois tipos de regimes. Observou-se que os regimes do tipo “Spray” e transição foram favorecidos por altos valores de área livre e baixos valores de velocidade de vapor.

Verificou-se que a altura de líquido retido, para ambos os sistemas estudados, era fortemente influenciada pela velocidade de vapor e área livre de escoamento do prato, mas não sofreu influência significativa da composição. Verificou-se que a altura da dispersão apresentou um comportamento semelhante ao da altura de líquido retido. Verificou-se também, que o “hold-up” líquido, para o sistema etanol-butanol, sofreu influência do tipo de dispersão sobre o prato, mas para o água-butanol, pouca influência deste parâmetro foi observada.

São propostas equações empíricas para a altura de líquido retido baseadas em dados experimentais dos sistemas etanol-butanol e água-butanol em função das vazões e propriedades físicas (viscosidade, massa específica e tensão superficial) das fases vapor e líquida e parâmetros geométricos dos pratos (diâmetro dos orifícios e área livre de escoamento). As correlações representam bem os resultados experimentais.

SUMÁRIO

	Página
Resumo.....	i
Nomenclatura.....	vi
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - REVISÃO DA LITERATURA.....	4
2.1 - Introdução	5
2.2 - Regimes de Escoamento	5
2.2.1 - Borbulhamento.....	9
2.2.2 - Espuma Celular.....	10
2.2.3 - “Froth”.....	11
2.2.4 - “Spray”.....	12
2.3 - Altura de Líquido Retido sobre o Prato.....	13
2.3.1 - Métodos de medição.....	13
2.3.2 - Correlações.....	16
2.4 - Altura da Dispersão.....	20
2.5 - “Hold-up” do Líquido.....	22
2.6 - Principais Variáveis que Influenciam o Comportamento	
Hidrodinâmico de Pratos sem Vertedor.....	23
2.6.1 - Parâmetros Geométricos.....	23
2.6.2 - Velocidade das Fases Líquida e Gasosa.....	25
2.6.3 - Propriedades Físicas da Fase Líquida.....	26
2.5 - Destilação Trifásica.....	30
CAPÍTULO 3 - EQUIPAMENTO E PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL.....	32
3.1 - Introdução.....	33
3.2 - Equipamento.....	33
3.2.1 - Refervedor.....	33

3.2.2 - Coluna.....	34
3.2.3 - Condensador.....	36
3.2.4 - Sistemas Destilantes.....	36
3.3 - Procedimento Experimental.....	38
3.3.1 - Medida da Composição da Fase Líquida.....	40
2.3.1.1 - Sistema Etanol-Butanol.....	40
2.3.1.2 - Sistema Água-Butanol.....	41
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E ANÁLISE.....	44
4.1 - Introdução.....	45
4.2 - Regimes de Escoamento.....	45
4.3 - Altura de Líquido Retido sobre o Prato.....	49
4.3.1 - Influência da Velocidade de Vapor.....	49
4.3.2 - Influência da Área Livre de Escoamento.....	53
4.3.3 - Influência da Composição de Líquido da Dispersão.....	55
4.4 - Altura da Dispersão.....	57
4.5 - “Hold-up” de Líquido.....	59
4.6 - Faixa de Operação.....	63
CAPÍTULO 5 - ANÁLISE NUMÉRICA DOS DADOS.....	65
5.1 - Introdução.....	66
5.2 - Altura de Líquido Retido.....	66
5.2.1 - Sistema Etanol-Butanol.....	70
5.2.2 - Sistema Água-Butanol.....	71
5.2.3 - Sistema Etanol-Butanol e Água-Butanol.....	73
5.3 - Altura da Dispersão.....	74
5.4 - Velocidades Limites do Vapor.....	77
CAPÍTULO 6 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	78
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	81
APÊNDICE A - Dados Experimentais.....	86

APÊNDICE B - Cálculo da Fração Molar do Vapor.....	93
APÊNDICE C - Cálculo da Temperatura de Equilíbrio.....	97
APÊNDICE D - Cálculo das Propriedades Físicas.....	101
APÊNDICE E - Cálculo das Velocidades Superficiais do Líquido e do Vapor.....	119
APÊNDICE F - Determinação dos Coeficientes de Correlação.....	122

NOMENCLATURA

a^* = parâmetro da equação D.38 [μp]

a, b = coeficientes de mistura da equação D.28

Área = área da seção transversal da coluna [cm^2]

B = segundo coeficiente virial [cm^3/gmol]

B_0 = constante da equação D.19

c_i = constante do componente da equação D.39

D = diâmetro da coluna [cm]

d = diâmetro dos orifícios do prato [cm]

d_{mi} = diâmetro da molécula i [Å]

F_{at} = força de atrito devido às paredes da coluna

Fr = número adimensional de Froude

g = aceleração da gravidade [cm/s^2]

H = altura da dispersão [cm]

h = altura de líquido retido [cm]

h_m = variação do fluido manométrico no interior do tubo

IR = índice de refração de mistura

k = constante de Boltzmann

L = vazão molar de líquido [mol/s]

L^* = vazão de líquido por unidade de área [$\text{kg}/\text{m}^2\text{h}$]

L_0 = vazão mássica de líquido [kg/h]

M = espaço livre entre o topo da dispersão de um prato e o prato imediatamente superior
[cm]

n = constante da equação D.3

n_i = número de grupos atômicos para o componente i

$[P]_i$ = parachor do componente i

P = pressão [atm]

P_1, P_2 = pressão no ponto 1 sobre o prato e no ponto 2 sobre a dispersão

P_c = pressão crítica da mistura gasosa [atm]

PM_G, PM_L = peso molecular da mistura gasosa e líquida [g/mol]

PM_i, PM_1, PM_2 = peso molecular do componente $i, 1$ e 2 [g/mol]

q = constante da equação D.12 que depende do tipo e tamanho do componente orgânico

Q_L, Q_v = vazão volumétrica do líquido [ml/s] e do vapor [cm³/s]

R = constante geral dos gases [82,057 atm cm³/mol K]

Re_G, Re_L = número de Reynolds do gás e do líquido

r_m = raio do tubo manométrico

R_p = espaçamento entre os pratos [cm]

S = índice de estabilização

t = espessura do prato [cm]

T, T°_C = temperatura de equilíbrio em [K] e [°C]

T_b = temperatura normal de ebulição [K]

T_c = temperatura crítica da mistura gasosa [K]

T_{pi} = temperatura no ponto de ebulição do componente i [K]

T_r, T_{ri} = temperatura reduzida da mistura gasosa e do componente i

T_o = constantes da equação D.19

$T^* = k T/E$

V = vazão molar do vapor [mol/s]

V_a, V_o = volumes molares da água e do componente orgânico puros [cm^3/gmol]

V_c = volume molar crítico da mistura gasosa [cm^3/gmol]

V_G = volume molar da mistura gasosa [cm^3/gmol]

V_L, V_{L1}, V_{L2} = volumes molares da mistura, do componente 1 e do componente 2 no estado líquido [cm^3/gmol]

V_l, V_p, V_T = volume da fase leve, da fase pesada e total respectivamente [ml]

V_{pi} = volume molar no ponto de ebulição do componente i [cm^3/gmol]

v_G = velocidade superficial do vapor [cm/s]

v_{Go} = velocidade do vapor através dos orifícios [cm/s]

$v_{G,max}, v_{G,min}$ = velocidades máxima e mínima do vapor [cm/s]

v_L = velocidade superficial do líquido [cm/s]

w = fator acêntrico de Pitzer da mistura gasosa

w_i = coeficiente de correlação i

x, x_1, x_a, x_b, x_e = fração molar do componente mais volátil, do componente 1, da água, do butanol e do etanol na fase líquida

x_{al}, x_{ap} = fração molar da água na fase leve, na fase pesada

x_p, x_r, x_{ref} = fração molar do componente mais volátil da mistura líquida sobre o prato, do refluxo, e do refeedor

x_o = fração molar do componente orgânico puro no seio da mistura líquida

y, y_1 = fração molar do componente mais volátil e do componente 1 na fase vapor

y^* = fração molar do componente mais volátil na fase vapor em equilíbrio com o líquido

Z = fator de compressibilidade

Z_c = compressibilidade crítica da mistura gasosa

Letras gregas

α = “hold-up” de líquido

β = fator de aeração

ε = “hold-up” do gás

E = energia característica [$k T/T^*$]

ϕ = área livre de escoamento do prato

Φ = parâmetro de viscosidade de mistura da equação D.40

δ = parâmetro polar da equação D.36 dispersão

μ_L, μ_G = viscosidade da mistura líquida [cp] e gasosa [μp]

$\mu_{L1}, \mu_{L2}, \mu_{Li}$ = viscosidade do componente 1, 2 e componente i no estado líquido [cp]

π_i = grupo adimensional i

ρ_{ar} = massa específica do ar (20°C) [kg/m^3]

ρ_G, ρ_L = massa específica da mistura gasosa e líquida [g/cm^3]

$\rho_{L1}, \rho_{L2}, \rho_{Li}, \rho_{Lb}, \rho_{Le}$ = massa específica do componente 1, 2, componente i, butanol e etanol no estado líquido [g/cm^3]

$\rho_{Lpi} = 1/v_p$, massa específica do componente i no ponto de ebulição [$gmol/cm^3$]

ρ_l, ρ_p, ρ_T = massa específica molar da mistura da fase leve, da fase pesada e das duas misturas líquidas respectivamente [mol/cm^3]

$\sigma, \sigma_a, \sigma_b, \sigma_e, \sigma_i, \sigma_o$ = tensão superficial da mistura líquida, da água, do butanol, do etanol, do componente i e do componente orgânico [dina/cm]

τ = razão entre a área dos furos ocupada pela drenagem do líquido e a área total dos furos do prato

$\zeta_d, \zeta_l, \zeta_{sh}, \zeta_b, \zeta_\sigma$ = coeficientes de resistência, respectivamente, do gás, do líquido, da camada líquida sobre o prato, devido a camada de dispersão sobre o prato e da tensão superficial do líquido

Ω_v = integral de colisão para a viscosidade

$\psi_a^\sigma, \psi_o^\sigma$ = fração volumétrica da água e do componente orgânico na camada superficial da mistura líquida

ψ_a, ψ_o = frações volumétricas respectivamente da água e do componente orgânico no seio do líquido

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1 - INTRODUÇÃO

A coluna de destilação de pratos é um dos equipamentos mais utilizados nas indústrias para a separação de misturas líquidas. A grande maioria das colunas utiliza pratos com vertedor, pois foram eles os mais estudados. Porém, pratos sem vertedor apresentam muitos aspectos desejáveis; possuem maior produção com menor queda de pressão quando comparados com pratos com vertedores, são de fácil construção e são mais apropriados na operação com deposições devido a propriedade autolimpante e pela maior facilidade de limpeza dos orifícios. Assim sendo, o conhecimento do seu desempenho é de fundamental importância.

A pesquisa sobre colunas de pratos é geralmente dividida em dois enfoques devido a sua complexidade, o estudo do comportamento hidrodinâmico da dispersão sobre o prato e o estudo das transferências de massa e calor.

No que diz respeito à pesquisa da hidrodinâmica, a sua importância se deve ao fato de que esta afeta o mecanismo de transferência de massa e portanto, a eficiência do prato, além de fornecer dados fundamentais para o projeto da coluna como por exemplo, queda de pressão, espaçamento entre os pratos e quantidade de líquido retido sobre o prato, para o estudo da dinâmica da coluna. No entanto, estas pesquisas são geralmente conduzidas em protótipos experimentais onde se opera com gases e líquidos inertes, sem a ocorrência de transferência de massa e/ou calor. Porém, sabe-se também que a presença destes fenômenos influenciam fortemente a hidrodinâmica do prato e, considerando-se estas condições de operação, são poucas as informações disponíveis na literatura.

Além de poucas, também são contraditórias as informações existentes, tanto no que diz respeito ao comportamento hidrodinâmico como o de transferência de massa, quando se tratam de operações em condições de destilação trifásica, isto é, em operações com formação de uma segunda fase líquida resultando em equilíbrio líquido-líquido-vapor (ELLV).

Na última década, a literatura tem apresentado diversos estudos, na sua maioria de âmbito teórico, sobre a destilação trifásica, quer sobre a determinação e desenvolvimento de

métodos de predição de dados termodinâmicos de ELLV, bem como métodos matemáticos para a simulação de colunas operando com sistemas heterogêneos, uma vez que a aplicação de métodos de cálculo para ELV nem sempre consegue representar o seu comportamento. Porém, estes estudos necessitam serem complementados com trabalhos de âmbito experimental para o total conhecimento do projeto de colunas com destilação trifásica.

Desta forma, o presente trabalho tem como objetivo estudar o comportamento hidrodinâmico de uma coluna utilizando pratos perfurados sem vertedor, operando com dois sistemas destilantes : o etanol-butanol e o água-butanol. O primeiro é um sistema homogêneo e classificado por Zuiderweg e Harmens (1958) como sistema neutro, enquanto que o segundo, um sistema heterogêneo e negativo.

Neste trabalho, os seguintes aspectos serão abordados para ambos os sistemas :

- (a) estudar os tipos de dispersões que se formam sobre o prato perfurado sem vertedor;
- (b) determinar os principais parâmetros operacionais da coluna, tais como, altura da dispersão, altura de líquido retido, “hold-up” do líquido e limites de operação;
- (c) analisar a influência das condições operacionais sobre estes parâmetros;
- (d) propor correlações que permitem predizer a altura de líquido retido e a altura da dispersão sobre o prato.

Desta forma, apresentaremos a seguir, uma revisão dos principais trabalhos existentes na literatura.

CAPÍTULO 2

REVISÃO DA LITERATURA

2.1 - INTRODUÇÃO

Lockett (1986) cita três razões para o estudo dos regimes de escoamento :

- o comportamento hidrodinâmico do prato depende do regime;
- alguns regimes devem ser evitados, principalmente devido a baixas taxas de transferência de massa e calor;
- existem algumas evidências que a eficiência do prato pode ser otimizada projetando o prato para operar em um regime apropriado.

Assim sendo, a seguir será feita uma descrição das condições operacionais que provocam a ocorrência destes regimes, bem como as suas características.

2.2 - REGIMES DE ESCOAMENTO

A figura 2.1 apresenta as curvas de queda de pressão em pratos sem vertedor em função da velocidade de gás, a várias vazões de líquido, obtida por Zelinski e Kafarov (1961) com base em dados experimentais realizados com o sistema água-ar.

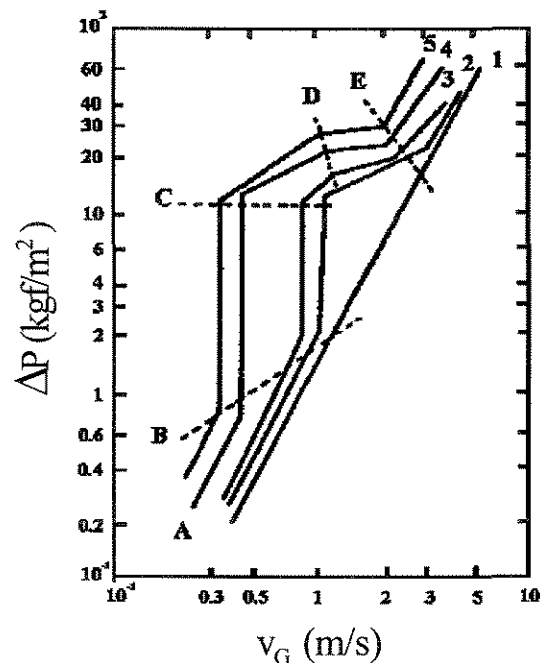


Figura 2.1 : Regimes de escoamento Representação utilizando v_G vs ΔP : v_L ($\text{kg}/\text{m}^2\text{h}$)
 (1) 0,0; (2) 1650; (3) 3580; (4) 11200; (5) 21100 [Zelinski e Kafarov(1961)].

Rylek e Standart (1964), através da análise desta figura 2.1, definiram diferentes tipos de dispersões. A região AB representa a não existência de líquido retido sobre o prato. Este regime ocorre a baixas velocidades de gás, em que este passa livremente através de alguns orifícios do prato, enquanto que o líquido escoava através de outros orifícios sem a ocorrência de sua retenção. Os escoamentos das fases líquida e gasosa podem ocorrer nos mesmos orifícios, se estes forem suficientemente grandes. O líquido entra em contato com o gás somente na sua superfície. Este regime tem pouca importância para a destilação devido aos reduzidos valores de área interfacial e de tempo de contato entre as duas fases da dispersão, provocando uma baixa taxa de transferência de massa e calor.

A uma certa velocidade de gás, a força de atrito do gás, que é contrária à drenagem de líquido, cresce a um valor tal, provocando o início de retenção de líquido sobre o prato. Esta retenção é acompanhada por um repentino aumento da queda de pressão sobre o prato, região BC da figura 2.1, e a partir disto ocorre a formação de uma dispersão denominada por vários autores por Borbulhamento, região CD, caracterizada pela livre ascensão das bolhas através da fase líquida. O ponto D significa o fim deste regime, chamado de Ponto de Aeração, que possui uma estrutura celular. A região DE representa o regime de Espuma Móvel, muitos autores denominam por “Froth”, caracterizado por uma intensa turbulência da dispersão gás-líquido. A região EF representa uma dispersão com ocorrência de oscilações. O ponto E é chamado de Ponto de Formação de Onda. Este regime é acompanhado pelo aumento da queda de pressão total do prato. As oscilações da dispersão gás-líquido sobre o prato podem ser melhor observadas a uma baixa vazão de líquido, quando ocorre pouca retenção de líquido, e a força de atrito do gás se torna suficiente em superar a inércia do líquido sobre o prato. Em velocidades mais altas de gás pode ocorrer uma intensa projeção do líquido presente sobre o prato na forma de gotículas.

Müller e Prince (1969), com base em estudos experimentais realizados em pratos perfurados com vertedor, construíram um gráfico de velocidade superficial do gás (v_G) versus “hold-up” do gás (ϵ), figura 2.2, para identificar os regimes de escoamento. Quatro regimes são identificados e comumente chamados por Borbulhamento, Espuma Celular, “Froth” e “Spray”, respectivamente regiões 1,2,3 e 4 da figura 2.2.

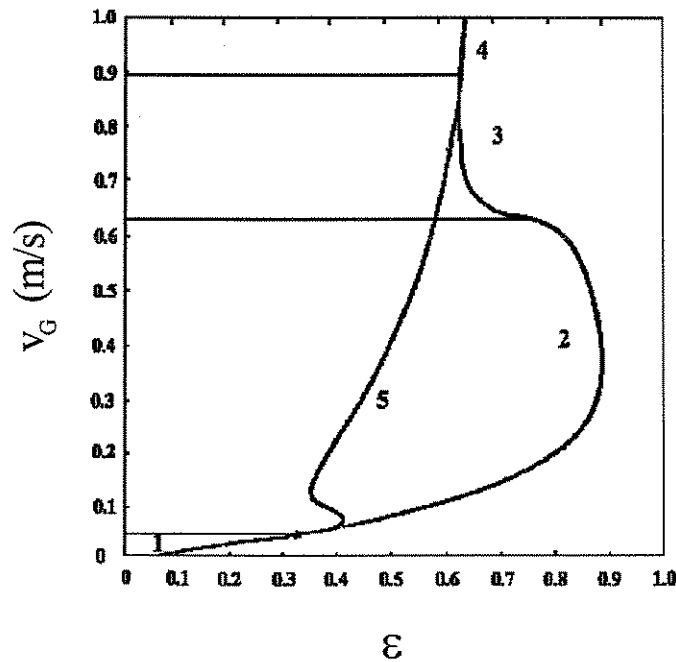


Figura 2.2 : Regimes de escoamento. Representação utilizando ϵ vs v_G [Müller e Prince (1969)].

Cervenka e Kolar (1972), em pratos perfurados sem vertedor com o sistema água-ar, também verificaram diferentes regimes de escoamento observados pela variação da altura de líquido (N/m^2) em função da velocidade do gás, figura 2.3.

Estes autores identificaram sete tipos de regimes. (I) Escoamentos separados de líquido e gás através dos pratos. (II) Regime de Pulsação Uniforme onde ocorria um revezamento de escoamento do gás e do líquido através dos orifícios. Neste regime, o líquido retido era relativamente pequeno e praticamente não se alterava com o aumento da velocidade do gás. O regime de Borbulhamento (III) apresentava uma razoável quantidade de líquido retido. O gás atravessava a quantidade de líquido na forma de bolhas individuais. (IV) Regime chamado de Espuma Homogênea por estes autores mas comumente chamado de Espuma Celular, por apresentar uma estrutura celular. (V) Regime de Circulação, denominado por Rylek e Standart (1964) por Espuma Móvel. Em seguida, (VI) regime caracterizado pela formação de ondas e finalmente, (VII) Regime de Fluidização da fase

líquida pela ação do gás. A quantidade de líquido presente sobre o prato era projetado na forma de gotas de vários tamanhos.

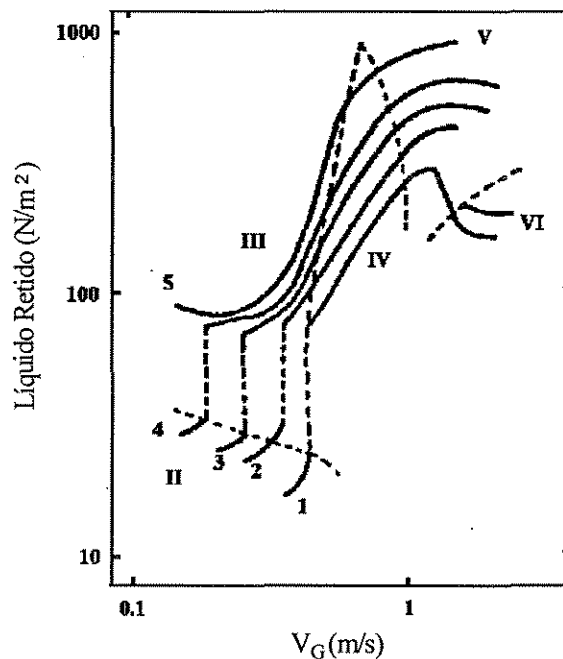


Figura 2.3 : Regimes de escoamento. Representação utilizando v_G vs Altura de líquido : v_L (kg/m² s) : (1) 0,4; (2) 0,7; (3) 1,2; (4) 2,0; (5) 4,0 [Cervenka e Kolar (1973)].

Gimenes (1986) e Reinehr (1987) em seus estudos com pratos perfurados sem vertedor, operando em condições destilantes, isto é, com a ocorrência de transferência de massa e calor entre as fases líquida e vapor, observaram a ocorrência dos seguintes regimes de escoamento: (I) retenção mínima, em que o líquido começava a ficar retido sobre o prato, (II) “Spray”, era observado uma grande quantidade de gotas, sem a formação de espuma, (III) dispersões do tipo Espuma Celular, (IV) dispersões do tipo “Froth”, apresentavam bolhas menores de vapor separadas por uma quantidade maior de líquido e não por um fino filme como era o caso da Espuma Celular. (V) dispersões mistas entre as descritas em (II) e (IV), caracterizadas por uma intensa agitação, onde a massa da dispersão era arremessada como jatos, porém sem ser enquadrada como tipicamente “Spray” ou “Froth”, (VI) dispersões mistas entre as descritas em (III) e (IV), onde a região inferior da dispersão era do tipo “Froth” e a superior do tipo Espuma Celular e (VII) dispersões do tipo “Froth” que apresentavam gotículas na parte superior assemelhando-se ao “Spray”.

Através da análise dos trabalhos citados anteriormente, encontramos quatro principais regimes de escoamento sobre o prato : Borbulhamento, Espuma Celular, “Froth” e “Spray”. A figura 2.4 mostra modelos de escoamento para cada tipo de regime, que serão descritos com detalhes a seguir.

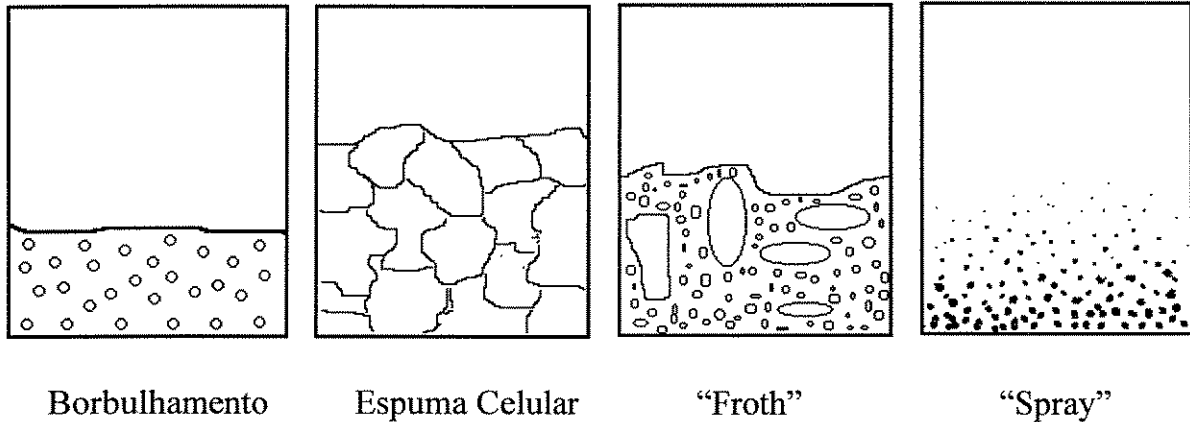


Figura 2.4 : Regimes de Escoamento.

2.2.1 - Borbulhamento

Através da figura 2.1, região BC, observa-se um repentino aumento da queda de pressão total sobre o prato, causado pelo início da retenção de líquido sobre o prato. O regime de Borbulhamento inicia-se em velocidades de gás próximas ao ponto de retenção de líquido sobre o prato. Neste regime existe uma razoável quantidade de líquido sobre o prato. Pozin, Mukhlenov e Tarat (1957) afirmam que em baixas velocidades de gás, que não excedam a velocidade na qual o gás forma bolhas de livre flutuação na camada líquida, obtém-se uma típica dispersão de borbulhamento, caracterizada por bolhas que sofrem a influência da força de empuxo devido a diferença de densidade entre as fases líquida e gasosa. Um regime de Borbulhamento típico é caracterizado pelo fato de existir uma camada de espuma sobre a camada de líquido e acima desta, outra de gotículas : estas duas últimas contém apenas uma pequena fração do total de líquido retido.

Lockett (1986) comenta que o regime de Borbulhamento ocorre em baixas vazões de gás, em que o tamanho das bolhas em formação depende do diâmetro dos orifícios e da tensão superficial. A frequência de borbulhamento é proporcional à vazão de gás. Os efeitos da viscosidade do líquido e da vazão de gás no tamanho das bolhas neste regime são desprezáveis. Aumentando ainda mais a vazão de gás, um regime de transição pode ocorrer no qual a tensão superficial, inércia e viscosidade do líquido podem ser importantes. Deste modo, o tamanho das bolhas se torna uma delicada função da vazão de gás e do diâmetro dos orifícios.

A quantidade de líquido retido, figura 2.3, aumenta com o aumento da velocidade de gás, a uma alimentação constante de líquido. Com o aumento da vazão de alimentação de líquido, este valor também aumenta. Através da figura 2.2 observa-se que o “hold-up” de gás aumenta regularmente com o aumento da velocidade do gás, região 1. Müller e Prince (1969) comentam que o aumento da vazão de gás através da dispersão é acompanhado por um decréscimo da proporção de orifícios ocupados pela drenagem de líquido e um aumento da frequência de formação de bolhas de gás. A medida que aumenta a velocidade de gás, a camada de espuma aumenta e a de líquido diminui.

O regime de Borbulhamento tem fim quando a camada de líquido presente sobre o prato desaparece, cedendo lugar a uma espuma de estrutura celular.

2.2.2 - Espuma Celular

O limite do regime de Borbulhamento, segundo Müller e Prince (1969), é a velocidade em que o “hold-up” do gás alcança o valor aproximado de 0,4, em que as bolhas começam a possuir a forma de poliedros. Através da figura 2.2, região 2, observa-se que o regime de Espuma Celular apresenta os valores mais elevados de “hold-up” de gás, próximo de 0,9. Este regime marca a transição entre os regimes de Borbulhamento e o “Froth” e muitas vezes é denominado por Ponto de Aeração. A Espuma Celular ocasiona baixas taxas de transferência de massa e conseqüentemente, sua importância nos processos de separação é reduzida.

Segundo Rylek e Standart (1964), a partir do Ponto de Aeração, o aumento da vazão de gás provoca o rompimento das bolhas tornado-as menores e ocasionando sucessivas colisões das bolhas entre si. Surge um novo regime caracterizado por uma forte turbulência da dispersão denominado por Espuma Móvel ou por “Froth” .

2.2.3 - “Froth”

Este regime é limitado pelo regime de Borbulhamento a baixas velocidades de gás e pelo “Spray” a altas velocidades. Pela figura 2.1, este regime corresponde à região DE e observa-se um suave aumento da queda de pressão total sobre o prato com o aumento da vazão de gás, para uma alimentação constante de líquido. Cervenka e Kolar (1972), através da figura 2.3 observam que para o regime “Froth”, o líquido retido aumenta levemente com o aumento da velocidade de gás até um valor máximo e então decresce suavemente, e pela figura 2.2, região 3, em altas velocidades de gás, o “hold-up” do gás decresce causado pela quebra da estrutura celular.

Zelinskii e Kafarov (1961) citam que a porção da área dos orifícios ocupada pelo líquido mantém-se aproximadamente constante, e o aumento da velocidade de gás somente ocasiona um aumento da frequência de formação de bolhas, de suas velocidades ou em seus tamanhos.

Este regime difere do Espuma Celular na forma estrutural, devido a presença de correntes de pequenas bolhas, correntes de gás e membranas de líquido. Lockett (1986) comenta que a circulação do líquido neste regime é provocada pelas bolhas que se formam nos orifícios do prato e particularmente pelas bolhas de maior tamanho em ascensão através da enorme quantidade de pequenas bolhas. O regime “Froth” em baixas velocidades de gás é caracterizado por uma faixa de tamanhos das bolhas cujas características são difíceis de prever. Com o aumento da velocidade de gás ocorre a formação de jatos de gás. Em baixas alturas da dispersão, os jatos de gás podem penetrar o “Froth” e a frequência desta ocorrência aumenta até a transição para o regime “Spray”, em que todos os orifícios possuem jatos. Em qualquer momento, a proporção dos orifícios em que o borbulhamento é

presente e a proporção apresentando jatos de gás é incerto. Este regime possui altas taxas de transferência de calor e massa devido a presença da intensa turbulência da dispersão, provocando um melhor contato entre as fases líquida e gasosa. Aumentando a velocidade do gás, aumenta a turbulência da dispersão, causando a formação de correntes de gás que passam por várias seções sobre o prato, resultando no surgimento de movimentos oscilatórios desta dispersão.

Müller e Prince (1969) comentam que o regime “Froth” normalmente ocorre depois da quebra da estrutura celular da dispersão, localizada no ponto B da figura 2.2, mas é possível observar a transição diretamente do regime de Borbulhamento para o “Froth” sem a formação da Espuma Celular. Isto é normalmente associado com a quantidade de líquido presente sobre o prato, podendo ocorrer uma maior turbulência e inibindo a formação de espuma. O comportamento da dispersão segue então a curva 5 desta figura.

2.2.4 - “Spray”

Rylek e Standart (1964) declaram que a partir de determinada vazão de gás, mantendo a de líquido constante, a altura da dispersão aumenta rapidamente, começando a mudar sua estrutura para uma dispersão composta de gotas, membranas de líquido e jatos de gás, geralmente denominada por “Spray”. Cervenka e Kolar (1972) denominam este regime por Fluidizado e citam, baseados em dados experimentais, que este regime é favorecido por baixas vazões de líquido e altas de gás, e é acompanhado por um repentino decréscimo da queda de pressão total sobre o prato e, pela figura 2.2 na região 4, verifica-se um ligeiro aumento do “hold-up” do gás.

Ao contrário dos regimes anteriormente descritos, o regime “Spray” apresenta o gás como a fase contínua e o líquido a fase dispersa.

Gimenes (1986) e Reinehr (1987) comentam com base em resultados experimentais, que o regime “Spray” ocorre somente nas condições em que existe pouco líquido retido, próximo ao ponto de retenção de líquido sobre o prato e que, este regime é favorecido por pratos com maiores áreas livres de escoamento. O mesmo comportamento foi observado por

Ravagnani (1989), em experimentos realizados em uma coluna de pratos perfurados sem vertedor, com diversos sistemas submetidos à destilação.

2.3 - ALTURA DE LÍQUIDO RETIDO SOBRE O PRATO

O projeto de uma coluna de destilação requer o conhecimento dos parâmetros hidrodinâmicos e de transferência de massa. Um dos mais importantes parâmetros hidrodinâmicos é o “hold-up” de gás ou líquido que é diretamente relacionado aos parâmetros de transferência de massa, área interfacial e tempo de contato entre as duas fases na dispersão. O “hold-up” de gás ou líquido é facilmente determinado pela medida da altura de líquido retido sobre o prato. A grande maioria dos estudos sobre altura de líquido retido são realizados em simuladores água-ar em temperatura ambiente.

2.3.1 - Métodos de Medição

A altura de líquido retido pode ser obtida subtraindo-se a queda de pressão do prato seco da queda total. Segundo Lockett (1986), esta aproximação é normalmente usada em pratos industriais mas carece em precisão por não considerar a queda de pressão residual, isto é, a pressão necessária para superar a tensão superficial no momento em que as bolhas são formadas nos orifícios. Portanto, um método alternativo é a determinação da altura de líquido retido através de uma medida de queda de pressão no prato com o auxílio de um manômetro, como mostra a figura 2.5.

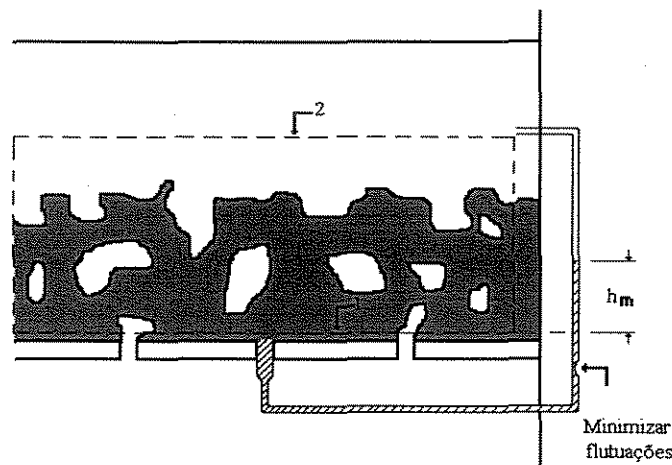


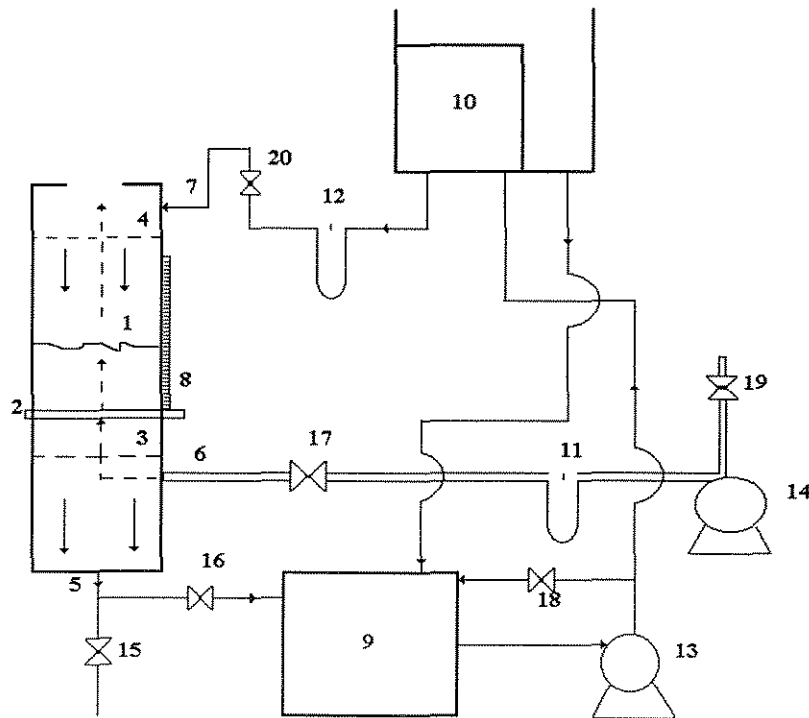
Figura 2.5 : Medida da altura de líquido retido através de manômetro [Lockett (1986)].

A altura de líquido retido (h) é relacionada a uma leitura de manômetro (h_m) através de um balanço de quantidade de momentum vertical entre o ponto (1), sobre o prato e o ponto (2), acima da dispersão, acrescida de uma correção da elevação da capilaridade, obtendo-se :

$$h = h_m + \frac{v_G \rho_G (v_{G0} - v_G)}{\rho_L g} - \frac{2\sigma}{\rho_L g r_m} \quad (2.1)$$

Takahashi e Tanaka (1971) estudando uma coluna de prato perfurado sem vertedor de um único estágio, com os sistemas água-ar, solução de glicerina-ar e solução de metanol-ar, operando a frio, utilizaram o seguinte método para medir a altura de líquido retido, esquematizado na figura 2.6 : o líquido proveniente do tanque (10) alimentava a coluna a uma vazão constante ajustada através da válvula (20). Esse líquido passava pelo distribuidor (4) e caía sobre a dispersão formada no prato e por fim, escoava através dos orifícios dos pratos, sendo drenado pelo fundo da coluna. Enquanto isso, o gás era injetado pelo fundo da coluna, passava pelo distribuidor (3), pelo prato perfurado, pela dispersão e saía pelo topo. Era interrompida a circulação de líquido fechando-se totalmente a válvula de saída (20) e simultaneamente, fechavam-se as saídas do estágio (16). A altura de líquido retido era então

medida através de uma escala milimétrica (18) na parte externa da coluna. Detalhes sobre o aprisionamento do líquido não são fornecidos pelos autores.



- | | |
|-----------------------------------|--|
| 1 - coluna; | 8 - escala milimétrica; |
| 2 - prato perfurado sem vertedor; | 9 - tanque contendo líquido; |
| 3 - distribuidor de gás; | 10 - tanque de alimentação do líquido; |
| 4 - distribuidor de líquido; | 11 e 12 - medidor de orifício; |
| 5 - saída de líquido; | 13 e 14 - bomba; |
| 6 - entrada de gás; | 15, 16, 17, 18, 19 e 20 - válvula. |
| 7 - entrada de líquido; | |

Figura 2.6 : Equipamento experimental [Takahashi e Tanaka (1971)].

Outros autores utilizaram métodos semelhantes, Standart e Rylek (1964), pesquisando os sistemas água-ar, querosene-ar e glicerina-ar em pratos “turbogrid” sem vertedor, mediram experimentalmente a altura de líquido retido através de uma repentina interrupção do fluxo de líquido na seção hidráulica e simultaneamente fechando-se o fluxo

de gás, então o líquido podia ser drenado diretamente para o recipiente sob o prato. A quantidade de líquido presente no recipiente era então pesada.

Cervenka e Kolar (1972) também utilizaram um método semelhante, destacando que esta quantidade de líquido coletada sempre incluía o líquido residual, isto é, o líquido presente na seção hidráulica mas que não pertencia à mistura gás-líquido sobre o prato e portanto, deveria ser subtraído. Estes autores assumiram que o líquido residual no espaço acima do prato era desprezável. No espaço abaixo do prato, o líquido residual era formado pelo líquido que gotejava dos orifícios caindo na forma de gotas ou escoando pelas paredes e pelo líquido presente no fundo da coluna e a sua quantidade era determinada experimentalmente. O prato era removido e em seu lugar, a alimentação de líquido era realizada. Parte da coluna abaixo da posição do prato era molhada pelo líquido e o gás era injetado. Esta quantidade de líquido era medida e considerada como o líquido residual.

Müller e Prince (1969) também estudando uma coluna de prato perfurado de um único estágio, operando com o sistema água-ar a 25°C, determinaram a altura de líquido retido através de duas maneiras. Despejava-se um volume conhecido de líquido na coluna e media-se a altura da dispersão formada. Tendo o volume de líquido despejado e a área da seção transversal da coluna era obtida a altura de líquido retido. Para a dispersão do tipo Espuma Celular, a altura de líquido retido era obtida através da queda de pressão sobre o prato com o auxílio de um manômetro.

2.3.2 - Correlações

Takahashi e Tanaka (1971) apresentam a seguinte equação teórica para o líquido retido sobre um prato perfurado sem vertedor.

$$h = \frac{1}{(\beta - \zeta_h) \rho_L} \left\{ \frac{\zeta_d}{2g} \left(\frac{v_{Go}}{1 - \tau} \right)^2 \rho_G + \zeta_\sigma \frac{4\sigma}{d} + (1 - \zeta_h - \tau) \left(\frac{\zeta_l}{2g} \right) \left(\frac{v_{Lo}}{\tau} \right)^2 \rho_L \right\} \quad (2.2)$$

Essa correlação leva em consideração as características geométricas do prato, razões de fluxo de gás e líquido, propriedades físicas de ambos os fluidos e queda de pressão do gás através da dispersão formada sobre o prato. Alguns coeficientes são determinados experimentalmente (fator de aeração: β , coeficientes de resistência: ζ_d , ζ_σ , ζ_l , ζ_h , ζ_b) para os sistemas água-ar, solução de glicerina-ar e solução de metanol-ar em uma coluna com diâmetro igual a 15cm. Vários pratos são utilizados variando em espessura de 0,080 a 0,620cm, diâmetro dos furos de 0,300 a 1,002cm e área livre de 0,0504 a 0,508.

Os coeficientes de resistência são expressos pelas seguintes equações para pratos perfurados sem vertedor:

Coeficiente de resistência do gás, ζ_d :

$$\zeta_d = 1,14 \left\{ \left[1 - \phi (1 - \tau) \right]^2 + 0,4 \left[1,25 - \phi (1 - \tau) \right] \right\} \quad (2.3)$$

Coeficiente de resistência do líquido, ζ_l :

$$\zeta_l = 2,2 + \frac{48,8 (d^{-3/4} - 0,87) (\sigma - 28,7) \mu_L^{1/4}}{\left(\frac{v_{Lo}}{\tau} \right)^2} \quad (2.4)$$

Coeficiente de resistência da camada líquida sobre o prato, ζ_h :

$$\zeta_h = 1,0 \quad (2.5)$$

Coeficiente de resistência devido a tensão superficial, ζ_σ :

$$\zeta_\sigma = 0,34 \quad (2.6)$$

Coefficiente de resistência devido a camada de dispersão sobre o prato, ζ_b :

$$\zeta_b = 1,11 \quad (2.7)$$

O fator de aeração, β , da equação 2.1 é uma medida que mostra a magnitude da energia que transfere do gás para a fase líquida. O fator de aeração é correlacionado pelas seguintes equações:

Para $0,05 \leq \phi \leq 0,20$:

$$\beta = 0,87 \left(\frac{t^2}{v_L} \right)^{1/25} \sigma^{1/20} \mu_L^{-1/25} + 2,3 \cdot 10^{-9} \left(\frac{v_G}{v_L^{1/2} \phi t^{1/4} \mu_L^{1/5}} \right)^2 \quad (2.8)$$

e para $0,20 < \phi \leq 0,50$

$$\beta = 3,17 \left(\frac{\phi^{1/5}}{v_L^{1/12} t^{1/15}} \right) \sigma^{-2/9} \mu_L^{-1/50} + 1,6 \cdot 10^{-6} \left(\frac{v_G}{v_L^{1/3} t^{1/5}} \right)^2 \quad (2.9)$$

A razão entre a área dos furos ocupada pela drenagem do líquido e a área total dos furos do prato, τ , é obtida pela seguinte equação :

$$\frac{\partial(h \rho_L)}{\partial \tau} = 0 \quad (2.10)$$

Mahendru e Hackl (1979) apresentam a seguinte equação para o cálculo da altura de líquido retido em pratos perfurados sem vertedor :

$$h = \frac{0,065(L^*)^n \left[v_G \sqrt{(\rho_G / \rho_{ar})} \right]^{0,75}}{\rho_L \phi^{0,5} (T/d)^{0,42}} \quad (2.11)$$

onde : $n = 0,3162 (\phi)^{-1/4}$

h [m]; L^* [$\text{kg}/\text{m}^2\text{h}$]; v_G [m/s]; ρ_G e ρ_L [kg/m^3];
 ρ_{ar} (20°C) [kg/m^3]; t e d [mm].

É uma equação empírica obtida a partir de análise dimensional de variáveis que influenciam a altura de líquido retido e a dispersão sobre o prato. Esta equação foi obtida através de dados experimentais de uma coluna de pratos perfurados sem vertedor de área livre de 19 a 33% e diâmetro da coluna de 31cm, utilizando o sistema água-ar. Os autores declaram que a aplicabilidade desta equação é limitada apenas para sistemas pouco ou não espumantes, característica do sistema água-ar.

Cruz (1983) com base em experimentos realizados utilizando pratos perfurados sem vertedor, propõe a seguinte equação para a altura de líquido retido:

$$h = 1,0 \cdot 10^{-2} \frac{(L_o)^{0,9} v_G^{4/3} \rho_G^{0,4} (\mu_L / \sigma)^{0,2}}{g \rho_L \phi^3 D^{1,8} (d/T)^{0,8}} \quad (2.12)$$

onde : h [m]; L_o [kg/h]; v_G [m/s]; ρ_G e ρ_L [kg/m^3];
 μ_l [$\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$]; σ [N/m]; D [m]; t e d [mm]; g [m/s^2].

Os dados experimentais foram obtidos em condições não destilantes para os sistemas água-ar e solução aquosa de etanol-ar. Foram utilizados pratos com área livre de 6,4 a 20% e diâmetro de coluna de 9,8 e 18cm.

Esta equação aplica-se a sistemas espumantes ou não, uma vez que a solução aquosa de etanol-ar é um sistema consideravelmente espumante enquanto que o água-ar apresenta um comportamento inverso, isto é, pouco espumante.

2.4 - ALTURA DA DISPERSÃO

A formação da dispersão sobre o prato ocorre devido a interação entre o gás ascendente e o líquido descendente. Segundo Rylek e Standart (1964), o comportamento da dispersão sofre influência das velocidades do gás e do líquido, das propriedades físico-químicas das fases e dos parâmetros geométricos do prato.

O conhecimento da altura da dispersão tem importância no cálculo do espaçamento entre os pratos que é determinado segundo Rylek e Standart (64) através da seguinte equação :

$$R_p = H + M \quad (2.13)$$

onde : $M = 8 - 10$ cm para pratos sem vertedor.

Rylek e Standart (1964) comentam ainda que o espaçamento geralmente utilizado varia entre 30 - 60 cm em colunas industriais.

Para a predição da altura da dispersão, algumas equações são apresentadas na literatura em condições destilantes : Gimenes (1986), Reinehr (1987) e Ravagnani (1989) :

Gimenes (1986) operando uma coluna de 9,9 cm de diâmetro com pratos perfurados sem vertedor, utilizando o sistema etanol-água, propõe a seguinte equação para a predição da altura da dispersão, baseada em seus resultados experimentais :

$$H = 0,11291.10^4 \frac{\left(\frac{g d}{v_G^2}\right)^{1,021} t}{\phi^{2,76} \left(\frac{L}{V}\right)^{1,081} \left(\frac{\rho_G}{\rho_L}\right)^{0,699} \left(\frac{\sigma}{\mu_L v_G}\right)^{3,523}} \quad (2.14)$$

Os experimentos foram realizados em uma faixa de área livre de escoamento do prato de 8,3 a 28,5%.

Reinehr (1987) para analisar o efeito do diâmetro da coluna no comportamento hidrodinâmico, utilizou o mesmo sistema etanol-água estudado por Gimenes (1986), mas operando em uma coluna de 5,5 cm de diâmetro, em uma faixa de área livre de 9,89 a 39,57%, propõe a seguinte equação para o cálculo da altura da dispersão.

$$H = t \frac{\left(\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L}\right)^{0,792}}{\left(\frac{g d}{v_G^2}\right)^{0,223} \left(\frac{L}{V}\right)^{1,344} \left(\frac{v_G d \rho_L}{\mu_G}\right)^{0,059} \left(\frac{\sigma}{\mu_L v_G}\right)^{0,616} \phi^{2,589}} \quad (2.15)$$

Ravagnani (1989) estudou o efeito da tensão superficial no comportamento hidrodinâmico. Utilizando uma coluna com as mesmas características de Reinehr (1987), realizou experimentos com sistemas etanol-butanol e água-dimetilformamida, respectivamente sistemas neutro e negativo, segundo a classificação de Zuiderweg e Harmens (1958), e propõe as seguintes correlações para predição da altura da dispersão :

Para sistema etanol-butanol :

$$H = 3,16 \cdot 10^{16} t \frac{\left(\frac{\rho_G D v_G^2}{\sigma}\right)^{6,37} \left(\frac{d}{e}\right)^{0,61}}{\left(\frac{v_G^2}{gD}\right)^{3,42} \left(\frac{v_L \rho_L D}{\mu_L}\right)^{0,0617} \left(\frac{v_G \rho_G D}{\mu_G}\right)^{4,88} \phi^{1,15}} \quad (2.16)$$

Para sistema água-dimetilformamida :

$$H = 1,49 \cdot 10^{-15} t \frac{\left(\frac{v_G^2}{\mu_L}\right)^{1,51} \left(\frac{\rho_G v_G D}{\mu_G}\right)^{3,86} \left(\frac{\rho_L v_L D}{\mu_L}\right)^{2,44} \phi^{1,29}}{\left(\frac{\rho_G D v_G^2}{\sigma}\right)^{4,09} \left(\frac{d}{e}\right)^{5,34}} \quad (2.17)$$

2.5 - "HOLD-UP" DO LÍQUIDO

O "hold-up" líquido, α , relaciona a altura da dispersão, H , com a de líquido retido, h , da seguinte forma :

$$\alpha = \frac{h}{H} \quad (2.18)$$

O "hold-up" do gás, ε , é dado por :

$$\varepsilon = 1 - \alpha = \frac{H - h}{H} \quad (2.19)$$

Mahendru e Hackl (1979) e Cruz (1983) apresentam as seguintes equações para o cálculo do “hold-up” do gás obtidas através de experimentos realizados em pratos perfurados sem vertedor :

Mahendru e Hackl (1979), para sistema água-ar :

$$\varepsilon = 1 - 0,0946 \left[\frac{v_G^2 \rho_G}{g h \rho_L} \right]^{-0,2} \quad (2.20)$$

Cruz (1983), para sistemas água-ar e solução aquosa de etanol-ar:

$$\varepsilon = 0,72 \left(\frac{v_G^2}{g h} \right)^{0,05} \phi^{0,03} \quad (2.21)$$

2.6 - PRINCIPAIS VARIÁVEIS QUE INFLUENCIAM O COMPORTAMENTO HIDRODINÂMICO DE PRATOS SEM VERTEDOR

As variáveis mais importantes, encontradas na literatura, que apresentam influência sobre a hidrodinâmica dos pratos perfurados sem vertedor são : parâmetros geométricos, velocidades do líquido e do gás e propriedades físicas do líquido.

2.6.1 - Parâmetros Geométricos

Os parâmetros geométricos dos pratos que podem influenciar em seus desempenhos são : diâmetro dos orifícios, espessura e área livre.

Molokanov (1964) comenta que o diâmetro dos orifícios dos pratos perfurados sem vertedor está, geralmente, na faixa entre 0,5 a 1,0 cm. Mahendru e Hackl (1979) verificam, com base em resultados experimentais, que ao aumentar o diâmetro dos orifícios, para um valor constante de espessura do prato, a faixa de operação da coluna diminui. Por outro lado, pratos com orifícios de diâmetro maior operam por um período maior nos casos de sistemas impuros. Cruz (1983) também baseada em resultados experimentais, observa que utilizando-se o mesmo diâmetro e área livre, as alturas de líquido, da dispersão, o “hold-up” do gás e a queda de pressão serão maiores quanto menor for o diâmetro dos orifícios, mantendo constantes as vazões de gás e líquido.

Hoppe e Mittlstrass (1967) e Kreis e Raab (1979) comentam que a variação do diâmetro dos orifícios aparentemente não provoca alterações na eficiência do prato. Esta observação é contrária ao resultado esperado, pois era de se supor que a área interfacial produzida, utilizando um prato de orifícios de diâmetro menor, seria maior que aqueles utilizando orifícios de diâmetro maior. Este fato pode ser explicado pela existência de algum fenômeno na dispersão gás-líquido que anula o efeito do diâmetro dos orifícios na eficiência do prato.

Quanto à espessura do prato, Hoppe e Mittlstrass (1967) e Mahendru e Hackl (1979), afirmam que esta espessura deve ser tão reduzida quanto possível, levando em consideração a resistência do prato, pois com o aumento da espessura, aumenta o limite mínimo de operação da velocidade do gás.

Com relação à área livre de escoamento do prato, Van den Berg (1955) cita que para pratos sem vertedor, a área livre varia de 0,1 a 0,4. Cruz (1983) verifica que com o aumento da área livre, as alturas de líquido retido, da dispersão e queda de pressão sobre o prato diminuem para vazões de gás e líquido constantes. Outro fato observado é que as oscilações da dispersão ocorrem de forma mais violenta com o aumento da área livre devido à elevação do limite máximo de operação.

Os estudos realizados pela Shell Develop. Co. (1955) resultam que com o aumento da área livre do prato, a capacidade do prato aumenta, no entanto, a queda de pressão e a eficiência decrescem. Portanto, a área livre deve ser selecionada através de um balanço econômico entre a capacidade e a eficiência do prato.

Outro parâmetro geométrico importante no comportamento hidrodinâmico da dispersão é o diâmetro da coluna. Cruz (1983) comenta que, diminuindo o diâmetro da coluna, a capacidade do prato em operar com altas vazões de gás e líquido também diminui.

2.6.2 - Velocidade das Fases Líquida e Gasosa

Takahashi e Tanaka (1971) mostram a influência das velocidades do líquido e do gás para pratos perfurados sem vertedor com o sistema água-ar através da figura 2.7.

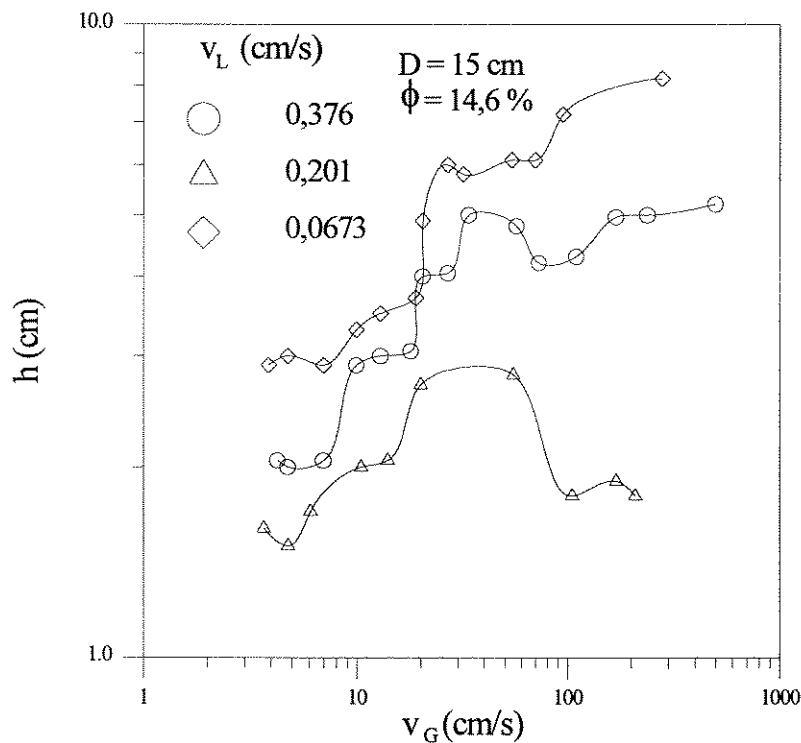


Figura 2.7 : Influência das velocidades de líquido e gás sobre a altura de líquido retido.

[Takahashi e Tanaka(1971)]

A altura de líquido retido aumenta consideravelmente com o aumento da velocidade do gás, mas se esta for constante, a altura de líquido aumentará com o aumento da velocidade de líquido. Este comportamento também é verificado por Cruz (1983), não somente para a altura de líquido mas também para a altura da dispersão e queda de pressão

sobre o prato. Verifica ainda que o “hold-up” do gás aumenta com o aumento da vazão de gás, no entanto, esta variação é muito pequena.

Gardner e Mclean (1969) apresentam a influência das velocidades do gás e do líquido no “hold-up” do gás em pratos perfurados com vertedor, figura 2.8. Até a velocidade de aproximadamente $v_G = 1,5$, o “hold-up” do gás aumenta rapidamente até o valor de $\epsilon = 0,5$, segundo os autores, o aumento da velocidade do gás provoca um aumento do tamanho das bolhas formadas. Em seguida, o “hold-up” mantém-se constante com o aumento da velocidade do gás, em harmonia com os dois processos opostos, a quebra e o aumento da velocidade de ascensão das bolhas. Em um valor de $v_G = 3,5$, o “hold-up” começa a aumentar novamente, correspondendo ao aumento da velocidade de ascensão das bolhas. Nesta faixa, a altura da dispersão aumenta rapidamente com a velocidade do gás.

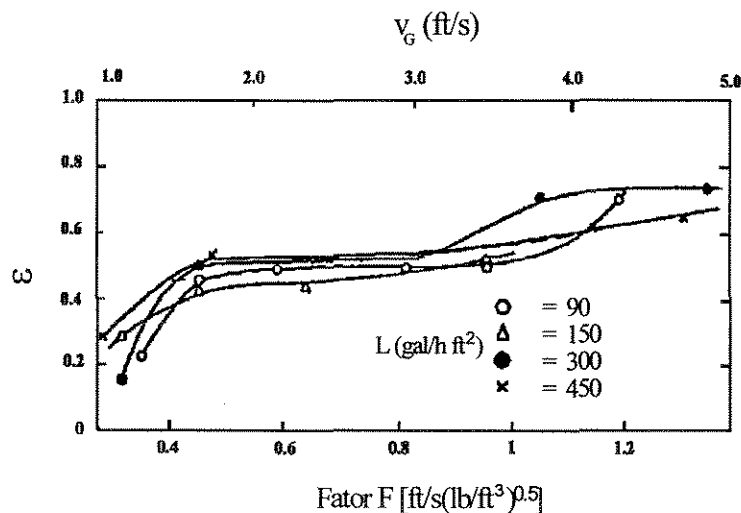


Figura 2.8 : Efeito das taxas de fluxo do gás e do líquido sobre o “hold-up” do gás.

[Gardner e Mclean (1969)].

2.6.3 - Propriedades Físicas da Fase Líquida

Gardner e Mclean (1969) concluem através de estudos com os sistemas água-ar, tetracloreto de carbono-ar e decalin (decahidronaftaleno)-ar que em condições similares de vazões de gás e líquido, as propriedades da dispersão não são idênticas e são, portanto, dependentes das propriedades dos sistemas.

Takahashi e Tanaka (1971) mostram através da figura 2.9, que as massas de líquido retido sobre o prato para os sistemas solução de glicerina-ar e solução de metanol-ar diferem com a viscosidade e a tensão superficial do líquido. A altura de líquido retido, para área livre de escoamento e velocidade do gás constantes, aumenta com o aumento da viscosidade e tensão superficial do líquido.

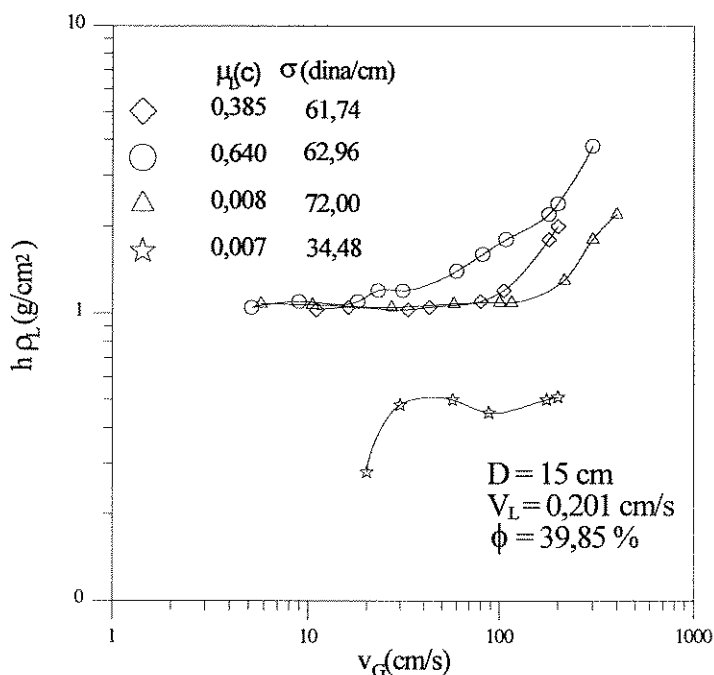


Figura 2.9 : Influência das propriedades físicas do líquido sobre a altura de líquido retido. [Takahashi e Tanaka (1971)]

Zuiderweg e Harmens (1958) e Bainbridge e Sawistowski (1964) apresentam estudos sobre o efeito da tensão superficial no desempenho de colunas de destilação. A tensão superficial do refluxo varia conforme desce pela coluna. Isto é causado pela variação da composição do refluxo e pelo aumento da temperatura. Estes autores concluem que esta variação de tensão superficial do refluxo pode causar uma maior ou menor estabilidade na formação das bolhas da dispersão. Zuiderweg e Harmens (1958) classificam três tipos de sistemas destilantes. Positivos, sistemas que apresentam estabilidade na formação das bolhas, em que o refluxo apresenta um crescimento em tensão superficial; neutros, sistemas em que os componentes não apresentam diferença na tensão superficial; negativos, sistemas que apresentam instabilidade na formação das bolhas, em que o refluxo decresce em tensão superficial.

Segundo Zuiderweg e Harmens (1958), em sistemas em que o vapor é disperso no líquido, o tempo de residência das bolhas formadas pode aumentar consideravelmente pelo reforço de seus pontos fracos. Estes pontos fracos são localizados nas adjacências das bolhas, mostrados na figura 2.10. Ocorre uma saturação preferencial do componente mais pesado nas adjacências das bolhas devido à transferência de massa, aumentando a tensão superficial nestes locais, uma vez que, em sistemas positivos, o componente mais volátil tem a menor tensão superficial. Este gradiente de tensão superficial que se forma na superfície da bolha, causa um deslocamento de líquido da região de menor tensão superficial para a de maior, reforçando os pontos fracos e impedindo a coalescência das bolhas.

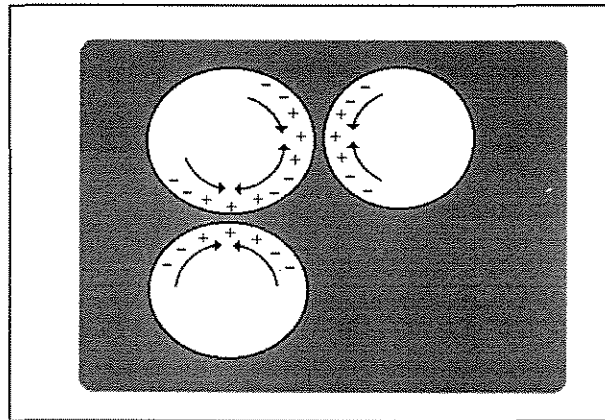


Figura 2.10 : Efeito da tensão superficial na estabilização das bolhas na dispersão. [Zuiderweg e Harmens (1958)].

Zuiderweg e Harmens (1958) complementam dizendo que em sistemas em que não ocorrem gradientes de tensão superficial, a estabilização das bolhas não ocorre, produzindo bolhas com tempo de residência menor em relação aos sistemas positivos. Em sistema negativos, o componente mais volátil é aquele de maior tensão superficial, provocando uma diminuição da tensão superficial nas adjacências das bolhas e conseqüentemente, um fluxo de líquido dos pontos fracos, de menor tensão superficial, para a região de maior tensão superficial, portanto, os sistemas negativos favorecem o surgimento do regime “Spray”. Em sistemas negativos e neutros, a eficiência do prato observada por estes autores é menor em comparação aos sistemas positivos.

Bainbridge e Sawistowski (1969) investigando o comportamento dos sistemas negativos e positivos em dispersões do tipo “Spray”, verificam que o sistema mais negativo estudado, fornece a maior eficiência do prato, enquanto que o mais positivo, fornece a menor eficiência. Os efeitos do gradiente de tensão superficial na formação da área interfacial no regime “Spray” são inversos aos observados por Zuiderweg e Harmens (1958) em regimes espumantes. Em sistemas positivos, a tensão superficial será maior no pescoço da gota, figura 2.11(a), provocando um escoamento de líquido para o pescoço, dificultando a quebra da gota. No caso de sistemas negativos 2.11(b), a situação é inversa e o gradiente de tensão superficial que se forma na gota provoca um fluxo de líquido do pescoço para o seu redor, acelerando a quebra da gota. Portanto, a área interfacial em sistemas negativos é maior que em sistemas positivos.

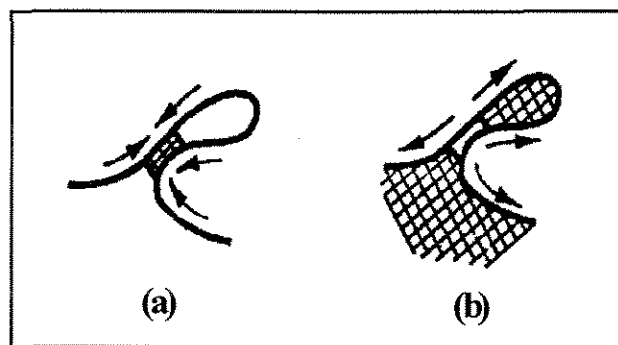


Figura 2.11 : Efeito da tensão superficial na formação de gotículas no Regime “Spray” em sistemas positivos (a) e negativos (b) [Bainbridge e Sawistowski (1969)].

Zuiderweg e Harmens (1958) e Hart e Haselden (1969) verificam a influência da composição na altura da dispersão. Zuiderweg e Harmens (1958) indicam que a altura máxima ocorre na composição em que ocorre a máxima força motriz ($y-y^*$) para todos os tipos de sistemas destilantes. A altura é menor quanto maior for o grau de pureza da mistura líquida. No entanto, Hart e Haselden (1969) verificam que a máxima altura ocorre na composição em que é máximo o índice de estabilização, dado por :

$$S = \frac{\partial \sigma}{\partial x} (y - y^*) \quad (2.22)$$

Segundo Hart e Haselden (1969), os sistemas que apresentam azeotropia, a altura da dispersão apresenta dois máximos com a concentração, um antes e o outro depois da azeotropia.

2.7 - DESTILAÇÃO TRIFÁSICA

É possível formar uma segunda fase líquida em operações de destilação, como por exemplo a destilação de azeótropos heterogêneos.

Herron, Kruelskie e Fair (1988) comentam que existem muitas especulações a respeito do processo de destilação sobre condições trifásicas, e um temor de um comportamento não desejado da hidrodinâmica ou da transferência de massa tem influenciado muitos processos de engenharia a evitar o envolvimento de três fases.

Goodliffe (1934) realizou experimentos em uma coluna de destilação fracionada de óleo cru, contendo vinte e dois pratos de campânula de 126 cm de diâmetro. O autor calculou uma eficiência global do prato de 18,5% e concluiu que esta baixa eficiência era parcialmente causada pelo efeito da água em cada prato, prejudicando o contato entre as fases vapor e líquida de hidrocarbonetos. No entanto, de forma contraditória a esses resultados, Schoenborn e colaboradores (1941) realizando experimentos com compostos orgânicos como a fase imiscível em água em uma coluna de pratos com vertedor com quinze pratos de 20,3 cm de diâmetro, determinaram a eficiência da coluna e observaram que os experimentos resultaram em boa mistura das fases sobre os pratos e concluíram que a presença da fase aquosa não causou nenhum efeito adverso no desempenho da coluna. Ressalva-se que nenhum estudo hidrodinâmico foi realizado pelos autores.

Schenewerk (1975) investigou líquidos imiscíveis em destilações trifásicas em uma coluna de 7,62 cm de diâmetro equipada com dez pratos. A destilação trifásica foi observada

mas nenhum comentário foi feito sobre o comportamento da coluna ou pela baixa eficiência do prato (30%) obtida.

Problemas na capacidade de formar espumas são sempre associados com a formação da segunda fase líquida. Ross e Nishioka (1975) com base em resultados experimentais, concluíram que a capacidade de formar espumas aumenta com a aproximação da região de duas fases líquidas, mas na região de duas fases líquidas, uma das fases líquida prejudica a outra. Neste trabalho, porém, a vazão do vapor utilizada era baixa, provocando pouca agitação da dispersão.

Herron, Kruelskie e Fair (1988) apresentaram resultados experimentais de queda de pressão sobre o prato, altura de líquido retido e altura da dispersão, realizados em um simulador de três estágios com pratos com vertedor, usando o ar como a fase gasosa e água mais um óleo leve como o sistema de líquidos imiscíveis.

Os autores correlacionaram os dados experimentais de queda de pressão pelo modelo de Bennett e colaboradores (1983) obtendo um erro absoluto médio de 7,1%. Um resultado melhor foi obtido utilizando o modelo de Fair (1963) que forneceu um erro absoluto médio de 4,9%. Para a altura de líquido retido, tanto o modelo de Bennett e colaboradores (1983) quanto de Fair (1963) forneceram bons resultados em comparação aos dados experimentais, com um erro absoluto médio de aproximadamente 40%. O modelo utilizado pelos autores para prever a altura de dispersão (método de AIChE - 1958) não resultou em boa predição quando comparado aos resultados experimentais. Este modelo não leva em conta as propriedades e vazão da fase líquida, variáveis significativas para este trabalho. Os autores concluíram que a agitação provocada pelo gás produzia uma mistura sobre o prato que possuía um comportamento de um líquido homogêneo seguindo correlações gerais para queda de pressão, altura de líquido retido e altura da dispersão, e nenhum problema na capacidade de formar espuma foi observado.

CAPÍTULO 3

EQUIPAMENTO

E

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

3.1 - INTRODUÇÃO

Pelo exposto no capítulo anterior, informações sobre a hidrodinâmica de pratos perfurados sem vertedor operados em condições destilantes são disponíveis para regimes de escoamento e altura da dispersão. Porém ainda são poucas as informações sobre a altura de líquido retido e “hold-up” líquido.

O presente capítulo tem por objetivo apresentar o equipamento de destilação que permite determinar esses parâmetros hidrodinâmicos, bem como o procedimento experimental. Informações acerca dos sistemas destilantes também serão apresentadas.

3.2 - EQUIPAMENTO

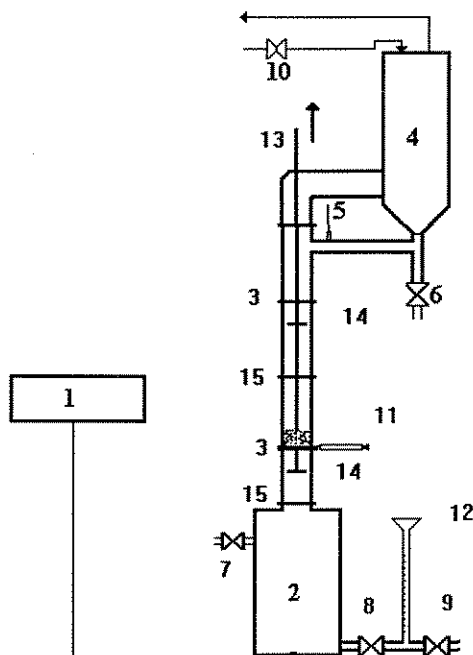
A coleta de dados foi realizada em uma coluna de destilação construída em escala de laboratório, formada por : coluna, condensador e refeedor. A figura 3.1 apresenta o esquema do equipamento experimental utilizado.

3.2.1 - Refeedor

O refeedor é feito de latão e possui 45cm de altura e 24cm de diâmetro e se posiciona na base da coluna, como mostra a figura 3.1.

Através da figura 3.1 observa-se que o refeedor possui três válvulas. A válvula (7) permitia a alimentação da mistura a ser destilada no refeedor. A válvula (8) tem conectado um tubo de vidro (12) que servia para indicar a pressão no interior do refeedor, pela variação do nível de líquido. E por fim, a válvula (9) permitia a coleta e a drenagem da mistura líquida do refeedor.

O interior do refeedor possui resistências elétricas e que, através da variação da potência, era possível variar a taxa de vaporização da mistura, desde o ponto de mínima até o de máxima operação. A variação da potência era feita através de um painel de controle (1).



- | | |
|----------------------------|-------------------------|
| 1 - Painel de controle; | 11 - Seringa; |
| 2 - Refervedor; | 12 - Tubo de vidro; |
| 3 - Prato perfurado; | 13 - Haste; |
| 4 - Condensador; | 14 - Placas circulares; |
| 5 - Termômetro; | 15 - Flange. |
| 6, 7, 8, 9, 10 - Válvulas; | |

Figura 3.1 : Ilustração do equipamento experimental.

3.2.2 - Coluna

A coluna foi montada sobre o refervedor utilizando tubos de vidro pirex de 5,5cm de diâmetro interno e 14cm de altura. A coluna sendo de vidro permitia a visualização das dispersões formadas sobre o prato. Os tubos de vidro foram intercalados com pratos e flanges (15) feitos de latão conectados entre si. As hastes utilizadas para conectar os pratos são também de latão. Anéis de borracha com 7,2cm e 5,2cm de diâmetros externo e interno

respectivamente e 0,21cm de espessura foram colocados entre os pratos e os tubos de vidro para garantir a vedação da coluna.

A figura 3.2 (a,b) mostram respectivamente uma ilustração do prato perfurado e da flange.

O prato perfurado (3) da figura 3.1 possui 9cm de diâmetro e 0,21cm de espessura. Os orifícios são circulares posicionados em arranjo triangular. São 19 orifícios não chanfrados com espaçamento de 0,975cm entre seus centros. A tabela 3.1 apresenta os parâmetros geométricos dos pratos utilizados.

A flange possui 9cm de diâmetro externo e 5,2cm de interno e 0,21cm de espessura. Os seis orifícios localizados na flange, tem por objetivo unir os pratos.

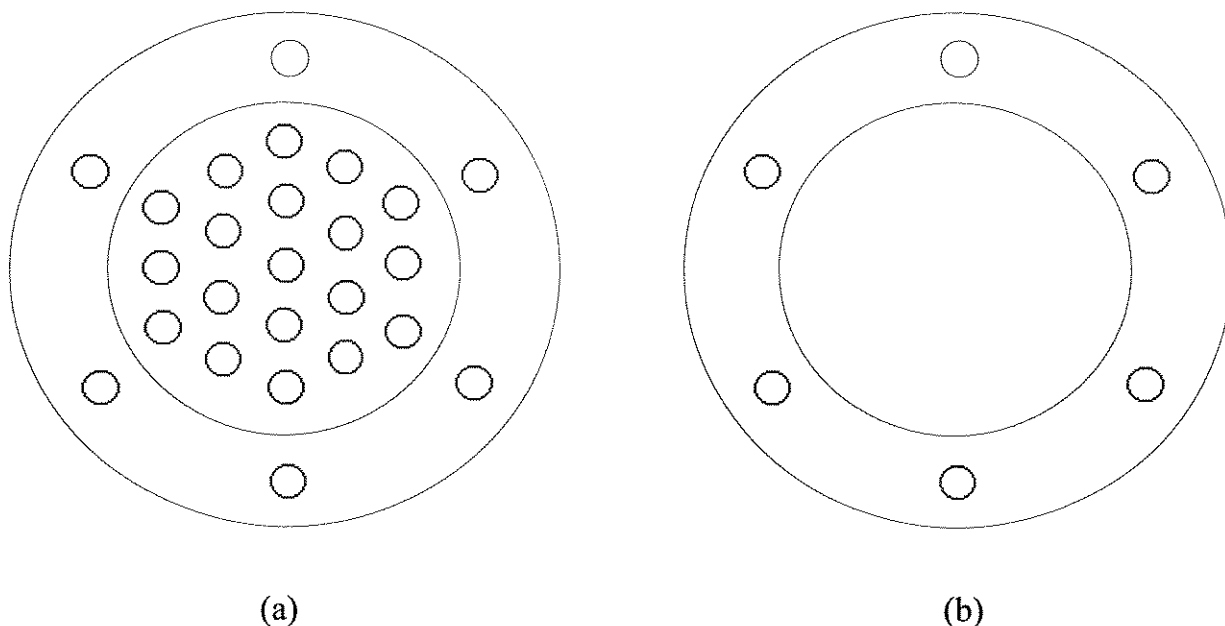


Figura 3.2 : Ilustração: (a) do prato perfurado; (b) da flange.

Tabela 3.1 : Dimensões dos pratos perfurados utilizados.

Prato	d (cm)	ϕ (%)
1	0,40	9,52
2	0,50	14,88
3	0,55	18,00
4	0,60	21,42

A coluna possui também um mecanismo, desenvolvido neste trabalho, que permitia coletar dados de altura de líquido retido através de um aprisionamento instantâneo da mistura líquida sobre o prato. Este mecanismo é composto por duas placas circulares (14) de latão de 5cm de diâmetro presas a uma haste (13) com molas. Estas placas têm um diâmetro levemente maior que a região perfurada do prato. Uma das placas foi posicionada abaixo do prato onde se encontra fixada a seringa (11) e a outra acima, e através de um movimento ascendente repentino da haste, o líquido presente sobre o prato era aprisionado. Borrachas circulares foram colocadas sobre as placas circulares para garantir a vedação do mecanismo.

3.2.3 - Condensador

O condensador é posicionado no topo da coluna, como mostra a figura 3.1, e é feito de latão com 15cm de diâmetro e 60cm de altura.

É utilizada a água à temperatura ambiente como fluido refrigerante, e sua vazão era controlada manualmente através da válvula (10) de modo que o vapor passasse ao estado líquido próximo ao de líquido saturado. Este controle era feito pela leitura da temperatura indicada pelo termômetro colocado no tubo de refluxo.

3.2.4 - Sistemas Destilantes

Os sistemas destilantes utilizados no presente trabalho foram o etanol-butanol e o água-butanol. A tabela 3.2 mostra alguns valores das propriedades físico-químicas dos componentes puros, na temperatura de 20°C, temperatura de ebulição e massa molecular.

Tabela 3.2 : Propriedades físicas dos componentes puros a temperatura de 20°C.

Componente	PM	σ (dina/cm)	μ (cp)	ρ (g/cm ³)	T _b (°C)
água	18,05	58,9	1,00	0,998	100,0
etanol	46,069	22,7	1,20	0,789	78,4
butanol	74,123	25,4	2,99	0,810	117,0

Os sistemas têm características muito diferentes. O sistema etanol-butanol é uma solução quase ideal e portanto não apresenta azeótropo. É classificado como sistema neutro segundo Zwietering e Harmens (1958). Já o sistema água-butanol é uma solução fortemente não ideal e é classificado como sistema negativo. Apresenta a formação de um azeótropo a uma pressão de 1atm, fração molar em água igual a 0,752 e temperatura de ebulição igual a 92,9°C.

Um azeótropo apresenta um ponto de máximo ou de mínimo na temperatura de ebulição. A ocorrência do ponto de máxima (ou de mínima) na temperatura versus composição é causada pelo desvio negativo (ou positivo), da lei de Raoult para soluções ideais.

Uma mistura em que a pressão total é maior do que a calculada para a idealidade, é dita como tendo um desvio positivo da lei de Raoult, e aquela em que a pressão total for menor, apresenta um desvio negativo.

A miscibilidade parcial do líquido pode ocorrer se os desvios positivos da lei de Raoult forem suficientemente elevados, como é o caso do sistema água-butanol. A figura 3.3 mostra o equilíbrio líquido-vapor para o sistema água-butanol a um pressão de 1atm.

Neste caso ocorre a formação de um azeótropo de ponto de mínimo na temperatura em que a fase vapor está em equilíbrio com duas fases líquidas, e portanto, chamado de azeótropo heterogêneo.

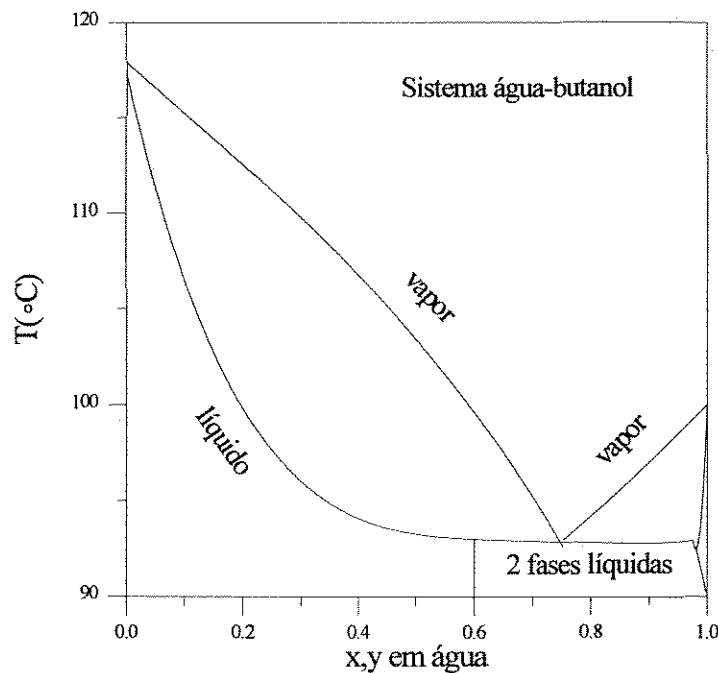


Figura 3.3 : Curva de equilíbrio líquido-vapor do sistema água-butanol à pressão de 1 atm.

3.3 PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Os experimentos foram realizados em refluxo total, para os pratos relacionados na tabela 3.1. Para cada tipo de prato foi variada a composição molar do componente mais volátil da carga inicial do refeedor, de 15 a 90% para o sistema etanol-butanol e de 20 a 40% (faixa de composição no refeedor que causava a formação de duas fases líquidas sobre o prato) para o água-butanol, e para cada composição inicial foi variada a taxa de vaporização da mistura, desde o ponto de mínima (início da retenção de líquido sobre o prato) até o de máxima (inundação da coluna) operação.

Para cada experimento realizado, foram feitas as seguintes medidas :

- composição do líquido sobre o prato;
- altura da dispersão;
- altura de líquido retido;

- tipo de dispersão;
- vazão do refluxo;
- composição do refluxo (destilado).

O refulvedor era alimentado com a mistura líquida de composição desejada e abria-se a válvula (10) da figura 3.1 para permitir a circulação do líquido refrigerante pelo condensador. Ligavam-se as resistências elétricas para obter a taxa de vaporização desejada e era iniciada a produção de vapor no interior do refulvedor. O vapor subia pela coluna e era condensado no condensador e retornava à coluna no estado líquido através do refluxo. Iniciava-se a retenção de líquido e em seguida era formada a dispersão sobre o prato. A coleta de dados era realizada quando a coluna alcançava o regime permanente, isto é, quando a composição e a altura da dispersão no prato (3) não mais variavam. Amostras de líquido sobre o prato eram retiradas, com o auxílio da seringa (11) da figura 3.1, fixada na borracha de vedação, em intervalos de 5min até alcançar o regime permanente. No caso do sistema água-butanol, a amostra líquida passava por uma centrífuga para permitir uma rápida separação das duas fases, e para então serem medidas as suas composições. Alcançada a estabilização, iniciava-se a coleta dos dados. Era medida a altura da dispersão formada sobre o prato, através de um escala milimétrica colada na parede externa do tubo de vidro, e era anotado o tipo de regime apresentado. A composição do líquido sobre o prato foi medida anteriormente. Em seguida o mecanismo para a medida da altura de líquido era acionado e, simultaneamente eram desligadas as resistências elétricas. Com o líquido já enclausurado sobre o prato, fazia-se a medida da altura do líquido retido. Esta medida era realizada de maneiras diferentes para os dois sistemas:

- Sistema etanol-butanol : a altura de líquido era medida diretamente utilizando a mesma escala milimétrica onde se lia a altura da dispersão;

- Sistema água-butanol : como este sistema apresentava a formação de duas fases líquidas, o líquido era todo coletado em um frasco lavador de gases com o auxílio de um aspirador e media-se o volume de cada fase líquida após ocorrida a separação das mesmas. A altura de líquido retido pode ser calculada conhecendo-se os volumes de cada fase líquida e a área da seção transversal da coluna.

Devido ao procedimento da medida da altura de líquido provocar uma desestabilização da coluna, para a medida da vazão do refluxo, as mesmas resistências eram ligadas para obtermos as mesmas condições de operação. Alcançado novamente o regime permanente, a válvula (6) da figura 3.1 era totalmente aberta para permitir a descarga do líquido acumulado nas tubulações do refluxo e, logo em seguida, a vazão de líquido era determinada pela coleta do líquido condensado que escoava em um intervalo de 10 segundos.

3.3.1 - Medida da Composição da Fase Líquida

A composição da fase líquida foi medida através de um refratômetro ABBÉ Carl Zeiss modelo nº 32G110d. Inicialmente foram determinadas as curvas de calibração (índice de refração versus composição molar) para ambos os sistemas, etanol-butanol e água-butanol, a uma temperatura de 20°C, mantida constante através de um banho termostático.

3.3.1.1 - Sistema Etanol-Butanol

A figura 3.3 representa a curva de calibração para o sistema etanol-butanol.

A seguinte equação é ajustada para a curva de calibração :

$$x = -545,9 + 818,0 \text{ IR} - 305,8 \text{ IR}^2 \quad (3.3)$$

onde : x = fração molar do componente mais volátil;

IR = índice de refração;

Erro médio : 0,85%

Erro máximo : 2,66%

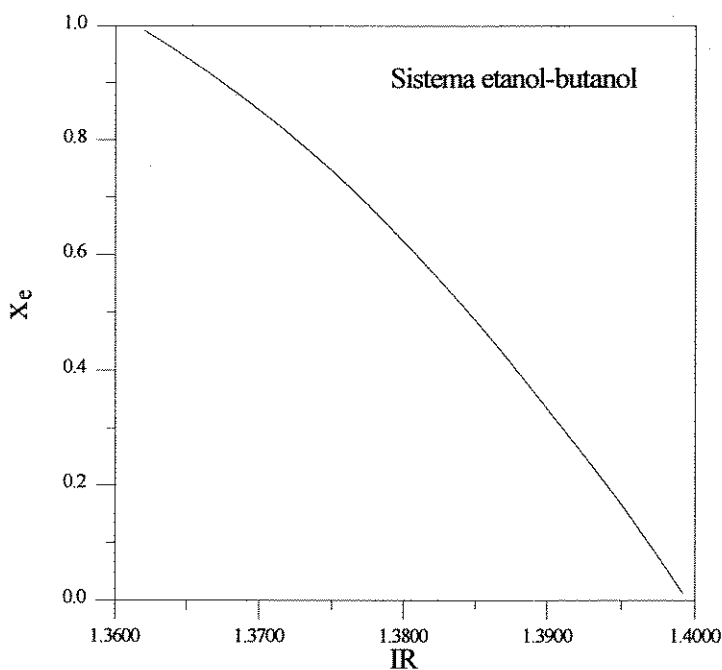


Figura 3.3 : Curva de calibração do sistema etanol-butanol.

3.3.1.2 - Sistema Água-Butanol

A figura 3.4 (a,b) mostra as curvas de calibração do sistema água-butanol. Observa-se que a calibração foi realizada nas duas faixas (a) e (b) de concentração em que os componentes são mutuamente solúveis.

As seguintes equações foram ajustadas para as curvas de calibração :

- Para x_a : 0,0 - 0,51 :

$$IR = 1,3997 - 0,005800 x_a - 0,0227611 x_a^2 \tag{3.4}$$

Erro médio : 0,004 %

Erro máximo : 0,007%

Foi ajustada uma equação de IR em função de x_a , e não o contrário, pois aquela resultou em erros menores em comparação aos experimentais. A composição era determinada pela raiz positiva da equação 3.4.

- Para $x_a : 0,98 - 1,00$:

$$x_a = -142,998 + 217,754 \text{ IR} - 82,3166 \text{ IR}^2 \tag{3.5}$$

Erro médio : 0,074%

Erro máximo : 0,099%

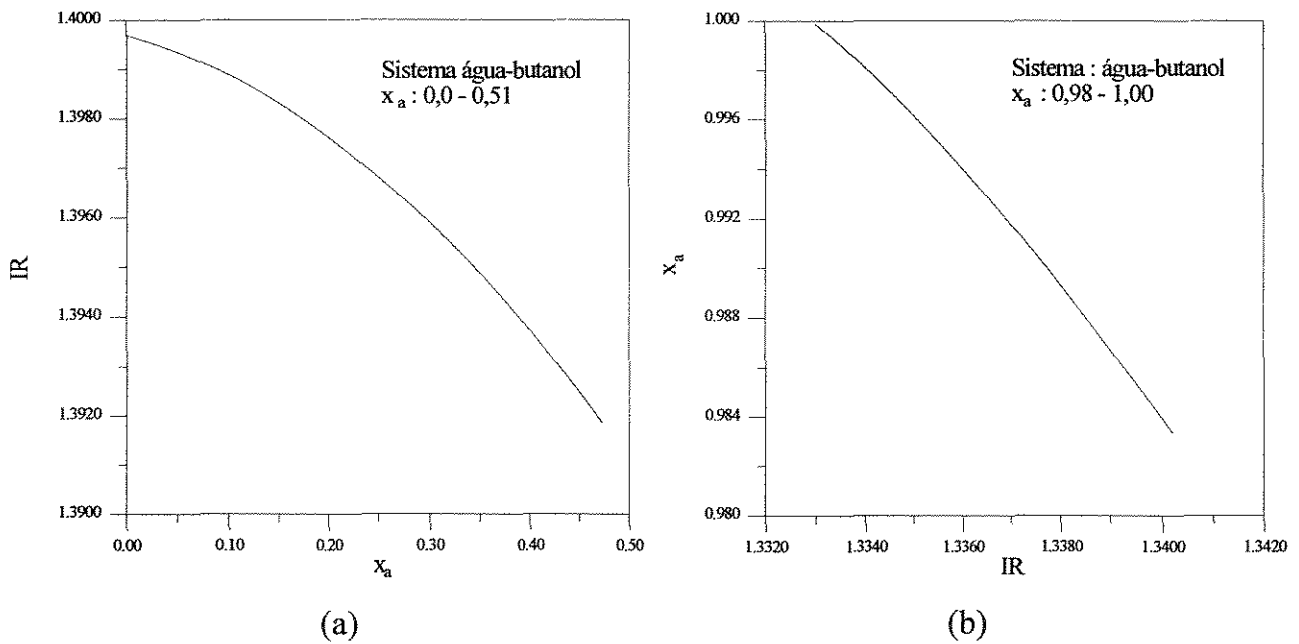


Figura 3.4 : Curva de calibração do sistema água-butanol :

(a) $x_a : 0,0 - 0,51$; (b) $x_a : 0,98 - 1,00$.

Para calcular a fração molar em água da mistura sobre o prato, composto de duas fases líquidas, é utilizada a seguinte relação :

$$x_a = x_{a1} \frac{V_l}{V_T} \frac{\rho_l}{\rho_T} + x_{ap} \frac{V_p}{V_T} \frac{\rho_p}{\rho_T} \tag{3.6}$$

$$\text{onde : } \frac{1}{\rho_l} = \frac{x_{al}}{\rho_a} + \frac{(1-x_{al})}{\rho_b} ;$$

$$\frac{1}{\rho_p} = \frac{x_{ap}}{\rho_a} + \frac{(1-x_{ap})}{\rho_b} ;$$

x_{al} , x_{ap} = fração molar da fase leve e pesada respectivamente;

V_l , V_p = volume da fase leve e pesada respectivamente [ml];

ρ_a , ρ_b , ρ_l , ρ_p , ρ_T = massa específica molar da água, do butanol, da mistura da fase leve, da mistura da fase pesada e das duas misturas líquidas respectivamente [mol/cm^3].

CAPÍTULO 4

RESULTADOS E ANÁLISE

4.1 - INTRODUÇÃO

Os dados experimentais obtidos para o equipamento e procedimento experimental descritos no capítulo anterior estão apresentados no Apêndice A, para os dois sistemas destilantes.

Neste capítulo são apresentadas as análises destes resultados experimentais, e para tal, o cálculo de diversas variáveis foi necessário. Nos Apêndices B, C, D e E estão descritas todas as informações necessárias para o cálculo dos seguintes dados, para ambos os sistemas destilantes :

Apêndice B : Cálculo da Fração Molar do Vapor

Apêndice C : Cálculo da Temperatura de Equilíbrio

Apêndice D : Cálculo das Propriedades Físicas

para todos os componentes puros (etanol, água e butanol) e de suas misturas (etanol-butanol e água-butanol)

massa específica do líquido e do vapor;

tensão superficial do líquido;

viscosidade do líquido e do vapor.

Apêndice E : Cálculo das Velocidades Superficiais de Líquido e Vapor.

De posse destes dados, um estudo sobre os regimes de escoamento observados neste trabalho, a altura de líquido retido, a altura da dispersão, o “hold-up” líquido e a faixa de operação serão abordados a seguir.

4.2 - REGIMES DE ESCOAMENTO

Os regimes de escoamento encontrados na coluna de destilação dependem principalmente das vazões de vapor e de líquido, da área livre de escoamento e das propriedades físicas do sistema destilante utilizado, conforme descrito anteriormente.

Observa-se no entanto, que apesar de ser classificado como pertencente ao mesmo tipo de dispersão como por exemplo, o “Froth”, que é o tipo mais comum encontrado nas operações a pressão atmosférica, as características desta dispersão podem ser diferentes dependendo do sistema. Durante a realização dos experimentos, verificou-se que as dispersões encontradas nos ensaios com o binário etanol-butanol tem uma fase líquida transparente, como são os componentes puros.

Já a fase líquida da dispersão apresentada pelo sistema água-butanol era homogênea, porém, de coloração branca similar à emulsão formada quando óleo é colocado em contato com água quente com agitação. Em nenhuma ocasião, mesmo a baixas vazões de vapor, foi verificada a formação de duas fases líquidas. Esta turbidez impedia uma boa visualização das características das bolhas, embora permitisse distinguir diferentes tipos de regimes de escoamento, conforme descreveremos a seguir.

Foram observados três tipos de dispersão em todos os experimentos realizados:

a) “Spray”: dispersão onde o vapor arrastava a pequena quantidade de líquido presente sobre o prato, sem a formação de bolhas de vapor no seio da fase líquida. A formação deste tipo de dispersão foi observada nos pratos de áreas livres mais elevadas, nos casos onde havia pouco líquido retido e, ao contrário do “Spray” descrito na revisão da literatura, ocorreu próximo ao limite inferior de operação, isto é, próximo ao ponto de retenção de líquido. A ocorrência deste regime está de acordo com o descrito em Ravagnani (1989). Devido a essa baixa velocidade, o vapor não tem a mesma potência em arremessar o líquido na forma gotículas, e o que ocorreu foi uma discreta projeção do líquido na forma de gotas e jatos de modo que em alguns casos, o volume de líquido na dispersão, supera a de vapor.

b) “Froth”: dispersão que apresentava a formação de bolhas de vapor que se chocavam entre si provocando um regime de muita turbulência.

c) Transição “Froth”-”Spray”: dispersões que tinham um comportamento misto entre os dois anteriormente descritos. Apresentavam agitação da massa líquida com formação de bolhas de vapor e essa massa era projetada pelo vapor. Assim como o “Spray”, este tipo de dispersão ocorre a baixas vazões de vapor. A medida que as vazões de vapor e de líquido aumentavam, aumentava o líquido retido, favorecendo a formação de bolhas.

As tabelas 4.2.1 e 4.2.2 mostram a ocorrência dos tipos de regimes de escoamento em termos de faixa de velocidade do vapor, para cada área livre do prato utilizado e para os dois sistemas destilantes estudados.

Tabela 4.2.1 : Faixa de velocidade dos tipos de regime para o sistema etanol-butanol.

Área livre do prato (%)	Faixa de velocidade do vapor (cm/s) Sistema etanol-butanol		
	“Spray”	Transição	“Froth”
9,52	-	-	10,73 - 38,61
14,88	-	-	21,89 - 52,37
18,00	28,71	29,4 - 32,14	29,94 - 64,11
21,42	32,61 - 51,14	36,35 - 52,14	41,4 - 65,84

Tabela 4.2.2 : Faixa de velocidade dos tipos de regime para o sistema água-butanol.

Área livre do prato (%)	Faixa de velocidade do vapor (cm/s) Sistema água-butanol		
	“Spray”	Transição	“Froth”
9,52	-	-	18,9 - 53,7
14,88	30,5 - 34,9	38,5 - 46,7	34,2 - 68,3
18,00	46,0 - 49,3	56,8 - 57,1	57,1 - 80,7
21,42	57,1 - 62,0	70,4 - 72,7	68,8 - 88,7

O tipo de sistema destilante também pode favorecer o surgimento do regime “Spray”. Zuiderweg e Harmens (1958) afirmam que os sistemas negativos favorecem a formação de gotas. Observando-se as tabelas 4.2.1 e 4.2.2, verifica-se que a dispersão “Spray” foi formada a partir do prato de 14,88% de área livre para o sistema água-butanol (negativo), enquanto que para o etanol-butanol (neutro) sua formação apenas ocorreu a partir do prato de 18,00%, resultado que concorda com a afirmação feita pelos autores.

O regime de Transição ocorreu nas mesmas condições do regime “Spray” em relação à área livre e ao tipo de sistema destilante. A única diferença foi que a transição surgiu em velocidades de vapor pouco mais elevadas.

O regime “Froth” foi o mais freqüente em todos os tipos de pratos para ambos os sistemas. Nos pratos de menor área livre, foi observado um domínio total deste regime. A turbulência do “Froth” observada variava de acordo com a velocidade do vapor, quanto maior essa velocidade, maior era a turbulência da dispersão, quebrando e tornando menores as dimensões das bolhas. Não foi possível observar se houve maior distribuição de tamanho de bolhas conforme descrito na revisão da literatura.

Observou-se que, quanto menor a área livre, maiores eram as bolhas do “Froth” e, a medida que a concentração em etanol aumentava, esse tamanho também aumentava. O caso da diminuição do tamanho das bolhas com o aumento da área livre, se deve ao aumento da faixa de velocidade do vapor, que conforme indicamos no parágrafo anterior, ocorre a quebra das bolhas.

Já para o sistema água-butanol, não foi possível verificar visualmente a variação do tamanho das bolhas no “Froth” em diferentes condições, conforme mencionado anteriormente. A mistura por ser um sistema negativo não oferece estabilidade na formação das bolhas, e portanto, observamos um “Froth” composto de massa líquida agitada por jatos de vapor com discreta formação de bolhas.

4.3 - ALTURA DE LÍQUIDO RETIDO SOBRE O PRATO

A altura de líquido retido, h , é um parâmetro fundamental para o projeto de uma coluna de pratos perfurados sem vertedor.

Como descrito no capítulo anterior, a altura de líquido retido foi obtida através de um mecanismo que aprisionava o líquido sobre o prato, para então ser medida a sua altura.

O estudo da influência da velocidade do vapor, da área livre do prato e da composição do líquido sobre a altura de líquido retido será feito a seguir.

4.3.1 - Influência da Velocidade do Vapor

As figuras 4.3.1 (a, b, c, d) e 4.3.2 (a, b, c, d) mostram a influência da velocidade do vapor na altura de líquido retido respectivamente para os sistemas etanol-butanol e água-butanol, tendo como parâmetro a composição inicial no refeedor, para diferentes áreas livres. Os dados experimentais utilizados para a construção dos gráficos encontram-se no Apêndice A.

Ressalva-se aqui, que a literatura apresenta estudos em que a influência da velocidade superficial do vapor sobre a altura de líquido retido, tem como parâmetro a velocidade superficial do líquido. Existem diversos fatores que impedem o uso desta variável como parâmetro : neste trabalho os ensaios foram realizados a refluxo total e ,portanto, a velocidade do líquido está diretamente relacionada com a do vapor, pela igualdade das vazões molares no interior da coluna; o limite de operação do prato; operação em refluxo parcial não foi possível ser realizada para pratos com área livre menor que 18% que, devido ao pequeno diâmetro da coluna, este operava a baixas vazões volumétricas do líquido que saia do condensador, impossibilitando a divisão deste líquido por meios manuais.

Pelo exposto, em condições de destilação, a variável velocidade superficial de líquido não é um parâmetro facilmente manipulável, como ocorre com os ensaios descritos na revisão bibliográfica.

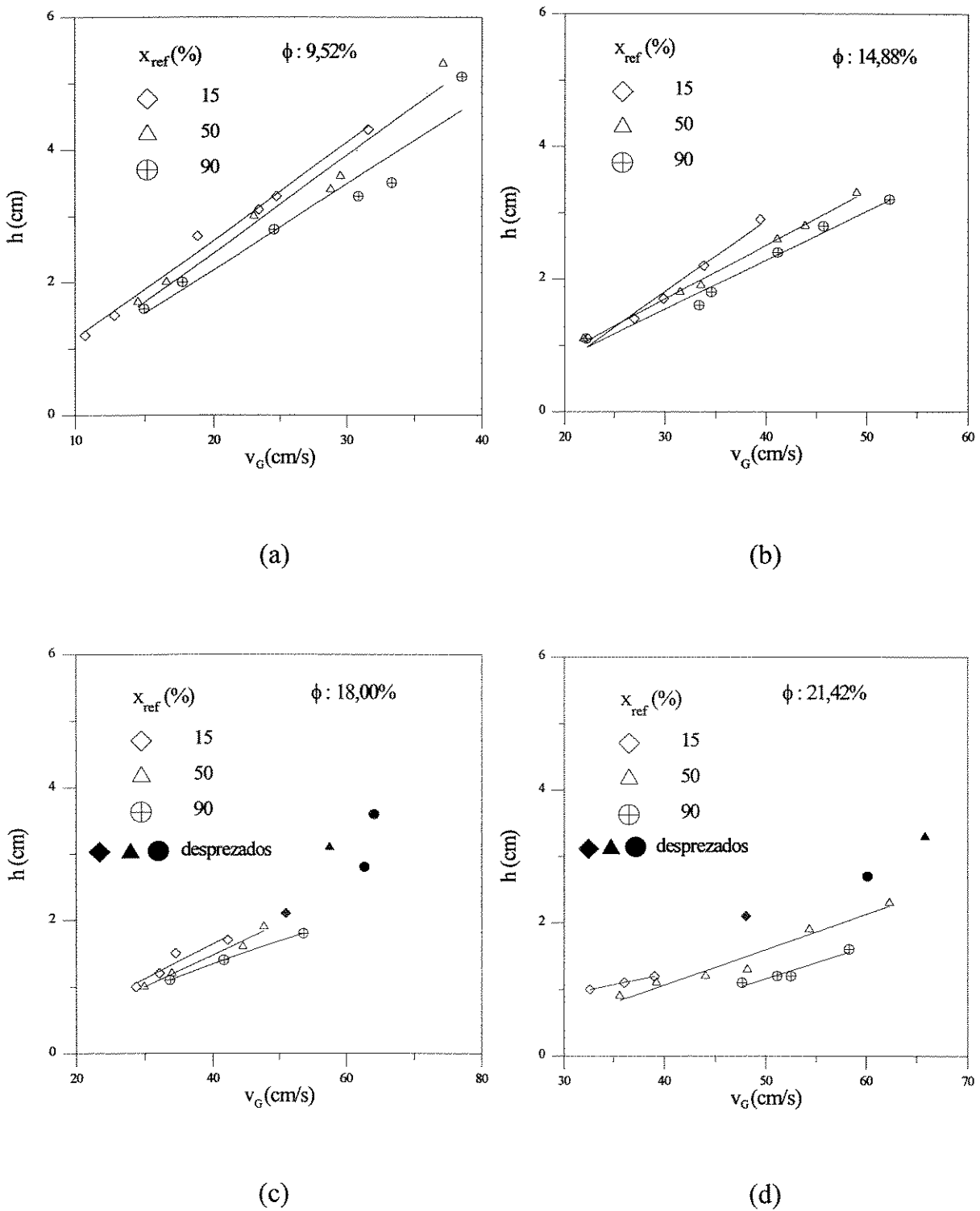


Figura 4.3.1 : Influência da velocidade superficial do vapor na altura de líquido retido para o sistema etanol-butanol. ϕ (%): (a) 9,52; (b) 14,88; (c) 18,00; (d) 21,42 (pontos negros desprezados devido ao efeito do acúmulo de líquido no mecanismo de medição).

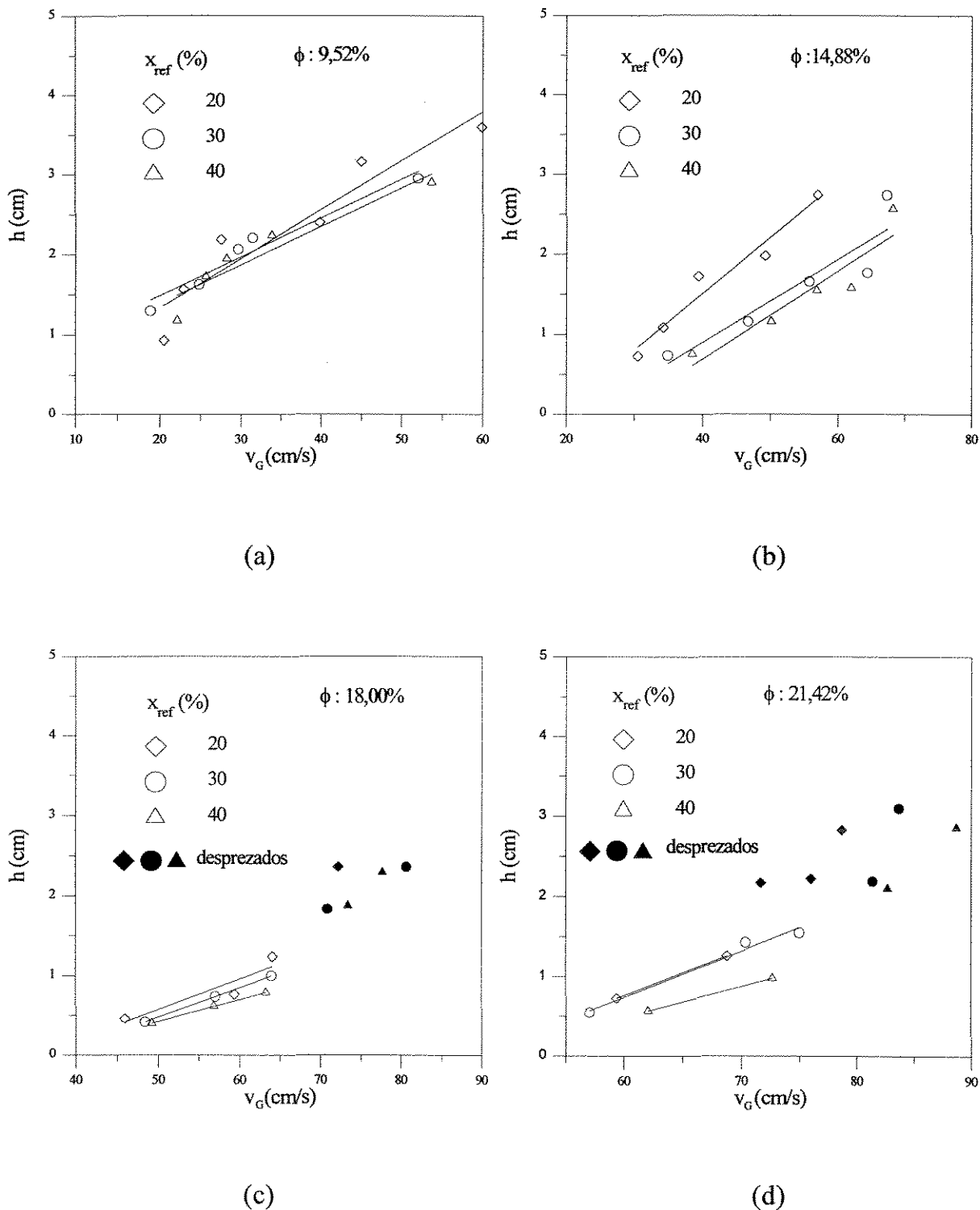


Figura 4.3.2 : Influência da velocidade superficial do vapor na altura de líquido retido para o sistema água-butanol. ϕ (%) : (a) 9,52; (b) 14,88; (c) 18,00; (d) 21,42 (pontos negros desprezados devido ao efeito do acúmulo de líquido no mecanismo de medição).

Analisando-se as figuras 4.3.1 e 4.3.2, verifica-se que a altura de líquido retido aumenta com o aumento da velocidade do vapor. Este comportamento é observado em todas as áreas livres utilizadas para ambos os sistemas. Com o aumento da velocidade superficial do vapor, aumenta também a velocidade nos orifícios do prato, fazendo com que se torne maior a resistência à drenagem do líquido, aumentando a quantidade de líquido retido. Para ambos os sistemas observa-se que alguns pontos, a alta velocidade do gás, foram desprezados, todos com valores de líquido retido maiores que o predito pelas retas. Isto se deve a precisão da medida de altura de líquido retido que foi prejudicada principalmente devido a dois fatores :

a) as medidas foram feitas com a inclusão da quantidade de líquido que escoava através da parede do estágio e que não pertencia à dispersão;

b) foi observada a ocorrência de acúmulo de líquido nas placas circulares do mecanismo de medição (“4” da figura 3.1), e tal acúmulo também pode ter sido incluído, ou parte dele, na medida da altura de líquido retido. A freqüência deste fato aumentava a medida que se aumentava a área livre do prato, onde as taxas de vapor eram maiores.

Analisando o sistema etanol-butanol, verifica-se que a altura de líquido possui um comportamento linear com a velocidade superficial do vapor, para todas as composições iniciais no refervedor e todas as áreas livres. Nestes gráficos, não foi observada a variação de comportamento entre os regimes “Froth”, “Spray” ou de Transição.

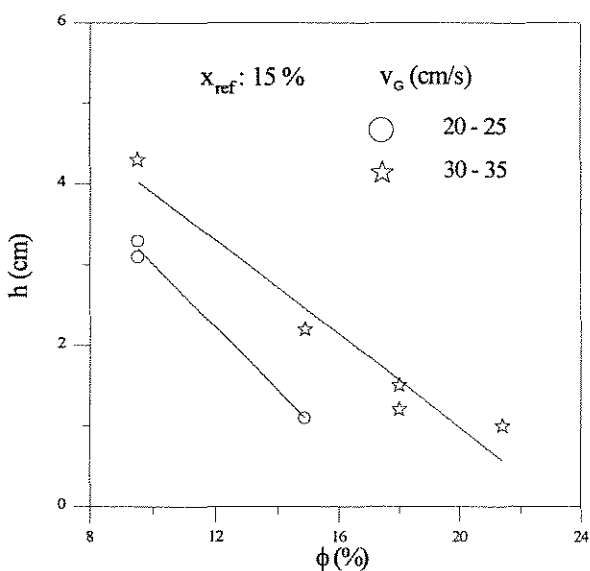
Comparando-se os gráficos de ambos os sistemas, podemos observar que o comportamento, em termos gerais, é semelhante. A diferença entre eles é que o sistema contendo água necessita de uma taxa de vapor mais elevada para entrar em operação, isto é, a faixa de operação é deslocada para a direita, para velocidades mais altas de vapor. Outra diferença observada é que o sistema etanol-butanol alcança valores de altura de líquido mais elevados que o água-butanol. No capítulo (2), da revisão da literatura, Zuiderweg e Harmens (1958) explicam que essas diferenças de comportamento ocorrem devido aos efeitos das propriedades físicas, principalmente ao gradiente de tensão superficial do líquido sobre a dispersão, que está relacionado com a capacidade de formar espuma devido a estabilidade ou não das bolhas na dispersão. O sistema água-butanol é classificado como negativo, e portanto, possui menor capacidade de formar espuma em relação ao etanol-butanol que é

identificado como neutro. Com estas informações, era de se esperar que o sistema água-butanol atingisse valores menores de altura de líquido pela não estabilidade das bolhas na dispersão, favorecendo a drenagem do líquido através dos orifícios do prato.

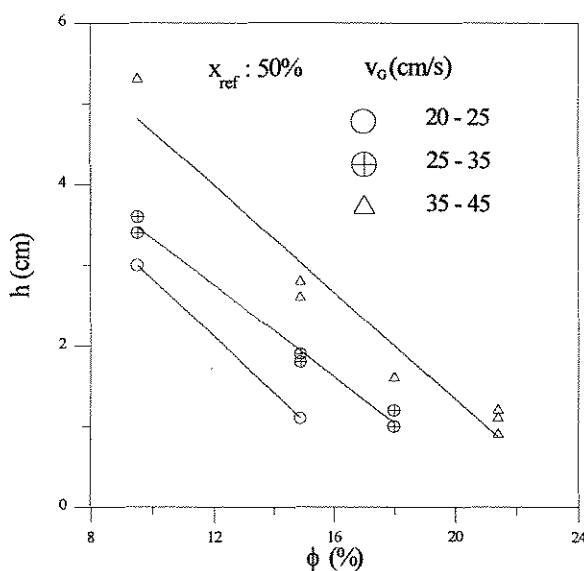
4.3.2 - Influência da Área Livre de Escoamento

A área livre do prato foi variada de 9,52 a 21,42%, através do aumento do diâmetro dos orifícios, mantendo-se o mesmo número e arranjo dos furos.

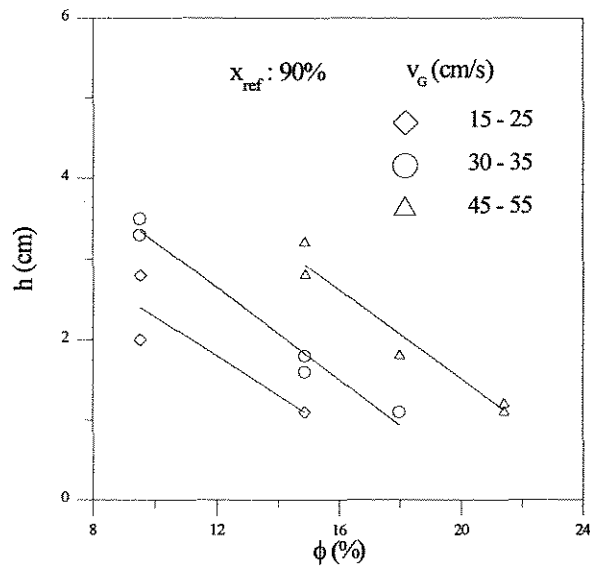
As figuras 4.3.3 (a, b, c) e 4.3.4 (a, b) mostram a influência da área livre do prato sobre a altura de líquido retido, respectivamente para os sistemas etanol-butanol e água-butanol, tendo como parâmetro a velocidade superficial do vapor para uma mesma composição inicial no refeedor.



(a)

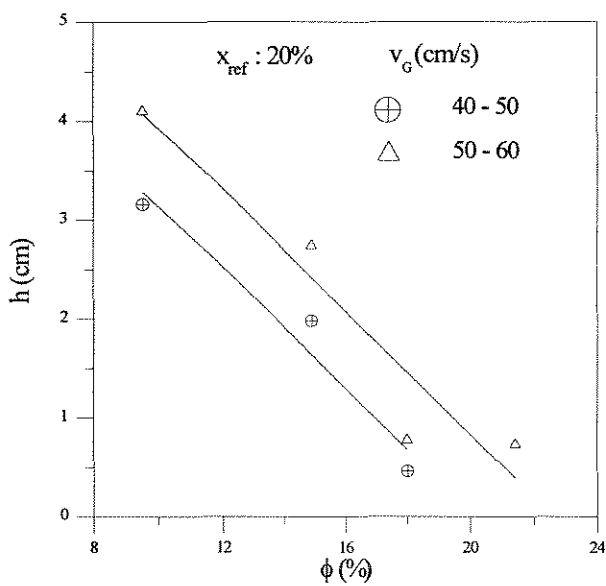


(b)

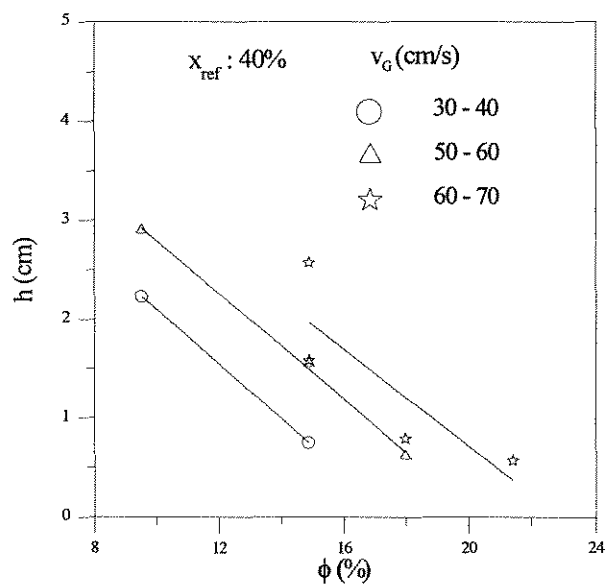


(c)

Figura 4.3.3 : Influência da área livre do prato na altura de líquido retido para o sistema etanol-butanol. x_{ref} (%) : (a) 15; (b) 50; (c) 90.



(a)



(b)

Figura 4.3.4 : Influência da área livre de escoamento do prato na altura de líquido retido para o sistema água-butanol. x_{ref} (%) : (a) 20; (b) 40.

Verifica-se através destas figuras que a altura de líquido é fortemente influenciada pela área livre, decrescendo a medida que esta cresce, para toda composição inicial no refeedor e para ambos os sistemas destilantes estudados. Assim como a velocidade do vapor, a área livre tem influência sobre a velocidade de vapor nos orifícios do prato. O aumento da área livre, mantendo constante a velocidade superficial do vapor, ocasiona uma queda na velocidade do vapor nos orifícios, facilitando o escoamento de líquido através destes e, conseqüentemente, diminuindo a quantidade de líquido sobre o prato, isto é, diminuindo a altura de líquido retido.

Observa-se que nestes gráficos, foram traçadas retas, apesar deste comportamento não poder ser garantido. No entanto, isto foi feito apenas para facilitar a visualização, pois a forte influência da velocidade superficial do vapor sobre a altura de líquido retido requisitou a existência de muitas faixas desta velocidade. Sabe-se também que esta variável não deve ser o único parâmetro a ser considerado. O efeito da velocidade superficial do líquido também deve ser incluído. No entanto, como já mencionado anteriormente, esta variável não pode ser utilizada como parâmetro neste trabalho.

4.3.3 - Influência da Composição do Líquido da Dispersão

Em nossos experimentos, foi variada a composição inicial no refeedor para cada tipo de prato utilizado e para ambos os sistemas estudados com o propósito de variar as propriedades físicas do líquido que forma a dispersão sobre o prato.

Nas tabelas 4.3.1 e 4.3.2, estão indicadas as concentrações médias do líquido da dispersão resultante de todos os ensaios de uma dada composição inicial do refeedor, bem como os valores das principais propriedades físicas para ambos os sistemas.

Através das figuras 4.3.1 (a, b, c, d) e 4.3.2 (a, b, c, d) já apresentadas, também pode ser observada a influência da composição inicial no refeedor, ou melhor da composição do líquido da dispersão, sobre a altura de líquido retido.

Observa-se através da análise destes gráficos que quanto menor a concentração inicial do componente mais volátil no refeedor, maior é a altura de líquido retido. Esta influência

seria causada por dois fatores: propriedades físicas e velocidade superficial da mistura líquida.

Tabela 4.3.1 :Propriedades médias do líquido da dispersão para sistema etanol-butanol

x_{etanol} refervedor (%)	x_{etanol} média dispersão (%)	T média equilíbrio (°C)	μ média dispersão (cp)	σ média dispersão (dina/cm)
15	56	89,1	0,51	18,4
30	75	83,9	0,50	18,6
50	87	80,9	0,49	18,6
70	94	79,4	0,48	18,5
90	98	78,6	0,47	18,5

Tabela 4.3.2 : Propriedades médias do líquido da dispersão para sistema água-butanol

$x_{\text{água}}$ refervedor (%)	$x_{\text{água}}$ média dispersão (%)	μ média dispersão (cp)	σ média dispersão (dina/cm)
20	63	0,40	20,6
30	68	0,40	21,2
40	70	0,37	21,5

No caso do sistema etanol-butanol, o gradiente de tensão superficial é praticamente nulo e a própria tensão superficial da mistura varia muito pouco, como mostra a tabela 4.3.1. Através deste resultado podemos supor que a influência das propriedades físicas está ligada à viscosidade da mistura líquida. A medida que a concentração em etanol da mistura aumenta, diminuem a viscosidade e a velocidade do líquido, causando um decréscimo na altura de líquido retido, a uma velocidade de vapor constante. Uma mistura de maior viscosidade sobre o prato causa um maior atrito de escoamento através dos orifícios, dificultando a drenagem através destes, em relação a um fluido de viscosidade menor, e portanto, causando um aumento da quantidade de líquido retido sobre o prato.

Nos experimentos realizados com o sistema água-butanol, a concentração molar inicial em água no refervedor foi variada de 20 a 40%, provocando uma variação na concentração do líquido sobre o prato de pouco mais de 10%, conseqüência do formato da curva de equilíbrio apresentado por este sistema, causando uma pequena variação de suas

propriedades físicas, como mostra a tabela 4.3.2 para a viscosidade média do líquido sobre o prato, a variação da tensão superficial média foi ainda menor. Portanto, o aumento da altura de líquido retido com a diminuição da concentração de água, observada na figura 4.3.2 (a, b, c, d) a uma mesma velocidade de vapor, deve-se quase que exclusivamente ao aumento da velocidade de líquido causado pela diminuição da concentração em água, visto a pequena variação das propriedades físicas da mistura.

4.4 - ALTURA DA DISPERSÃO

Assim como a altura de líquido retido, a altura da dispersão foi medida em todos os experimentos realizados variando-se a vazão de vapor, a composição inicial no refeedor e a área livre de escoamento do prato, operando em refluxo total e em regime permanente. Sua medida foi dificultada nos casos de vazões altas de vapor, devido a ocorrência de uma forte turbulência da dispersão, dificultando a leitura na escala milimétrica fixada na parede da coluna.

Para uma melhor análise da altura da dispersão, foram construídos gráficos para os sistemas estudados, etanol-butanol e água-butanol, para cada área livre de escoamento, mostrando a variação dessa altura através da influência da velocidade de vapor, tendo como parâmetro a composição inicial no refeedor, respectivamente figuras 4.4.1 (a, b) e 4.4.2 (a,b).

Observando estas figuras, verifica-se um comportamento semelhante com o obtido para a altura de líquido retido. Assim como a altura de líquido, a altura da dispersão aumenta com o aumento da velocidade de vapor nos orifícios do prato, e isto é obtido através de duas maneiras : aumentando a velocidade superficial do vapor e ou diminuindo a área livre de escoamento do prato. Este resultado mostra que a altura da dispersão está intimamente ligada com a de líquido retido.

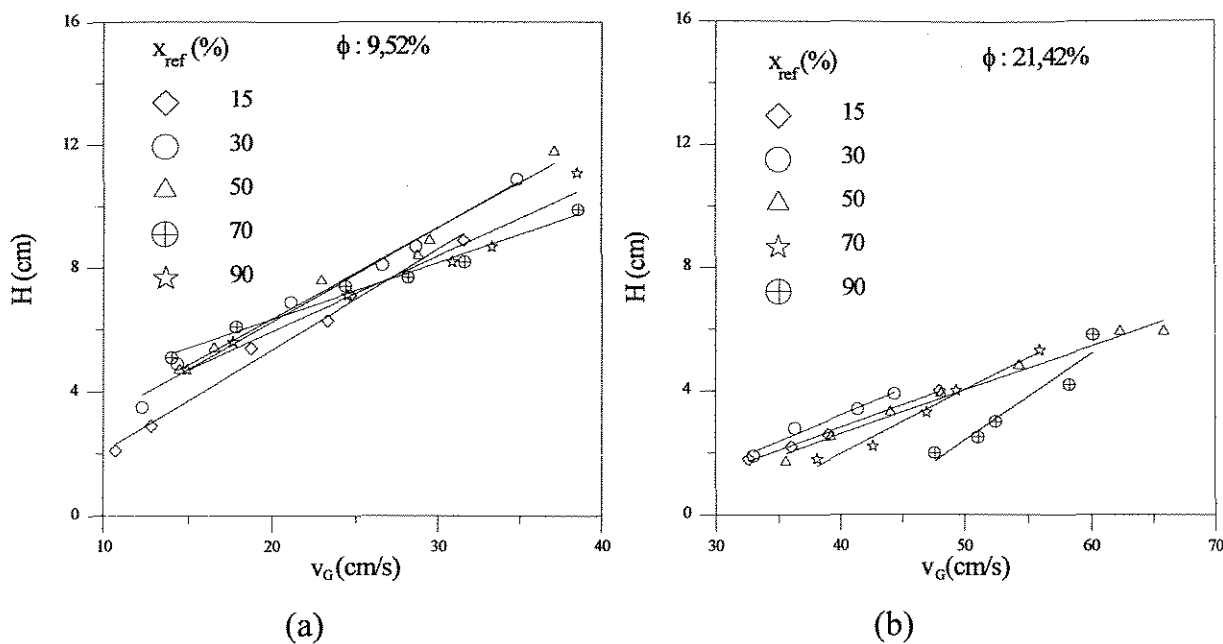


Figura 4.4.1 : Influência da velocidade superficial do vapor na altura da dispersão para o sistema etanol-butanol. ϕ (%): (a) 9,52; (b) 21,42.

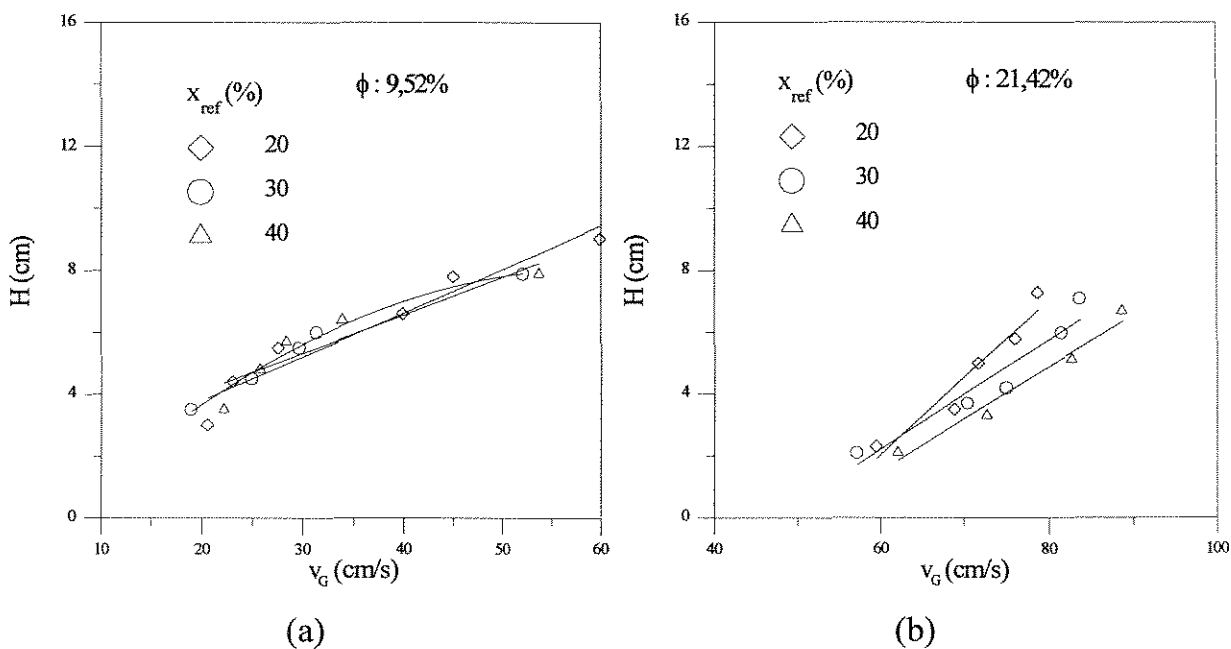


Figura 4.4.2 : Influência da velocidade superficial do vapor na altura da dispersão para o sistema água-butanol. ϕ (%): (a) 9,52; (b) 21,42.

Com relação a influência da concentração em etanol sobre a altura da dispersão, para o sistema etanol-butanol, um fato curioso é observado através dos gráficos 4.4.1 (a, b), aumentando a concentração inicial em etanol no refeedor de 15 para 30%, ocorre um aumento da altura da dispersão, para uma mesma velocidade superficial do vapor, e em seguida essa altura decresce com o aumento da concentração. Este máximo na altura da dispersão com a concentração, é encontrado em todos os sistemas destilantes, independente do tipo de sistema conforme indicam Zuideweg e Harmens (1958) e Hart e Haselden (1969). A altura é menor quanto maior for o grau de pureza da mistura líquida.

Para o caso do sistema água-butanol, o comportamento da altura da dispersão com a concentração inicial em água no refeedor é semelhante ao da altura de líquido, diminui com o aumento dessa concentração. Isto ocorre devido a queda da velocidade da mistura líquida, como já comentado no item 4.3.1, além de estarem se aproximando do azeótropo que ocorre a uma concentração de 75% e se comporta como uma substância pura. Segundo Hart e Haselden (1969) os sistemas que apresentam azeotropia, a altura da dispersão apresenta dois máximos com a concentração; um antes e um depois da azeotropia.

4.5 - "HOLD-UP" DE LÍQUIDO

No presente trabalho, o "hold-up" líquido foi definido como sendo a relação entre as alturas de líquido retido e da dispersão :

$$\alpha = \frac{h}{H} \quad (4.1)$$

onde : α = "hold-up" líquido;

h = altura de líquido retido sobre o prato [cm];

H = altura da dispersão [cm].

As figuras 4.5.1 (a, b, c, d) e 4.5.2 (a, b, c, d) mostram a influência da velocidade superficial do vapor no “hold-up” líquido para diferentes composições iniciais no refeedor respectivamente para o sistema etanol-butanol e água-butanol.

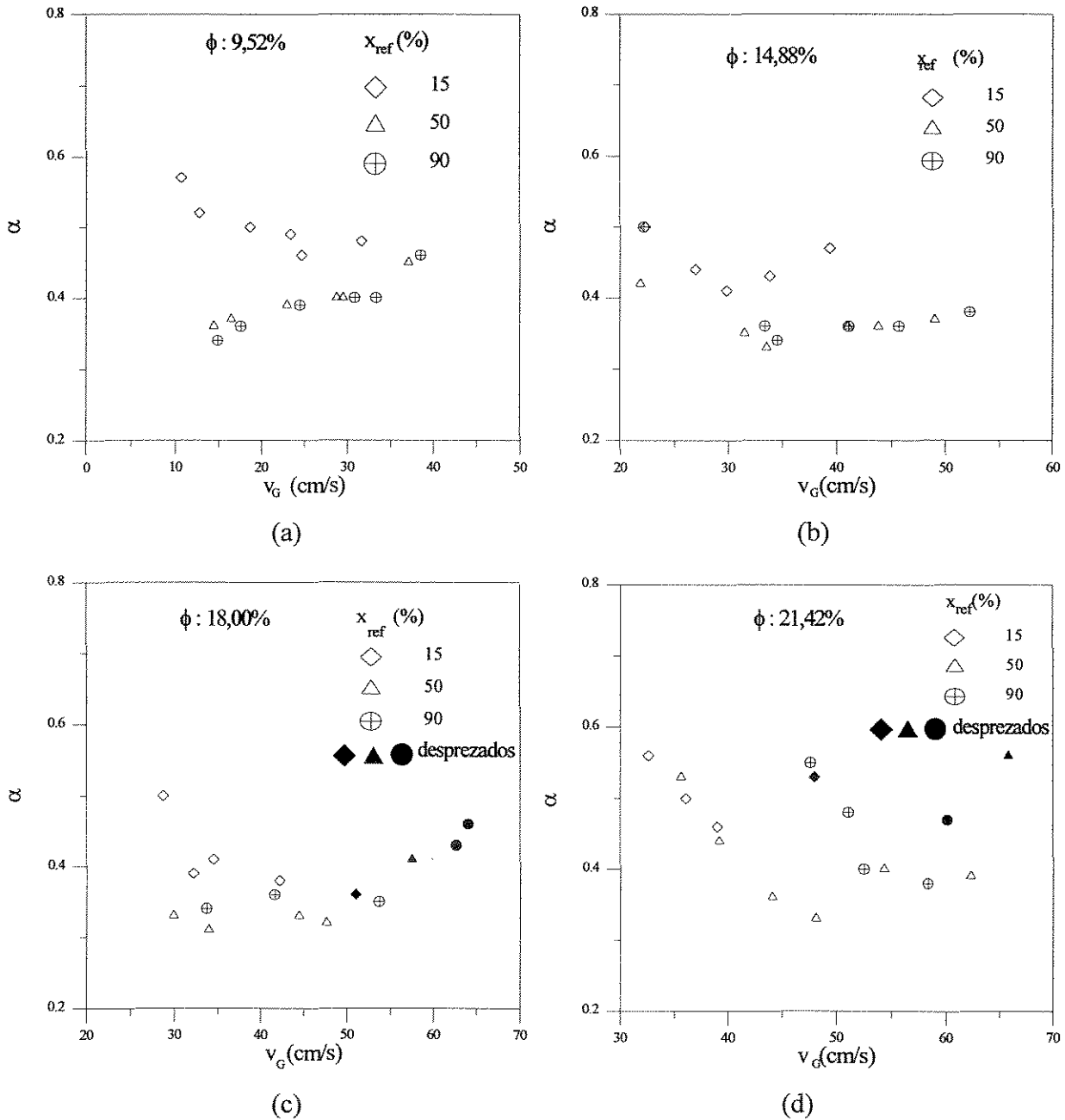


Figura 4.5.1 : Influência da velocidade superficial do vapor no “hold-up” de líquido para o sistema etanol-butanol. ϕ (%): (a) 9,52; (b) 14,88; (c) 18,00; (d) 21,42 (pontos negros desprezados devido ao efeito do acúmulo de líquido no mecanismo de medição).

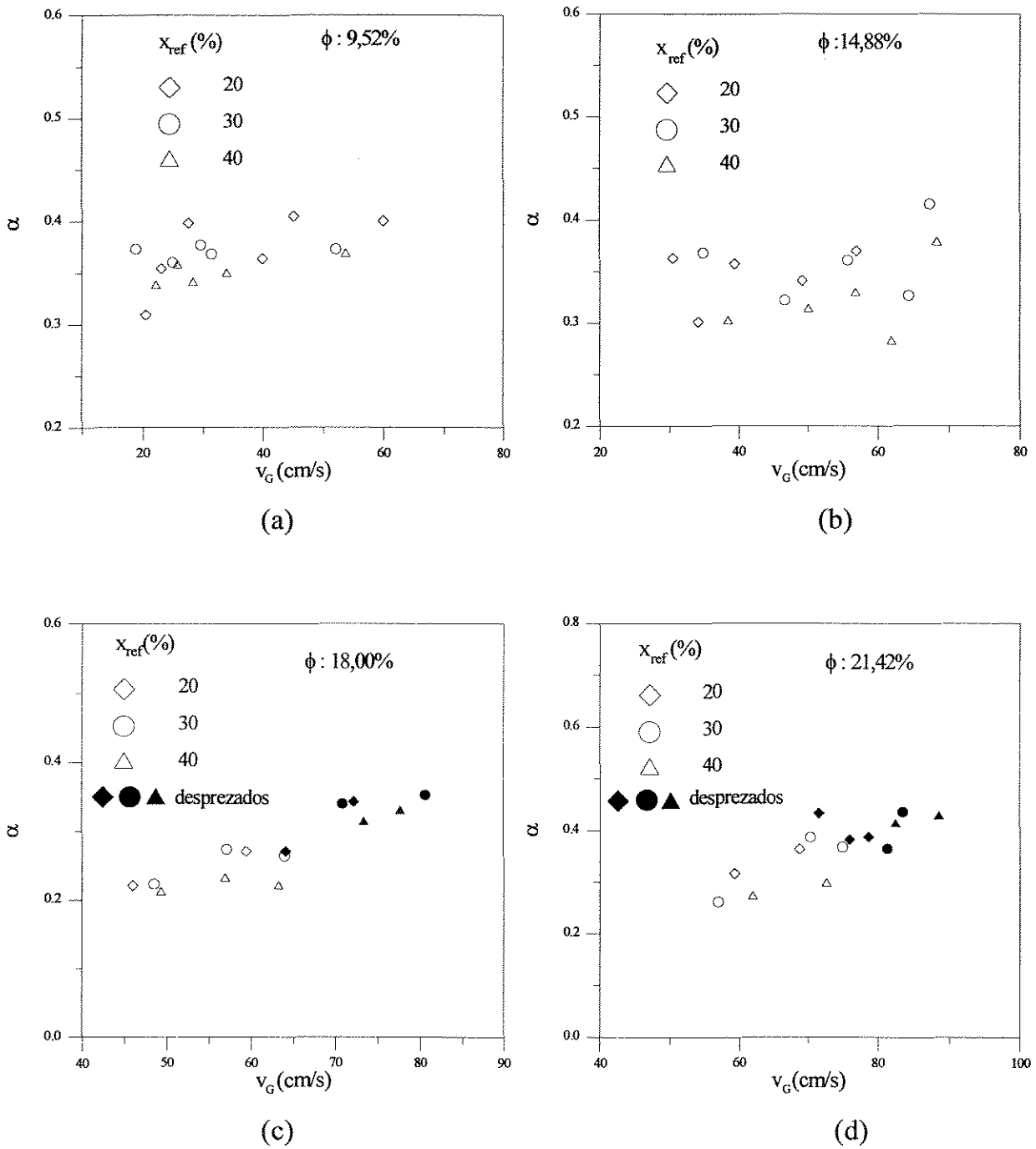


Figura 4.5.2 : Influência da velocidade superficial do vapor no “hold-up” de líquido para o sistema água-butanol. ϕ (%): (a) 9,52; (b) 14,88; (c) 18,00; (d) 21,42 (pontos negros desprezados devido ao efeito do acúmulo de líquido no mecanismo de medição).

Para o sistema etanol-butanol observa-se que na maioria dos casos, o “hold-up” líquido tem valores mais elevados próximos ao limite inferior de operação, devido a

ocorrência de dispersões do tipo “Spray” e Transição, ou até mesmo um “Froth” pouco desenvolvido. Para o prato de 9,52% de área livre, isso não ocorreu, com exceção da curva de 15% de composição inicial de etanol no refulvedor, uma vez que a operação teve início com a formação de um “Froth” já bem desenvolvido. Este resultado confirma as diferenças entre as características do “Spray” observado em nossos experimentos e do descrito na revisão da literatura, em que a quantidade de líquido na dispersão é bastante reduzida em relação a de vapor.

Aumentando a velocidade de vapor, o “hold-up” líquido chega a um valor mínimo, isto é, num ponto de máxima porosidade da dispersão, e a partir deste ponto verifica-se um leve crescimento do “hold-up” líquido com a velocidade do vapor. E essa pequena variação se torna cada vez menor com o aumento da área livre de escoamento ou até mesmo inexistente, como é o caso do prato de 18,00% (ignorando os pontos que sofreram influência do acúmulo de líquido no sistema de medição).

Observando-se os gráficos do sistema água-butanol, figura 4.5.2, não é possível distinguir os diferentes tipos de dispersão formados e nem tão pouco é observada uma significativa variação do “hold-up” com a velocidade superficial do vapor. Mais uma vez, isto pode ser explicado pela não estabilidade deste sistema em formar bolhas, acarretando pouquíssima influência da velocidade do vapor na dimensão das bolhas, já reduzidas em relação a sistemas positivos e neutros, causando pouca influência no “hold-up” líquido.

De um modo geral, é observado que o “hold-up” líquido decresce com o aumento da concentração inicial em etanol no refulvedor, para uma velocidade de vapor constante. Essa variação foi causada pelo efeito das propriedades físicas e velocidade da mistura líquida, no caso do sistema etanol-butanol, e para o caso do sistema água-butanol, principalmente pelo efeito da velocidade de líquido.

Como já foi citado, o aumento do “hold-up” líquido no limite superior de operação observado nos pratos de 18,00 e 21,42% de área livre, pode ter sido causado pelo problema de acúmulo de líquido no sistema de medição, uma vez que este fato mascarou a medida de altura de líquido retido. Portanto, nestas situações, o “hold-up” líquido tem seus valores elevados.

4.6 - FAIXA DE OPERAÇÃO

O limite mínimo de operação é o ponto onde se tem início a retenção de líquido sobre o prato, pela ação das vazões mínimas de operação do vapor e do líquido. O limite máximo de operação é determinado pela máxima vazão, antes da ocorrência da inundação da coluna. A faixa de operação de uma coluna consiste desde o limite mínimo até o de máxima operação. As figuras 4.6.1 e 4.6.2 mostram a máxima e a mínima velocidade de vapor que foram possíveis operar, em função da área livre de escoamento do prato, para os dois sistemas destilantes estudados. Em ambos os sistemas é observado que um aumento na área livre do prato ocasiona um aumento das velocidades limites do vapor, mantendo praticamente a mesma extensão da faixa. Como já foi comentado em itens anteriores, aumentando a área livre, dificulta a retenção de líquido sobre o prato devido a uma maior facilidade de drenagem do líquido através dos orifícios e, portanto, a coluna necessita de uma taxa de vapor mais elevada para entrar em operação.

Comparando-se os dois sistemas, o sistema água-butanol opera em uma faixa mais elevada de velocidade de vapor. Essa necessidade de maiores vazões pode estar ligada à instabilidade deste sistema na formação da dispersão líquido-vapor, favorecendo a drenagem da mistura líquida.

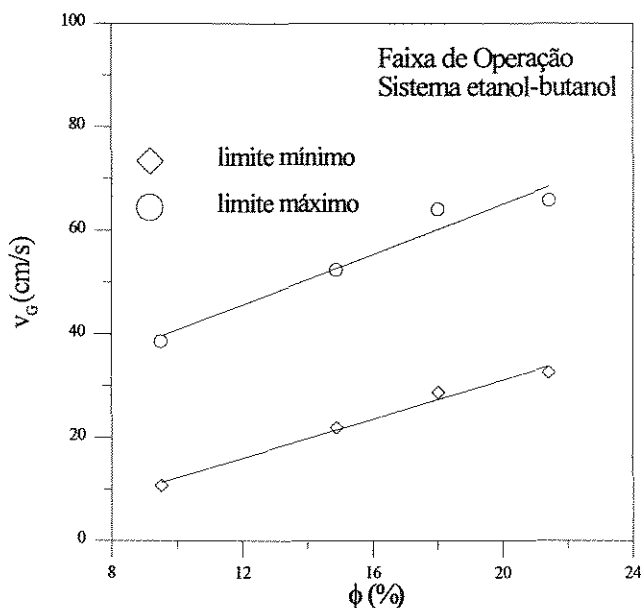


Figura 4.6.1 : Faixa de operação da coluna em função da área livre de escoamento do prato, para o sistema água-butanol.

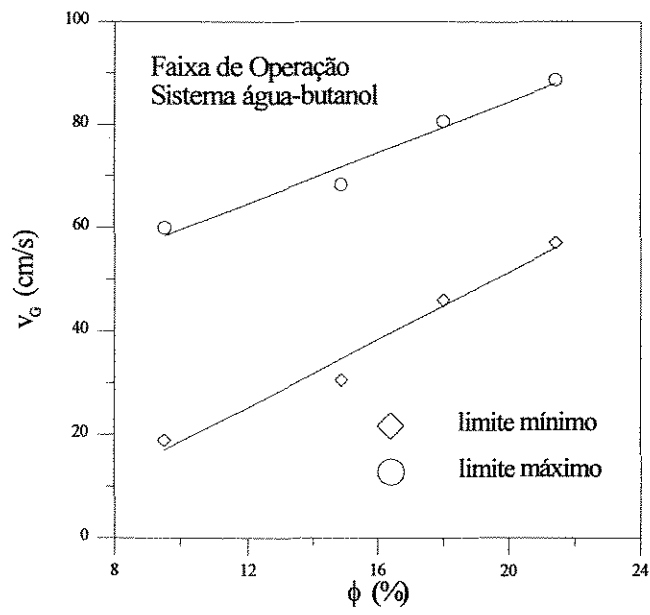


Figura 4.6.2 : Faixa de operação da coluna em função da área livre de escoamento do prato, para o sistema etanol-butanol.

CAPÍTULO 5

ANÁLISE NUMÉRICA DOS DADOS

5.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentadas correlações empíricas para o cálculo das alturas de líquido retido e da dispersão, obtidas através de análise dimensional com base nos dados experimentais obtidos no presente trabalho, para os sistemas etanol-butanol e água-butanol. Assim, poderemos prever o comportamento da altura de líquido retido e da dispersão em pratos perfurados sem vertedor, em função dos parâmetros que as influenciam, as vazões e propriedades físicas das fases líquida e vapor e os parâmetros geométricos dos pratos utilizados.

5.2 - ALTURA DE LÍQUIDO RETIDO

Na literatura existem correlações para prever a altura de líquido retido em pratos perfurados sem vertedor, tais como, as propostas por : Takahashi e Tanaka (1971), Mahendru e Hackl (1979) e Cruz (1983), respectivamente as equações 2.2, 2.11 e 2.12. No entanto, é importante destacar que estas correlações foram obtidas através de modelos hidráulicos à temperatura ambiente.

Não é possível calcular a altura de líquido retido através da equação obtida por Takahashi e Tanaka (1971) para os sistemas estudados neste trabalho, em condições destilantes, uma vez que não é possível predizer τ , razão entre a área dos furos ocupada pela drenagem do líquido e a área total dos furos do prato. Os valores de τ calculados pelo modelo proposto por estes autores, equação 2.10, pertencem à faixa de zero a um, no entanto, para os sistemas estudados no presente trabalho, ultrapassam a unidade.

Mahendru e Hackl (1979) obtiveram uma correlação empírica, equação 2.11, para o cálculo da altura de líquido. Esta equação é uma função da vazão de líquido, velocidade do gás, das densidades das fases e dos parâmetros geométricos do prato (espessura, diâmetro dos orifícios e área livre de escoamento). Os autores declaram que a equação 2.11 é limitada a sistemas pouco ou não espumantes. Esta equação foi aplicada aos nossos resultados

experimentais, uma vez que os sistemas aqui estudados são classificados como neutro (etanol-butanol) e negativo (água-butanol) e não favorecem a formação de espuma. A utilização desta equação para predizer a altura de líquido retido fornece um erro médio de aproximadamente 60% em relação aos valores obtidos experimentalmente.

Cruz (1983) propõe a equação 2.12 para o cálculo da altura de líquido em função da vazão de líquido, velocidade do gás, propriedades físicas do líquido (densidade, viscosidade e tensão superficial), massa específica do gás, geometria do prato (diâmetro dos orifícios, espessura e área livre de escoamento do prato) e diâmetro da coluna. Esta equação é obtida com base em dados experimentais realizados com os sistemas água-ar e solução aquosa de etanol-ar e, portanto, válida para sistemas espumantes ou não. A aplicação desta equação aos resultados experimentais do presente trabalho com os sistemas etanol-butanol e água-butanol resulta em um erro médio de 35%. Esta equação fornece um melhor resultado em comparação ao obtido pela equação 2.11, pois aquela, diferente desta, considera a influência da tensão superficial e viscosidade do líquido, e é válida também para sistemas espumantes.

No presente trabalho, a altura de líquido retido é considerada uma função das seguintes variáveis :

v_G : velocidade superficial do vapor [cm/s];

v_L : velocidade superficial do líquido [cm/s];

ρ_G : massa específica do vapor [g/cm³];

ρ_L : massa específica do líquido [g/cm³];

μ_G : viscosidade do vapor [p];

μ_L : viscosidade do líquido [p];

σ : tensão superficial do líquido [dina/cm];

ϕ : área livre de escoamento do prato;

d : diâmetro dos orifícios do prato [cm];

g : aceleração da gravidade [cm/s²].

As correlações empíricas são obtidas através da técnica da análise dimensional. Esta técnica utiliza grupos adimensionais formados pelas variáveis que influenciam o parâmetro a ser correlacionado. Para a obtenção dos grupos adimensionais, é utilizado o Teorema Pi de Buckingham. Os grupos adimensionais obtidos são:

$$\frac{v_G}{v_L} ; \frac{\mu_G}{\mu_L} ; \frac{h}{d} ; \frac{\rho_G v_G d}{\mu_L} ; \frac{\rho_l v_G d}{\mu_l} ; \frac{\sigma}{\mu_L v_G} ; \frac{d g}{v_G^2} ; \phi \quad (5.1)$$

Através de um rearranjo entre esses grupos, obtemos :

$$\pi_1 = \frac{h}{d} \quad (5.2)$$

Grupo adimensional que possui o parâmetro a ser correlacionado, no caso, a altura de líquido retido.

$$\pi_2 = \phi \quad (5.3)$$

Este grupo representa a área livre de escoamento do prato, isto é, a razão entre a área total dos orifícios e a área da seção transversal da coluna. No capítulo anterior é verificada uma forte influência deste parâmetro na altura de líquido retido.

$$\pi_3 = \frac{g d}{v_G^2} = \frac{1}{Fr} \quad (5.4)$$

Este grupo representa o inverso do número de Froude, que relaciona as forças inerciais e as gravitacionais.

$$\pi_4 = \frac{\sigma}{\mu_L v_G} \quad (5.5)$$

Este grupo adimensional representa a influência das propriedades físicas do líquido. Foi utilizado por vários autores: Cruz (1983), Gimenes (1986) e Reinehr (1987).

$$\pi_5 = \frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} = Re_G \quad (5.6)$$

Este é o grupo adimensional que representa a relação entre as forças inerciais e as viscosas (de atrito) envolvidas no escoamento do vapor, denominado de número de Reynolds.

$$\pi_6 = \frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} = Re_L \quad (5.7)$$

Este é o grupo que representa o número de Reynolds para a fase líquida.

A correlação empírica genérica pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{h}{d} = w_1 \phi^{w_2} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{w_3} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{w_4} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{w_5} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{w_6} \quad (5.8)$$

Para o cálculo dos coeficientes da correlação é utilizado o método de otimização dos mínimos quadrados, apresentado no Apêndice F.

5.2.1 - Sistema Etanol-Butanol

Aplicando-se o método dos mínimos quadrados aos dados experimentais obtidos para o sistema etanol-butanol, os seguintes valores de coeficientes de correlação são obtidos :

$$w_1 = 2,697.10^3 ; w_2 = -2,126 ; w_3 = -0,01337 ;$$

$$w_4 = -1,977 ; w_5 = -0,03730 ; w_6 = -0,6612.$$

Substituindo-se esses valores na equação (5.8) temos :

$$\frac{h}{d} = 2,697.10^3 \phi^{-2,126} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{-0,01337} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-1,977} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{-0,03730} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{-0,6612} \quad (5.9)$$

Através da análise destes coeficientes, verifica-se que os grupos que representam a área livre de escoamento do prato, as propriedades físicas do líquido e o número de Reynolds da fase líquida são aqueles que exercem maior influência na altura de líquido retido. Os grupos que exercem pouca influência são os π_3 e π_5 , o inverso do número de Froude e o número de Reynolds da fase vapor respectivamente.

A aplicação da equação 5.9 aos resultados experimentais do sistema etanol-butanol fornece um erro médio de 9,3%. A exclusão do grupo π_3 desta equação não altera o erro médio, mas com a exclusão do grupo π_5 , o erro médio aumenta para 25,6%. Portanto, através destas observações, a equação 5.9 pode ser escrita da seguinte forma :

$$\frac{h}{d} = 2,697.10^3 \phi^{-2,126} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-1,977} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{-0,03730} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{-0,6612} \quad (5.9a)$$

A figura 5.1 mostra a comparação entre os valores de h/d obtidos experimentalmente e os calculados através da equação 5.9a. Observa-se que mais de 95% dos valores calculados estão contidos na faixa de erro de 20% quando comparados aos valores experimentais.

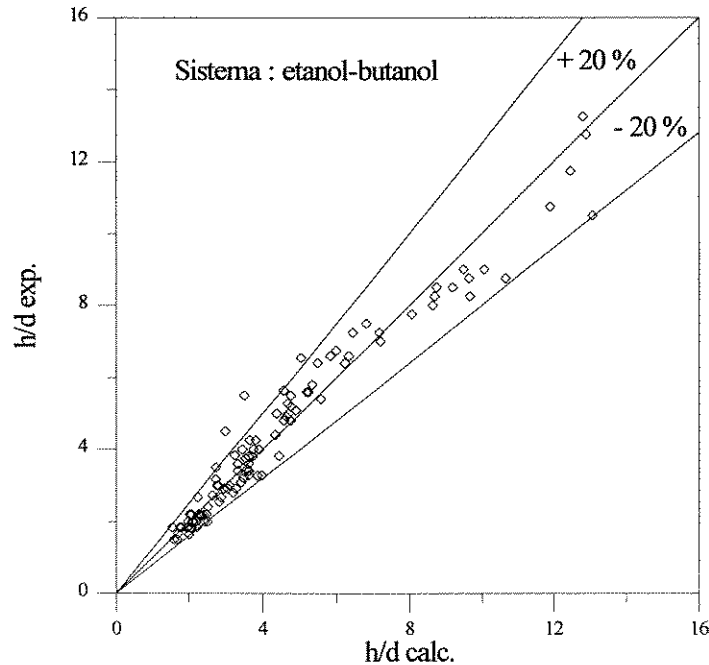


Figura 5.1

5.2.2 - Sistema Água-Butanol

Através do mesmo procedimento para a obtenção de uma correlação empírica realizada para o sistema etanol-butanol, com o propósito de prever tal parâmetro, os seguintes coeficientes de correlação são obtidos para o água-butanol.

$$w_1 = 1,062 \cdot 10^{16} ; w_2 = -0,7756 ; w_3 = -0,9138 ;$$

$$w_4 = -2,860 ; w_5 = -5,213 ; w_6 = 1,847.$$

Substituindo-se estes coeficientes na equação 5.8 temos :

$$\frac{h}{d} = 1,062 \cdot 10^{16} \phi^{-0,7756} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{-0,9138} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-2,860} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{-5,213} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{1,847} \quad (5.10)$$

A aplicação desta equação 5.10 nos dados experimentais obtidos para o sistema água-butanol, fornece um erro médio de 18,6%. A eliminação de qualquer grupo adimensional da equação 5.10 causa um aumento do erro médio para 69,5% no mínimo.

Através da figura 5.2 é feita a comparação entre h/d obtidos experimentalmente e os calculados pela equação 5.10. Verifica-se que 72% dos pontos estão localizados em uma faixa de erro de 25%.

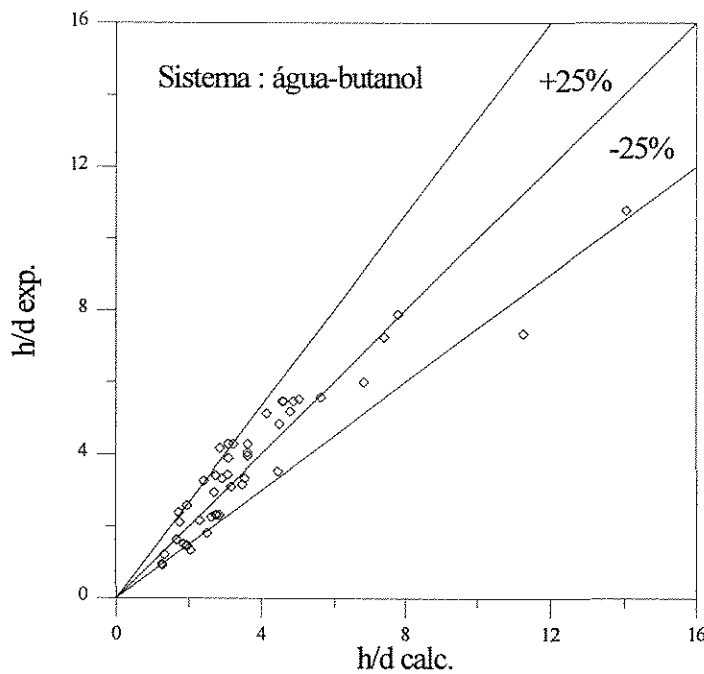


Figura 5.2

5.2.3 - Sistemas Etanol-Butanol e Água-Butanol

Aplicando-se o método dos mínimos quadrados aos dados experimentais obtidos para os sistemas etanol-butanol e água-butanol, os seguintes valores de coeficientes de correlação são fornecidos :

$$w_1 = 37,14 ; w_2 = -3,260 ; w_3 = 0,6659 ;$$

$$w_4 = -1,894 ; w_5 = -0,05392 ; w_6 = 0,7875.$$

Através do conhecimento dos valores dos coeficientes e da equação 5.8, a seguinte equação válida para ambos os sistemas destilantes é obtida :

$$\frac{h}{d} = 37,14 \phi^{-3,260} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{0,6659} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-1,894} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{-0,05392} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{0,7875} \quad (5.11)$$

A eliminação de qualquer grupo causaria um aumento do erro médio de 13 para pelo menos 28% pela aplicação da equação 5.11 aos dados experimentais.

A figura 5.3 mostra a comparação entre os dados experimentais de ambos os sistemas destilantes e os obtidos pela aplicação da equação 5.11. Verifica-se que 80% dos pontos apresentam um erro dentro da faixa de 20%.

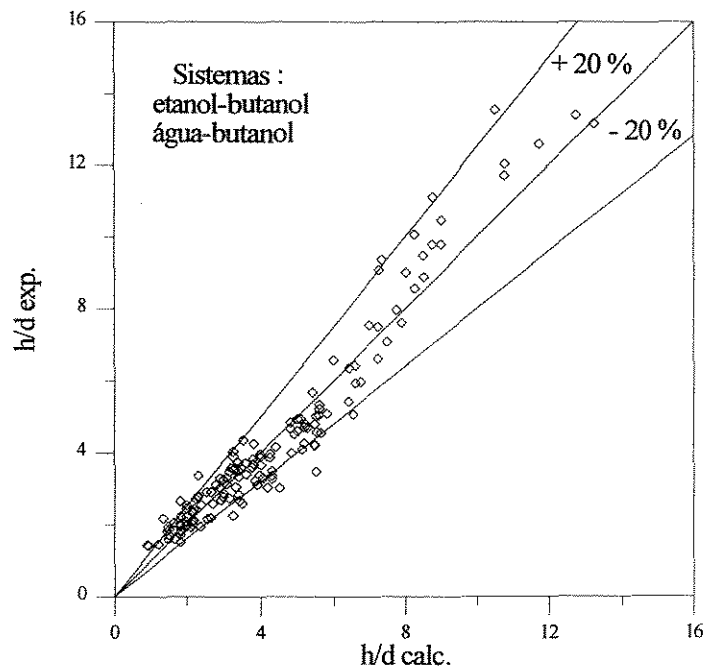


Figura 5.3

5.3 - ALTURA DA DISPERSÃO

Aplicamos duas equações, propostas na literatura, para prever a altura da dispersão em pratos perfurados sem vertedor : Cruz (1983) para sistemas espumantes ou não e Ravagnani (1989).

Cruz (83) propôs correlações para prever a altura de líquido, equação 2.12, e o “hold-up” de gás, equação 2.21, e através da equação 2.19 obtém-se a altura da dispersão e, aplicando-se a todos os dados experimentais obtidos no presente trabalho, resulta em um erro médio de 60% em comparação aos valores de altura da dispersão medidos experimentalmente.

Ravagnani (1989) propõe a equação 2.16 para a predição da altura da dispersão para o sistema etanol-butanol. A parte experimental foi realizada em uma coluna com pratos perfurados sem vertedor. A aplicação desta equação aos dados experimentais obtidos para o sistema etanol-butanol, no presente trabalho, resulta em um erro médio de 31% em comparação aos medidos experimentalmente, enquanto que a autora obteve erro médio

próximo de 20%. Esta diferença se deve à correlação proposta ser válida até a área livre de 40%. Desta forma, neste item, apenas os dados de água-butanol serão correlacionados, uma vez que a correlação proposta por Ravagnani (1989), equação 2.17 para sistemas negativos, é válida apenas para área livre de 10%.

As correlações empíricas para a predição da altura de líquido retido são obtidas através do mesmo procedimento realizado para a altura de líquido retido. Foram utilizados os mesmos grupos adimensionais obtidos para a obtenção da correlação da altura de líquido retido, uma vez que as variáveis que influenciam a altura de líquido são as mesmas que influenciam a da dispersão. Portanto, a correlação empírica genérica pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{H}{d} = w_1 \phi^{w_2} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{w_3} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{w_4} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{w_5} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{w_6} \quad (5.12)$$

Novamente utilizamos o método de otimização dos mínimos quadrados para o cálculo dos coeficientes da correlação. Para o sistema água-butanol, os seguintes valores de coeficientes são obtidos:

$$w_1 = 1,170.10^{14} ; w_2 = 0,4293 ; w_3 = -1,936 ; \\ w_4 = -1,455 ; w_5 = -5,004 ; w_6 = 1,067.$$

A equação 5.12 passa a ser escrita da seguinte forma para o sistema água-butanol:

$$\frac{H}{d} = 1,170.10^{14} \phi^{0,4293} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{-1,936} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-1,455} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{-5,004} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{1,067} \quad (5.13)$$

A eliminação de qualquer grupo adimensional provoca um aumento considerável no erro médio de 20 para 70%, no mínimo, quando comparados os valores calculados aos experimentais.

Para a obtenção de uma equação válida para ambos os sistemas (etanol-butanol e água-butanol), os seguintes valores de coeficientes são calculados:

$$w_1 = 7,450 ; w_2 = -3,033 ; w_3 = 0,3697 ;$$

$$w_4 = -1,359 ; w_5 = -0,0019 ; w_6 = 0,71456.$$

A equação 5.12 passa a ser escrita da seguinte forma :

$$\frac{H}{d} = 7,450 \phi^{-3,033} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{0,3697} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-1,359} \left[\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right]^{0,0019} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{0,7146} \quad (5.14)$$

Verifica-se que a eliminação do grupo adimensional π_5 não altera o erro médio obtido em comparação aos valores experimentais medidos, permanecendo igual a 15%. A equação 5.14 pode, então, ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{H}{d} = 7,450 \phi^{-3,033} \left[\frac{g d}{v_G^2} \right]^{0,3697} \left[\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right]^{-1,359} \left[\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right]^{0,7146} \quad (5.14a)$$

A eliminação de qualquer outro grupo adimensional provoca um aumento considerável no erro médio para 67%, quando comparado aos valores experimentais obtidos.

5.4 - VELOCIDADES LIMITES DO VAPOR

Para o sistema etanol-butanol, Ravagnani (1989) propõe as seguintes equações para as velocidades máxima e mínima de vapor :

$$\ln(v_{G,\max}) = 4,365 + 0,393 x - 0,102 x^2 + 0,00508 x^3 \quad (5.15)$$

e

$$\ln(v_{G,\min}) = 5,0 - 0,191 x - 0,0562 x^2 + 0,00508 x^3 \quad (5.16)$$

onde : $x = 1,0/\phi$ com $0,0989 \leq \phi \leq 0,3957$.

A utilização destas equações aos resultados obtidos no presente trabalho resulta em erros médios de 21,7% para o limite máximo e de 24,8% para o limite mínimo.

A seguir são propostas equações para prever as velocidades limites do vapor para o sistema água-butanol em função da área livre de escoamento. Estas equações são :

$$v_{G,\max} = 2,492 \phi + 34,64 \quad (5.17)$$

e

$$v_{G,\min} = 3,285 \phi - 14,29 \quad (5.18)$$

A utilização destas equações para a predição das velocidades limites resulta em erros médios de 2,5% para o limite máximo e de 7% para o limite mínimo.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

1.1 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O presente trabalho estudou o comportamento hidrodinâmico de uma coluna de pratos perfurados sem vertedor, em termos de regimes de escoamento, alturas de líquido retido e da dispersão, “hold-up” líquido e limites de operação da coluna. Dois sistemas foram utilizados, o etanol-butanol (homogêneo) e o água-butanol (heterogêneo).

O sistema água-butanol, mesmo a baixas vazões de vapor, não apresentou a formação de duas fases líquidas, e sim, uma dispersão homogênea de coloração branca. Herron, Kruelskie e Fair (1988) concluem em estudos realizados com o sistema ar-água-óleo, que a agitação provocada pelo gás produz uma mistura sobre o prato que possui um comportamento de um líquido homogêneo, e nenhum problema na espumabilidade foi observado. Os resultados experimentais observados no presente trabalho tendem a concordar com estes autores.

Com relação aos regimes de escoamento, foi observado que o regime “Froth” esteve presente em todas as áreas livres de escoamento em uma larga faixa de velocidade do vapor. Os regimes do tipo “Spray” e transição ocorreram somente nas maiores áreas livres a baixos valores de velocidades do vapor. Estes regimes foram favorecidos para os experimentos com o sistema água-butanol, devido a estabilidade de formação de gotículas em sistemas negativos.

Foi observado que tanto a altura de líquido retido quanto a da dispersão apresentaram forte influência da velocidade do vapor e da área livre de escoamento do prato. No entanto, a influência da composição da mistura líquida, isto é, das propriedades físicas sobre estas variáveis, não foi tão significativa.

Os regimes “Spray”, Transição ou até mesmo um “Froth” pouco desenvolvido apresentaram, para o sistema etanol-butanol, valores mais elevados de “hold-up” líquido. Quanto ao sistema água-butanol, não foi apresentada uma variação significativa do “hold-up” líquido com a velocidade do vapor, não permitindo a distinção dos diferentes tipos de regimes que ocorreram. Isto é explicado pela não estabilidade deste sistema em formar bolhas, causando pouca influência da velocidade do vapor na dimensão das bolhas.

O aumento da área livre de escoamento ocasionou um aumento das velocidades limites de operação do vapor, mantendo a mesma extensão da faixa. O sistema negativo, água-butanol, precisou de vazões de vapor mais elevadas, em relação ao neutro etanol-butanol, para entrar em operação.

O presente trabalho propõe equações empíricas para predizer o comportamento da altura de líquido retido, equações 5.9a, 5.10 e 5.11, e altura da dispersão, equações 5.13 e 5.14a, em função das vazões e propriedades físicas das fases vapor e líquida e parâmetros geométricos dos pratos. As equações correlacionaram bem os dados experimentais.

6.2 - SUGESTÕES

Apresentamos as seguintes sugestões, para trabalhos futuros que poderiam complementar este estudo, com o objetivo de um maior esclarecimento sobre destilação em pratos perfurados sem vertedor.

- aumentar a faixa de área livre para uma melhor avaliação desta variável nos parâmetros hidrodinâmicos, podendo ampliar a faixa de aplicabilidade das correlações;
- aumentar o diâmetro da coluna, variável esta não estudada no presente trabalho. Isto permitiria maiores vazões de líquido e a possibilidade de se operar em refluxo parcial;
- estudar sistemas multi-componentes, como por exemplo o sistema etanol-água-óleo fúsel, presente nas colunas de destilação de álcool produzido pela fermentação de cana-de-açúcar;
- estudar a eficiência de sistemas binários trifásicos para um melhor esclarecimento do seu comportamento.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BAINBRIDGE, G. S. e SAWISTOWSKI, H. Surface tension effects in sieve plate distillation column. **Chemical Engineering Science**, 19 : 992-993, 1964.
- BENNETT, D. L, AGRAWAL, R. e COOK, P.J. New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns. **AIChE Journal**, 29 (3) : 434-442, 1983.
- BROKAW, R. S. (1969) em REID e COLABORADORES, 1977.
- BUBBLE TRAY DESIGN MANUAL (1958) em HERRON e COLABORADORES, 1988.
- CERVENKA, J. e KOLAR, V. Analysis of operation of sieve plates without downcomers. **Collection Czechoslov. Chem. Commun.**, 38, 1972.
- CHAPMAN, S. e COWLING T. G (1939) em REID e COLABORADORES, 1977.
- CRUZ, S. L. Dispersões gás-líquido em pratos perfurados sem vertedor. Tese de Mestrado. UNICAMP. Campinas, 1983.
- FAIR, J. R. (1963) em HERRON e COLABORADORES, 1988.
- FISHTINE, S. H. (1963) em REID e COLABORADORES, 1977.
- GARDNER, R. G. e McLEAN, A. Y. Effect of system properties on sieve-tray froths. **I.Chem. Eng. Symposium Series**, 32 (1) : 34-43 , 1969.
- GIMENES, M. L. Estudo de uma coluna de destilação com pratos perfurados sem vertedores. Tese de Mestrado. UNICAMP. Campinas, 1986.
- GMEHLING, J. e ONKEN, U. Vapour-liquid equilibrium data collection. Dechema Chemistry Data Series, 1977.
- GOODLIFFE, A. H. (1988) em HERRON e COLABORADORES, 1988.
- HART, D. J. e HASELDEN, G. G. Influence of mixture composition on distillation plate efficiency. **Proceedings of Int. Symposium on Distillation**, 1.19-1.28, Brighton England, 1969.

- HERRON, C. C. Jr, KRUELSKIE, B. K. e FAIR, J. R. Hydrodynamics and mass transfer on three-phase distillation trays. **AIChE Journal**, 34 (8) : 1267-1274, 1988.
- HOPPE, K. e MITTELSTRASS, M. (1967) em RYLEK e STANDART, 1964.
- JASPER, J. J. The surface tension of pure liquid compounds. **J. Phys. Chem. Ref. Data**, 4 (1), 1972.
- KREIS, H., RAAB, M. Industrial application of sieve trays with hole diameters from 1 to 25mm with and without downcomers. **I. Chem. Eng. Symposium Series**, 56 : 3.2/63-3.2/83, 1979.
- LOCKETT, M. J. Distillation trays fundamentals. Cambridge University Press. Cambridge, 1986.
- MACLEOD, D. B. (1923) em REID e COLABORADORES, 1977.
- MAHENDRU, H. L., HACKL, A. Contribution to the design of sieve trays without downcomers. **I. Chem. Eng. Symposium Series**, 56 : 3.2/35-3.2/45, 1979.
- MOLOKANOV, YU. K. e COLABORADORES (1964) em MAHENDRU e HACKL, 1979.
- MÜLLER, R. L. e PRINCE, R. G. H. Characterization of two-phase flow patterns in plate columns. **I. Chem. Eng. Symposium Series**, 32 (1) : 5-16 , 1969.
- NEUFELD e COLABORADORES (1975) em REID e COLABORADORES, 1977.
- POZIN, M. E., MUKHLENOV, I. P. e TARAT, E. Y. (1957) em RYLEK e STANDART, 1964.
- PRESS, W. H. E COLABORADORES Numerical recipes - the art of scientific computing. 1ª ed., Ed. Cambridge University Press , Inland, 1986.

- RAVAGNANI, T. M. K. Características hidrodinâmicas de dispersões em sistemas positivo, negativo e neutro formadas em colunas de destilação com pratos perfurados sem vertedor. Tese de Doutorado. USP. São Paulo, 1989.
- REICHENGERG, D (1973) em REID e COLABORADORES, 1977.
- REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M. e SHERWOOD, T. K. The properties of gases and liquids. 3^a ed., Ed. McGraw Hill, USA, 1977.
- REINEHR, E. L. Desenvolvimento e estudo de uma coluna de pratos perfurados sem vertedores. Tese de Mestrado. UNICAMP. Campinas, 1987.
- ROSS, S. e NISHIOKA, G. Foaminess of binary and ternary solutions. **J. Phys. Chem.**, 79(15) : 1565-1565, 1975.
- RYLEK, M. e STANDART, G. Hydraulics of plates without downcomers and dry plate pressure drop. In: **Brit. Chem. Eng. Studies on Distillation IV**, p.1041-1053, 1964.
- RYLEK, M. e STANDART, G. The hydraulics of sieve trays. **International Chemical Engineering**, 4 (4) : 711-747, 1964.
- SCHENEWERK, W.E (1975) em HERRON e COLABORADORES, 1988.
- SHOENBORN, E. M., KOFFOLT, J. H. e WITHROW, J. R. (1941) em HERRON e COLABORADORES, 1988.
- TAKAHASHI, T. e TANAKA, M. Liquid hold-up on a perforated plate without downcomer. **Memours of the School of Engineering**, 6 (1) : 33- , 1971.
- TAMURA, M., KURATA, M. e ODANI, H. Practical method for estimating surface tensions of solutions. **Bull. Chem. Soc. Jpn.**, 28 (1) : 83-88, 1955.
- TSONOPOULOS, C. An empirical correlation of second virial coefficients. **AIChE Journal**, 20 (2) : 263-272, 1974.

VAN DEN BERG, J., (1955) em RYLEK e STANDART, 1964.

VAN VELZEN, K., CARDOZO, R. L., LANGENKAMP, H. (1972) em REID e COLABORADORES, 1977.

VARGAFTIK, N. B. Tables on the termophysical properties of liquids and gases. 2^a ed., John Wiley e Sons Inc., 1975.

WALLIS, G. B. (1969) em MÜLLER e PRINCE, 1969.

WILHOIT, R. C. e ZWOLINSKI, B. J. Physical and thermodynamic properties of aliphatic alchools. **J. Phys. Chem. Ref. Data**, (2) : 88, 1973.

WILKE, C. R. (1950) em REID e COLABORADORES, 1977.

YONG, S. (1958) em **International Critical Tables of Critical Data**, 3 : 238, New York, McGraw-Hill, 1928.

ZELINSKI, Y. G. e KAFAROV, V. V. Hydrodynamic conditions on open-grid (“turbogrid”) trays. **International Chemical Engineering**, 1 (1) : 74-79, 1961.

ZUIDERWEG, F. J. e HARMENS, A. The influence of surface phenomena on the performance of distillation columns. **Chemical Engineering Science**, 9 (2/3) : 89-108, 1958.

APÊNDICE A

DADOS EXPERIMENTAIS

A.1 - SISTEMA ETANOL-BUTANOL

Os asteriscos (*) presentes no valor da altura de líquido retido indicam forte influência do acúmulo de líquido sobre as placas circulares, já comentado no Capítulo 4.

$$\phi = 9,52 \%$$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm ³ /s)
15	0,5933	0,8936	"froth"	1,2	2,1	0,571	0,53
	0,5857	0,9057	"froth"	1,5	2,9	0,517	0,63
	0,5523	0,8875	"froth"	2,7	5,4	0,500	0,93
	0,5419	0,8774	"froth"	3,1	6,3	0,492	1,17
	0,5366	0,8774	"froth"	3,3	7,1	0,465	1,23
	0,5445	0,8896	"froth"	4,3	8,9	0,483	1,57
30	0,7693	0,9512	"froth"	1,2	3,5	0,343	0,60
	0,7671	0,9512	"froth"	1,7	4,9	0,347	0,70
	0,7426	0,9473	"froth"	2,9	6,9	0,420	1,03
	0,7381	0,9453	"froth"	3,4	8,1	0,420	1,30
	0,7381	0,9473	"froth"	3,5	8,7	0,402	1,40
	0,7381	0,9473	"froth"	4,7	10,9	0,431	1,70
50	0,8895	0,9801	"froth"	1,7	4,7	0,36	0,70
	0,8814	0,9763	"froth"	2,0	5,4	0,37	0,80
	0,8733	0,9705	"froth"	3,0	7,6	0,39	1,12
	0,8712	0,9686	"froth"	3,4	8,4	0,40	1,40
	0,8671	0,9705	"froth"	3,6	8,9	0,40	1,43
	0,8692	0,9724	"froth"	5,3	11,8	0,45	1,80
70	0,9472	0,9744	"froth"	1,6	5,1	0,31	0,68
	0,9453	0,9820	"froth"	2,2	6,1	0,36	0,87
	0,9433	0,9820	"froth"	2,9	7,4	0,39	1,18
	0,9453	0,9839	"froth"	3,2	7,7	0,42	1,36
	0,9414	0,9839	"froth"	3,6	8,2	0,44	1,53
	0,9453	0,9858	"froth"	4,2	9,9	0,42	1,87
90	0,9801	0,9647	"froth"	1,6	4,7	0,34	0,73
	0,9820	0,9647	"froth"	2,0	5,6	0,36	0,87
	0,9801	0,9705	"froth"	2,8	7,1	0,39	1,20
	0,9801	0,9801	"froth"	3,3	8,2	0,40	1,50
	0,9820	0,9839	"froth"	3,5	8,7	0,40	1,62
	0,9820	0,9858	"froth"	5,1	11,1	0,46	1,87

$$\phi = 14,88\%$$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm^3/s)
15	0,5445	0,8464	“froth”	1,1	2,2	0,50	1,13
	0,5260	0,8464	“froth”	1,4	3,2	0,44	1,37
	0,5471	0,8671	“froth”	1,7	4,1	0,41	1,50
	0,5393	0,8464	“froth”	2,2	5,1	0,43	1,72
	0,5207	0,8422	“froth”	2,9	6,2	0,47	2,00
30	0,7381	0,9276	“froth”	1,2	3,6	0,33	1,20
	0,7426	0,9296	“froth”	1,7	4,9	0,35	1,48
	0,7426	0,9296	“froth”	2,0	5,8	0,34	1,67
	0,7404	0,9276	“froth”	2,6	6,9	0,38	1,93
	0,7381	0,9335	“froth”	3,2	8,3	0,39	2,15
50	0,8650	0,9628	“froth”	1,1	2,6	0,42	1,07
	0,8712	0,9667	“froth”	1,8	5,2	0,35	1,53
	0,8712	0,9667	“froth”	1,9	5,7	0,33	1,63
	0,8671	0,9667	“froth”	2,6	7,2	0,36	2,00
	0,8671	0,9667	“froth”	2,8	7,7	0,36	2,13
	0,8620	0,9667	“froth”	3,3	8,9	0,37	2,33
70	0,9414	0,9820	“froth”	1,1	2,6	0,42	1,17
	0,9374	0,9839	“froth”	1,7	4,6	0,37	1,67
	0,9414	0,9839	“froth”	1,9	5,5	0,35	1,70
	0,9335	0,9839	“froth”	2,4	6,6	0,36	2,03
	0,9335	0,9820	“froth”	2,7	7,5	0,36	2,30
	0,9315	0,9839	“froth”	3,3	8,8	0,38	2,53
90	0,9763	0,9724	“froth”	1,1	2,2	0,50	1,08
	0,9801	0,9705	“froth”	1,6	4,4	0,36	1,63
	0,9820	0,9782	“froth”	1,8	5,3	0,34	1,68
	0,9820	0,9820	“froth”	2,4	6,7	0,36	2,00
	0,9782	0,9838	“froth”	2,8	7,8	0,36	2,22
	0,9801	0,9858	“froth”	3,2	8,5	0,38	2,53

$$\phi = 18,00\%$$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm^3/s)
15	0,5704	0,8858	“spray”	1,0	2,0	0,50	1,43
	0,5653	0,8858	transição	1,2	3,1	0,39	1,60
	0,5653	0,8858	“froth”	1,5	3,7	0,41	1,72
	0,5933	0,8896	“froth”	1,7	4,5	0,38	2,10
	0,5575	0,8896	“froth”	2,1*	5,8	0,36	2,53
30	0,7359	0,9057	“froth”	1,0	2,6	0,38	1,47
	0,7449	0,8997	“froth”	1,1	3,2	0,34	1,50
	0,7381	0,9117	“froth”	1,6	4,7	0,34	2,00
	0,7404	0,9077	“froth”	1,8	5,7	0,32	2,27
	0,7449	0,9217	“froth”	2,7	7,1	0,38	2,73
50	0,8712	0,9512	“froth”	1,0	3,0	0,38	1,47
	0,8712	0,9512	“froth”	1,2	3,9	0,34	1,67
	0,8732	0,9512	“froth”	1,6	4,9	0,34	2,18
	0,8712	0,9550	“froth”	1,9	5,9	0,32	2,33
	0,8773	0,9667	“froth”	3,1*	7,5	0,38	2,80
70	0,9414	0,9686	“froth”	0,9	2,4	0,38	1,53
	0,9414	0,9705	“froth”	1,1	3,2	0,34	1,63
	0,9414	0,9724	“froth”	1,6	4,4	0,36	2,07
	0,9414	0,9744	“froth”	1,8	5,4	0,33	2,52
	0,9414	0,9839	“froth”	2,9*	7,6	0,38	2,90
90	0,9820	0,9858	“froth”	1,1	3,2	0,34	1,63
	0,9801	0,9858	“froth”	1,4	3,9	0,36	2,02
	0,9801	0,9858	“froth”	1,8	5,1	0,35	2,60
	0,9820	0,9896	“froth”	2,8*	6,5	0,43	3,03
	0,9820	0,9896	“froth”	3,6*	7,8	0,46	3,10

$$\phi = 21,42$$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm ³ /s)
15	0,5832	0,7824	"spray"	1,0	1,8	0,56	1,72
	0,5907	0,7649	"spray"	1,1	2,2	0,50	1,92
	0,5882	0,8041	"spray"	1,2	2,6	0,46	2,03
	0,5755	0,8275	"froth"	2,1*	4,0	0,53	2,47
30	0,7605	0,8875	"spray"	1,1	1,9	0,59	1,67
	0,7582	0,8896	transição	1,1	2,8	0,39	1,83
	0,7605	0,9077	"froth"	1,3	3,4	0,38	2,07
	0,7650	0,9077	"froth"	1,6	3,9	0,41	2,22
50	0,8835	0,9335	"spray"	0,9	1,7	0,53	1,77
	0,8875	0,9453	transição	1,1	2,5	0,44	1,93
	0,8875	0,9492	"froth"	1,2	3,3	0,36	2,17
	0,8835	0,9492	"froth"	1,3	3,9	0,33	2,37
	0,8773	0,9511	"froth"	1,9	4,8	0,40	2,667
	0,8773	0,9667	"froth"	2,3	5,9	0,39	3,03
	0,8692	0,9686	"froth"	3,3*	5,9	0,56	3,20
70	0,9335	0,9628	"spray"	0,9	1,8	0,50	1,87
	0,9394	0,9531	"spray"	1,1	2,2	0,50	2,10
	0,9394	0,9628	"froth"	1,2	3,3	0,36	2,30
	0,9374	0,9628	"froth"	1,3	4,0	0,33	2,42
	0,9374	0,9667	"froth"	1,8	5,3	0,34	2,733
90	0,9782	0,9667	"spray"	1,1	2,0	0,55	2,33
	0,9801	0,9705	"spray"	1,2	2,5	0,48	2,50
	0,9801	0,9705	transição	1,2	3,0	0,40	2,57
	0,9763	0,9705	"froth"	1,6	4,2	0,38	2,85
	0,9724	0,9744	"froth"	2,7*	5,8	0,47	2,93

A.2 - SISTEMA ÁGUA-BUTANOL

$$\phi = 9,52 \%$$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm ³ /s)
20	0,6500	0,8125	“froth”	0,93	3,0	0,31	0,50
	0,6489	0,7815	“froth”	1,56	4,4	0,35	0,60
	0,6484	0,7363	“froth”	2,19	5,5	0,40	0,78
	0,6381	0,7684	“froth”	2,40	6,6	0,36	1,07
	0,6357	0,7769	“froth”	3,16	7,8	0,40	1,18
	0,6368	0,7162	“froth”	3,64	9,0	0,40	1,77
30	0,7200	0,8757	“froth”	1,30	3,5	0,37	0,53
	0,7144	0,8389	“froth”	1,62	4,5	0,36	0,72
	0,7056	0,7774	“froth”	2,07	5,5	0,38	0,87
	0,7003	0,8899	“froth”	2,21	6,0	0,37	0,90
	0,6961	0,7473	“froth”	2,95	7,9	0,37	1,60
40	0,7087	0,9059	“froth”	1,18	3,5	0,34	0,58
	0,7255	0,8350	“froth”	1,72	4,8	0,36	0,73
	0,7128	0,8065	“froth”	1,94	5,7	0,34	0,83
	0,7059	0,8956	“froth”	2,23	6,4	0,35	0,98
	0,7204	0,7189	“froth”	2,90	7,9	0,37	1,72

$$\phi = 14,88\%$$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm ³ /s)
20	0,6449	0,8142	“spray”	0,73	2,0	0,36	0,65
	0,6664	0,8099	“froth”	1,08	3,6	0,30	0,64
	0,6378	0,7622	“froth”	1,72	4,8	0,36	0,63
	0,6379	0,8077	“froth”	1,98	5,8	0,34	0,66
	0,6091	0,7450	“froth”	2,74	7,4	0,37	0,63
30	0,6899	0,7985	“spray”	0,74	2,0	0,37	1,08
	0,6799	0,8050	transição	1,16	3,6	0,32	1,40
	0,6631	0,8255	“froth”	1,66	4,6	0,36	1,67
	0,6798	0,7474	“froth”	1,77	5,4	0,33	2,00
	0,6521	0,7434	“froth”	2,74	6,6	0,41	2,08
40	0,7318	0,8181	transição	0,75	2,5	0,30	1,17
	0,7009	0,7995	“froth”	1,16	3,7	0,31	1,50
	0,7232	0,7708	“froth”	1,55	4,7	0,33	1,72
	0,7237	0,7977	“froth”	1,58	5,6	0,28	1,85
	0,7099	0,7569	“froth”	2,57	6,8	0,38	2,07

$\phi = 18,00\%$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm ³ /s)
20	0,5844	0,7204	“spray”	0,46	2,1	0,22	1,47
	0,5720	0,7556	transição	0,77	2,9	0,26	1,80
	0,6205	0,7471	“froth”	1,24*	4,6	0,27	1,95
	0,5926	0,7625	“froth”	2,36*	6,9	0,34	2,17
30	0,6619	0,7878	“spray”	0,42	1,9	0,22	1,50
	0,7099	0,7678	transição	0,74	2,7	0,27	1,77
	0,6769	0,7756	“froth”	1,00	3,8	0,26	1,97
	0,6709	0,7449	“froth”	1,83*	5,4	0,34	2,18
	0,6814	0,7603	“froth”	2,36*	6,7	0,35	2,43
40	0,6994	0,8340	“spray”	0,40	1,9	0,21	1,45
	0,7034	0,8087	transição	0,62	2,7	0,23	1,73
	0,6803	0,7528	“froth”	0,79	3,6	0,22	1,94
	0,7013	0,7535	“froth”	1,87*	6,0	0,31	2,25
	0,7018	0,7575	“froth”	2,29*	7,0	0,33	2,35

 $\phi = 21,42\%$

x_{ref} (%)	x_p	x_r	Tipo de Dispersão	h (cm)	H (cm)	α	Q_L (cm ³ /s)
20	0,6699	0,7861	“spray”	0,73	2,3	0,32	1,82
	0,6161	0,7640	“froth”	1,27	3,5	0,36	2,10
	0,2369	0,7576	“froth”	2,17*	5,0	0,43	2,20
	0,6304	0,7617	“froth”	2,22*	5,8	0,38	2,32
	0,6101	0,7514	“froth”	2,83*	7,3	0,39	2,40
30	0,6955	0,7970	“spray”	0,55	2,1	0,26	1,77
	0,6724	0,7687	transição	1,43	3,7	0,39	2,17
	0,6622	0,7553	“froth”	1,55	4,2	0,37	2,33
	0,6694	0,7491	“froth”	2,19*	6,0	0,36	2,52
	0,6727	0,7432	“froth”	3,10*	7,1	0,44	2,58
40	0,7039	0,7663	“spray”	0,57	2,1	0,27	1,85
	0,6798	0,7567	transição	0,98	3,3	0,30	2,20
	0,6938	0,7489	“froth”	2,10*	5,1	0,41	2,53
	0,6720	0,7450	“froth”	2,86*	6,7	0,43	2,73

APÊNDICE B

CÁLCULO DA FRAÇÃO MOLAR DO VAPOR

FRAÇÃO MOLAR DO VAPOR

A fração molar do vapor é obtida ajustando-se uma equação aos dados de equilíbrio, apresentados em Gmehling e Onken (1977). Os dados foram obtidos à pressão de 1 atm.

B.1 - Sistema Etanol-Butanol

A figura (B.1) mostra a curva de equilíbrio para o sistema etanol-butanol. A fração molar é referente ao etanol.

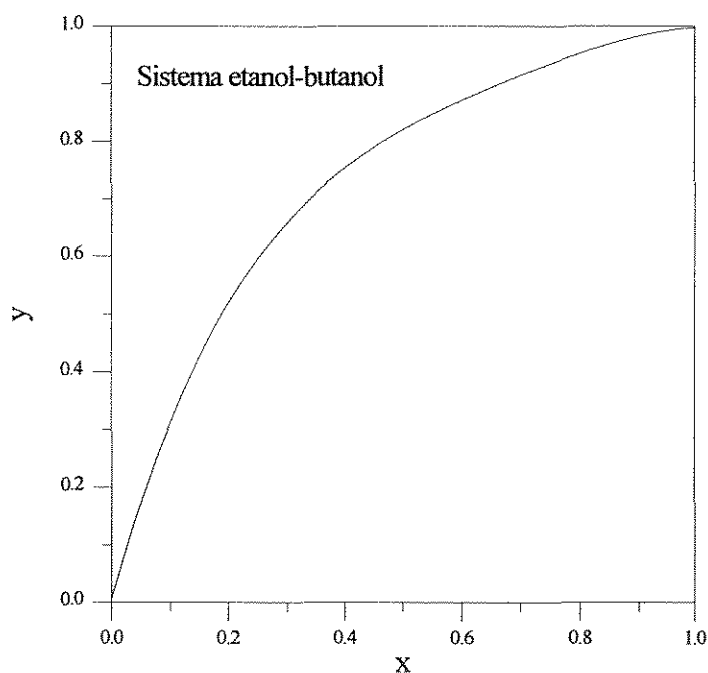


Figura B.1 : Curva xy do sistema etanol-butanol [Gmehling e Onken (1977)].

O polinômio resultante do ajuste da curva é dado por :

$$y = 0,005292 + 3,626 x - 6,384 x^2 + 5,821 x^3 - 2,071 x^4 \quad (\text{B.1})$$

Erro médio = 0,611%

Erro máximo = 1,58%.

B.2 - Sistema Água-Butanol

Para o sistema água-butanol, a fração molar do vapor é obtida em função da temperatura de equilíbrio. A figura (B.2) mostra a curva yT para os sistema água-butanol. A fração molar é referente à água.

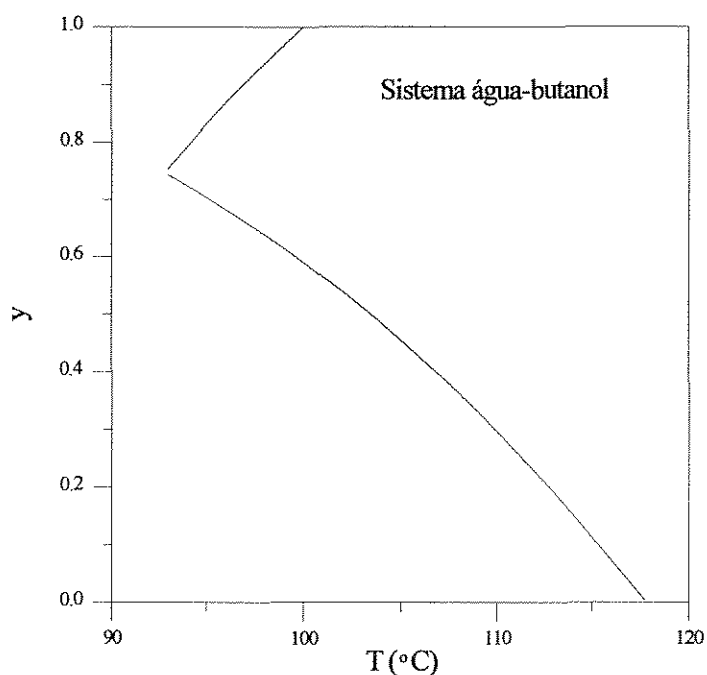


Figura B.2 : Curva yT do sistema água-butanol [Gmehling e Onken (1977)].

Os polinômios resultantes dos ajustes são :

- Para x : 0,0 - 0,976 e T : 118,0 - 92,9 °C :

$$y = -1,553 + 0,06779 T - 0,0004635 T^2 \quad (\text{B.2})$$

Erro médio : 1,26%

Erro máximo : 2,65%.

- Para $x : 0,976 - 1,0$ e $T_c : 92,9 - 100,0$ °C:

$$y = -7,129 + 0,1313 T - 0,0005006 T^2 \quad (\text{B.3})$$

Erro médio : 0,37%

Erro máximo : 1,10%.

APÊNDICE C

CÁLCULO DA TEMPERATURA DE EQUILÍBRIO

TEMPERATURA DE EQUILÍBRIO

A temperatura de equilíbrio foi obtida através do ajuste dos dados da curva de equilíbrio apresentados em Gmehling e Onken (1977).

C.1 - Sistema Etanol-Butanol

A figura C.1 mostra a curva Tx para o sistema etanol-butanol. A fração molar é referente ao etanol.

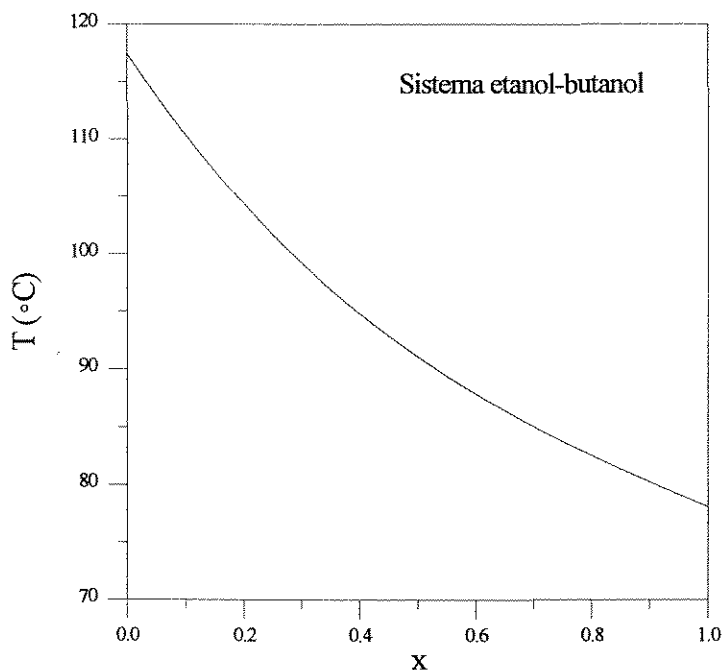


Figura C.1 : Curva Tx do sistema etanol-butanol [Gmehling e Onken (1977)].

A equação da temperatura de equilíbrio é uma função da composição da fase líquida dada por :

$$T_c = 117,481 - 75,7095 x + 55,4066 x^2 - 19,0372 x^3 \quad (C.1)$$

Erro médio = 0,10% Erro máximo = 0,21%.

C.2 - Sistema Água-Butanol

A figura C.2 mostra a curva Tx para o sistema água-butanol. A fração molar é referente à água.

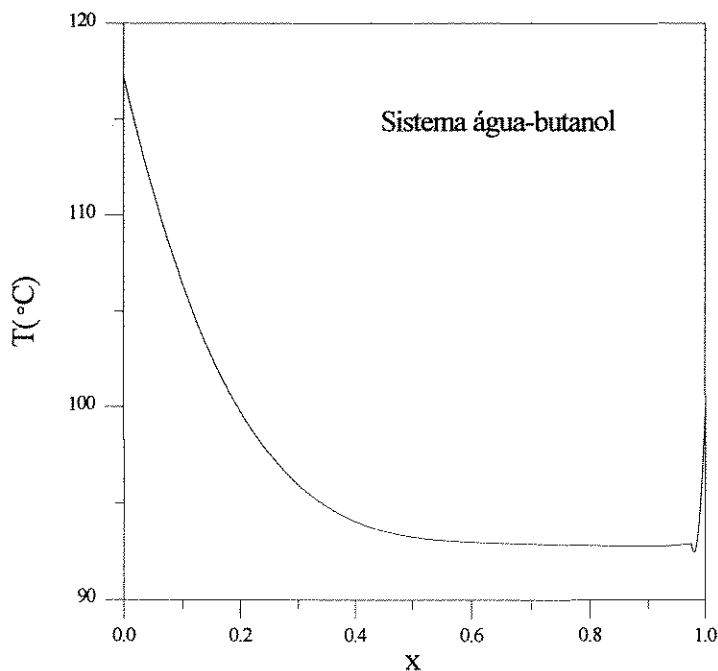


Figura C.2 : Curva Tx do sistema etanol-butanol [Gmehling e Onken (1977)].

O ajuste desta curva resulta em :

- Para x : 0,0 - 0,976 :

$$T_c = 117,3 - 132,4 x + 271,9 x^2 - 249,3 x^3 + 85,43 x^4 \tag{C.2}$$

Erro médio = 0,26%

Erro máximo = 0,77%.

- Para $x : 0,976 - 1,0 :$

$$T_c = 19614,7 - 39812,4 x + 20297,7 x^2 \quad (C.3)$$

Erro médio = 0,00%

Erro máximo = 0,00%.

APÊNDICE D

CÁLCULO DAS PROPRIEDADES FÍSICAS

PROPRIEDADES FÍSICAS

D.1 - Massa Específica dos Componentes Puros no Estado Líquido

Wilhoit e Zwolinski (1973) apresentam dados de massa específica para o butanol na faixa de 70 a 120°C. A seguinte equação polinomial é ajustada aos dados :

$$\rho_{Lb} = 0,837197 - 9,46286 \cdot 10^{-4} (T) \quad (D.1)$$

onde : ρ_{Lb} = massa específica do butanol no estado líquido [g/cm^3];

T = temperatura de equilíbrio [K].

Erro médio : 0,06%

Erro máximo : 0,09%.

A determinação da temperatura de equilíbrio dos sistemas estudados é apresentada no Apêndice C.

Yong (1958) apresentou dados de massa específica para o etanol na faixa de 78,3 a 130°C. Os dados são ajustados em uma equação polinomial dada por :

$$\rho_{Le} = 0,763756 + 0,985293 \cdot 10^{-4} (T) - 0,576627 \cdot 10^{-5} (T^2) \quad (D.2)$$

onde : ρ_{Le} = massa específica do etanol puro no estado líquido [g/cm^3].

Erro médio : 0,05%;

Erro máximo : 0,12%.

Para a predição da massa específica da água, Reid e colaboradores (1977) sugerem o método de Grain, dado por :

$$\rho_{Li} = PM_i \rho_{Lpi} \left[3 - 2 \left(T / T_{pi} \right) \right]^4 \quad (D.3)$$

onde : ρ_{Li} = massa específica do componente i puro no estado líquido [g/cm^3];

ρ_{Lpi} = $1/V_p$, massa específica do componente i no ponto de ebulição [gmol/cm^3];

T = temperatura de equilíbrio [K];

T_{pi} = temperatura no ponto de ebulição do componente i [K];

PM_i = peso molecular do componente i [g/mol];

V_{pi} = volume molar no ponto de ebulição do componente i [cm^3/gmol];

n = constante.

A tabela D.1 indica os valores da constante n sugeridos por Fishtine (1966).

Tabela D.1 : Valores da constante n [Reid e colaboradores (1977)].

Componentes	n
álcoois e água	0,25
hidrocarbonetos e éteres	0,29
outros componentes orgânicos	0,31
outros componentes inorgânicos	0,33

Para estimar o volume molar da água no ponto de ebulição, V_{pa} , utilizamos o método de Schoroeder, sugerido por Reid e colaboradores (1977). Este método consiste em contar o número de átomos de carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio, contar as duplas ligações e multiplicar esta somatória por 7. Este método obtém resultados com um erro de 3 a 4%.

Pelo método de Schoroeder obtemos :

$$V_{pa} = 21 \text{ cm}^3 / \text{gmol}$$

Valores para a água :

$$PM_a = 18,015 \text{ g/mol};$$

$$\rho_{Lpa} = 1/V_{ba} = 4,762 \cdot 10^{-2} \text{ g}/\text{cm}^3;$$

$$T_{pa} = 373,2 \text{ K}.$$

D.2 - Peso Molecular da Mistura Líquida

O cálculo do peso molecular da mistura é feito multiplicando-se o peso molecular de cada componente pela sua fração molar na mistura.

$$PM_L = x_1 PM_1 + (1 - x_1) PM_2 \quad (D.4)$$

onde : PM_L, PM_1, PM_2 = peso molecular da mistura, do componente 1 e 2;

x_1 = fração molar do componente 1.

D.3 - Massa Específica da Mistura Líquida

Considerando que a mistura líquida possui um comportamento ideal, temos que:

$$V_L = x_1 V_{L1} + (1 - x_1) V_{L2} \quad (D.5)$$

ou

$$\frac{PM}{\rho_L} = \frac{x_1 PM_1}{\rho_{L1}} + \frac{(1 - x_1) PM_2}{\rho_{L2}} \quad (D.6)$$

onde : V_L, V_{L1}, V_{L2} = volumes molares da mistura, do componente 1 e 2 no estado líquido
[cm³/gmol];

$\rho_L, \rho_{L1}, \rho_{L2}$ = massa específica da mistura , do componente 1 e 2 no estado líquido
[g/cm³].

D.4 - Tensão Superficial dos Componentes Puros

Jasper (1972) e Vargaftik (1975) apresentam dados experimentais de tensão superficial para os componentes etanol e butanol na faixa de 60 a 150°C. Os dados são ajustados por polinômios obtendo-se :

$$\sigma_b = 27,2536 - 0,093155 (T) \quad (D.7)$$

onde : σ_b = tensão superficial do butanol puro [dina/cm];

Erro médio : 0,74% Erro máximo : 1,44%.

e

$$\sigma_e = 23,7190 - 0,066571 (T) - 0,158835 \cdot 10^{-3} (T^2) \quad (D.8)$$

onde : σ_e = tensão superficial do etanol puro [dina/cm].

Erro médio : 0,26%; Erro máximo : 0,45%.

Para estimar a tensão superficial da água foi utilizada a correlação de Macleod-Sugden, apresentada por Reid e colaboradores :

$$\sigma_i = \left(\frac{[P]_i \rho_{Li}}{PM_i} \right)^4 \quad (D.9)$$

onde : σ_i = tensão superficial do componente i [dina/cm];

$[P]_i$ = parachor do componente i;

ρ_{Li} = massa específica do componente i puro no estado líquido [g/cm^3];

PM_i = peso molecular do componente i.

O parâmetro independente da temperatura [P], parachor, é estimado através da estrutura da molécula. Para a água, este parâmetro é igual a 51,0.

D.5 - Tensão Superficial da Mistura Líquida

D.5.1 - Sistema Etanol-Butanol

Reid e colaboradores (1977) sugerem a correlação de Macleod e Sugden modificada como regra de mistura :

$$\sigma^{0,25} = \frac{\rho_L}{PM_L} \left[\frac{PM_1}{\rho_{L1}} x_1 \sigma_1^{0,25} + \frac{PM_2}{\rho_{L2}} x_2 \sigma_2^{0,25} \right] \quad (D.10)$$

onde : σ = tensão superficial da mistura [dina/cm];

D.5.2 - Sistema Água-Butanol

Reid e colaboradores (1977) sugerem o método de Tamura e colaboradores (1955) para estimar a tensão superficial de misturas orgânico-aquosas binárias, através da seguinte equação :

$$\sigma^{1/4} = \psi_a^\sigma \sigma_a^{1/4} + \psi_o^\sigma \sigma_o^{1/4} \quad (D.11)$$

onde : σ_a, σ_o = tensão superficial da água e do componente orgânico puros [dina/cm];

$\psi_a^\sigma, \psi_o^\sigma$: fração volumétrica da água e do componente orgânico na camada superficial da mistura líquida.

Para obter os valores das frações volumétricas da água e do componente orgânico na camada superficial, ψ_a^σ e ψ_o^σ , é assumido que as fases superficial e central estão em equilíbrio.

$$\log \frac{(\psi_a^\sigma)^q}{\psi_o^\sigma} = \beta + \omega \quad (\text{D.12})$$

onde : q = constante que depende do tipo e tamanho do componente orgânico.

Para álcoois, $q = n^\circ$ de átomos de carbono;

$$\beta = \log \frac{\psi_a^q}{\psi_o} \quad (\text{D.13})$$

$$\omega = 0,441 \frac{q}{T} \left(\frac{\sigma_o v_o^{2/3}}{q} - \sigma_a v_a^{2/3} \right) \quad (\text{D.14})$$

ψ_a , ψ_o são frações volumétricas respectivamente da água e do componente orgânico no seio do líquido, expressados por :

$$\psi_a = \frac{x_a v_a}{x_a v_a + x_o v_o} \quad \text{e} \quad \psi_o = \frac{x_o v_o}{x_a v_a + x_o v_o} \quad (\text{D.15})$$

onde : x_a , x_o = frações molares da água e do componente orgânico puros no seio da mistura líquida;

v_a , v_o = volumes molares da água e do componente orgânico puros [cm^3/gmol];

T = temperatura de equilíbrio [K].

Para o cálculo de v_a e v_o é utilizado o método de Schoroeder, apresentado por Reid e colaboradores. Através deste método, temos :

$$v_a = 21 \text{ cm}^3/\text{gmol};$$

$$v_o = 105 \text{ cm}^3/\text{gmol} \text{ para o butanol.}$$

como :

$$\psi_a^\sigma + \psi_o^\sigma = 1 \quad \text{ou} \quad \psi_a^\sigma = 1 - \psi_o^\sigma \quad (\text{D.16})$$

substituindo na equação D.13, temos que :

$$10^{(\beta+\omega)} = \frac{(\psi_a^\sigma)^q}{1 - \psi_a^\sigma} \quad (\text{D.17})$$

Para o sistema água-butanol, a equação D.17 resulta em :

$$(\psi_a^\sigma)^4 + 10^{(\beta+\omega)} \psi_a^\sigma - 10^{(\beta+\omega)} = 0 \quad (\text{D.18})$$

A resolução desta equação é realizada através do método de Newton-Raphson utilizando derivada parcial. Esta resolução fornece o valor de ψ_a^σ e, através da equação D.16 obtemos ψ_o^σ . Através da substituição destes valores na equação D.11 obtemos a tensão superficial da mistura aquosa.

A listagem do programa Newton para o cálculo da tensão superficial da mistura líquida água-butanol é apresentada no item D.11.

D.6 - Viscosidade dos Componentes Puros no Estado Líquido

É utilizada a correlação proposta por Van Velzen e colaboradores (1972) sugerida por Reid e colaboradores (1977), dada por :

$$\log(\mu_{L_i}) = B_o (1/T - 1/T_o) \quad (D.19)$$

onde : T : temperatura de equilíbrio [K];

μ_{L_i} : viscosidade do líquido puro no estado líquido [cp];

B_o e T_o : constantes.

Os valores das constantes B_o e T_o para cada componente são apresentados na seguinte tabela.

Tabela D.2 : constantes B e T_o para cada componente [Reid e colaboradores (1977)].

Componente	B_o	T_o
água	658,25	283,16
etanol	686,64	300,88
butanol	984,54	341,12

D.7 - Viscosidade da Mistura Líquida

O cálculo da viscosidade da mistura líquida é feita segundo :

$$\ln(\mu_L) = x_1 \ln(\mu_{L1}) + (1 - x_1) \ln(\mu_{L2}) \quad (D.20)$$

onde : μ_L , μ_{L1} , μ_{L2} = viscosidade da mistura, do componente 1 e 2 no estado líquido [cp].

D.8 - Massa Específica da Mistura Gasosa

A massa específica da fase gasosa é obtida através da seguinte relação :

$$\rho_G = \frac{PM_G}{v_G} \quad (D.21)$$

onde : ρ_G = massa específica da mistura gasosa [g/cm³];

PM_G = massa molecular da mistura [g/mol];

v_G = volume molar da mistura gasosa [cm³/gmol].

A massa da mistura gasosa é obtida através da relação :

$$PM_G = y_1 PM_1 + (1 - y_1) PM_2 \quad (D.22)$$

onde : y_1 = fração molar do componente 1 no estado gasoso.

A determinação da fração molar dos componentes estudados apresenta-se no Apêndice B.

O volume molar da mistura é obtido através da equação virial truncada no segundo membro.

$$V_G = \frac{Z R T}{P} \quad (D.23)$$

sendo :

$$Z = 1 + \frac{B P}{R T} \quad (D.24)$$

onde : Z = fator de compressibilidade;

R = constante geral dos gases [82,057 atm cm³/mol K];

P = pressão [atm];

B = segundo coeficiente virial [cm³/gmol].

Para o cálculo do segundo coeficiente virial, B , é utilizada a correlação de Tsonopoulos (1975) para misturas polares, dada por :

$$\frac{B P_c}{R T_c} = f^{(0)} + w f^{(1)} + f^{(2)} \quad (\text{D.25})$$

$$f^{(0)} = 0,1445 - \frac{0,330}{T_r} - \frac{0,1385}{T_r^2} - \frac{0,0121}{T_r^3} - \frac{0,000607}{T_r^8} \quad (\text{D.26})$$

$$f^{(1)} = 0,0637 + \frac{0,331}{T_r^2} - \frac{0,423}{T_r^3} - \frac{0,008}{T_r^8} \quad (\text{D.27})$$

$$f^{(2)} = \frac{a}{T_r^6} - \frac{b}{T_r^8} \quad (\text{D.28})$$

onde : T_c = temperatura crítica da mistura gasosa [k];

V_c = volume molar crítico da mistura gasosa [cm³/gmol];

P_c = pressão crítica da mistura gasosa [atm];

Z_c = compressibilidade crítica da mistura gasosa ;

w = fator acêntrico de Pitzer da mistura gasosa ;

T_r = temperatura reduzida da mistura gasosa ;

a, b = coeficientes de mistura.

A tabela D.3 indica os valores destas propriedades para os componentes estudados neste trabalho.

Tabela D.3 : propriedades dos componentes puros [Reid e colaboradores (1977)].

Componente	T_c [K]	V_c [cm ³ /gmol]	P_c [atm]	w	a	b
água	647,3	56,0	217,6	0,344	0,0279	0,0229
etanol	516,2	167,0	63,0	0,635	0,0878	0,0572
butanol	562,9	274,0	43,6	0,590	0,0878	0,0367

Regras de mistura utilizadas :

$$T_c = y_1 T_{c1} + y_2 T_{c2} \quad (D.29)$$

$$V_c = \left(\frac{V_{c1}^{1/3} + V_{c2}^{1/3}}{2} \right)^{1/3} \quad (D.30)$$

$$Z_c = \frac{Z_{c1} + Z_{c2}}{2} \quad (D.31)$$

$$w = \frac{w_1 + w_2}{2} \quad (D.32)$$

$$P_c = \frac{Z_c R T_c}{V_c} \quad (D.33)$$

$$T_r = \frac{T}{T_c} \quad (D.34)$$

D.9 - Viscosidade dos Componentes Puros no Estado Gasoso

Em casos em que ocorre atração ou repulsão entre as moléculas pelo efeito das forças intermoleculares, a teoria de Chapman e Enskog (1939) é normalmente utilizada :

$$\mu_{Gi} = 26,69 \frac{\sqrt{PM_i T}}{d_{mi} \Omega_v} \quad [\mu p] \quad (D.35)$$

onde : d_{mi} = diâmetro da molécula [\AA];

Ω_v = integral de colisão para a viscosidade.

Brokaw (1969) em estudos sobre o potencial de Stockmayer, sugere a seguinte relação para estimar Ω_v :

$$\Omega_v = \Omega_v(\text{Lennard - Jones}) + \frac{0,2 \delta^2}{T^*} \quad (D.36)$$

onde : $T^* = k T / E$;

δ = parâmetro polar.

Neufeld e colaboradores (1972) propuseram uma equação empírica para o cálculo do termo de Lennard-Jones da equação (D36) :

$$\Omega_v(\text{Lennard - Jones}) = \frac{A}{T^{*B}} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} \quad (D.37)$$

onde : A = 1,16145; B = 0,14874; C = 0,52487;

D = 0,77320; E = 2,16178; F = 2,43787.

A tabela D.4 mostra os parâmetros necessários para o cálculo da viscosidade do gás dos componentes puros água e etanol, d_m , E/k e δ .

Tabela D.4 : Parâmetros dos componentes [Reid e colaboradores (1977)]

Componentes	d_m (Å)	E/k (K)	δ
água	2,52	775	1,0
etanol	4,31	431	0,3

A utilização deste método apresenta um erro entre 0,5 a 1,5%.

Não é mostrado valores dos parâmetros d_m , E/k e δ para o butanol, neste caso, Reid e colaboradores (1977) sugerem o método de Reichengerg (1975) para o cálculo da viscosidade :

$$\mu_{Gi} = \frac{a^* T_{ri}}{\left[1 + 0,036 T_{ri} (T_{ri} - 1)\right]^{1/6}} \quad (D.38)$$

onde : T_{ri} = temperatura reduzida do componente i;

a^* = parâmetro [μp].

Para compostos orgânicos :

$$a^* = \frac{PM_i^{1/2} T_{ci}}{\sum n_i c_i} \quad (D.39)$$

onde : n_i = número de grupos atômicos para o componente i.

A contribuição de cada grupo atômico para c_i , para o caso do butanol, está na tabela D.5.

Tabela D.5 : Contribuição dos grupo atômico para c_i [Reid e colaboradores (1977)].

Grupo	Contribuição, c_i
CH ₃	9,04
CH ₂ (sem anel)	6,47
OH (álcool)	7,96

D.10 - Viscosidade da Mistura Gasosa

Para estimar a viscosidade da mistura gasosa, é utilizado a aproximação de Wilke (1950) para Φ_{12} e Φ_{21} da seguinte equação :

$$\mu_G = \frac{y_1 \mu_{G1}}{y_1 + (1-y_1) \Phi_{12}} + \frac{(1-y_1) \mu_{G2}}{(1-y_1) + y_1 \Phi_{21}} \quad (D.40)$$

onde : μ_G = viscosidade da mistura gasosa [μp];

Φ = parâmetro de viscosidade de mistura.

$$\Phi_{12} = \frac{\left[1 + (\mu_{G1} / \mu_{G2})^{0,5} (PM_2 / PM_1)^{0,25} \right]^2}{\left[8 (1 + PM_1 / PM_2) \right]^{0,5}} \quad (D.41)$$

$$\Phi_{21} = \frac{\mu_{G2}}{\mu_{G1}} \frac{PM_1}{PM_2} \Phi_{12} \quad (D.42)$$

D.11 - Programa Newton

O programa Newton determina a tensão superficial da mistura líquida água-butanol e foi desenvolvido em linguagem Turbo Pascal.

```
{N+}
{E+}
{F+}
PROGRAM NEWTON;

{Este programa encontra a raiz de uma função
conhecida através do método de Newton-
Raphson, subrotina retirada de Press e
colaboradores (1988). Calcula a tensão
superficial da mistura água-butanol pelo
método de Tamura e colaboradores (1955).}
```

```
uses crt, printer;
const
  x1 = 0;
  x2 = 1;
  xacc = 0.000001;
type
  Registro = record  xh2o      : real;
                    tetah2o   : real;
                    tetabut   : real;
                    t          : real;
  end;
  arquivodados = file of real;
  arquivo = file of registro;
var
  nomeger, nomeaux, arqdados : string[13];
  texto          : text;
  reg            : registro;
  regis         : arquivo;
  dados         : text;
  c3,raiz,c2,tsm,tetah2o,tetabut,xh2o,t : real;
```

{Subrotina que realiza cálculos iniciais}

```
function cc(xh2o,tetah2o,tetabut,t :
real):real;
const
  q = 4;
  vbut = 91.36;
  vh2o = 18.0;
var
  fih2o, fibut, beta, w, c, c2 : real;
begin
  fih2o := xh2o*vh2o/(xh2o*vh2o+(1-
xh2o)*vbut);
```

```
  fibut := (1-xh2o)*vbut/(xh2o*vh2o+(1-
xh2o)*vbut);
  fih2o := exp(q*ln(fih2o));
  beta := (ln(fih2o/fibut))/2.302585;
  w := 0.441*q*((tetabut*(20.467933)/q)-
(tetah2o*(6.868285)))/t;
  c := beta+w;
  cc := exp(c*ln(10));
end;
```

{Subrotina que retorna com o valor da função e da derivada primeira desta função}

```
Procedure funcd(x,c3:real; var f,df : real);
begin
  f := x*x*x*x+c2*x-c2;
  df := 4*x*x*x+c2;
end;
```

{Subrotina que retorna com o valor da raiz no intervalo $x_1 - x_2$ determinado}

```
Function rtnewt(x1, x2, xacc : real): real;
label 99;
const
  jmax = 100;
var
  df,dx,f,rtn : real;
  j : integer;
begin
  rtn := 0.5*(x1+x2);
  for j := 1 to jmax do
  begin
```

{Cálculo da função e sua derivada primeira}

```
  funcd(rtn,c3,f,df);
  dx := f/df;
  rtn := rtn-dx;
  if ((x1-rtn)*(rtn-x2) < 0.0) then
  begin
    writeln('pausa na function');
    writeln('fora do intervalo');
    readln
  end;
  if (abs(dx) < xacc) then goto 99
end;
```

```
writeln('pausa na function');
writeln('ultrapassou o numero maximo de
interacoes');
99 : rtnewt := rtn
end;
```

```
{Conversão do arquivo de dados}
```

```
Procedure converte;
```

```
var
```

```
xx : string;
```

```
x : real;
```

```
erro : integer;
```

```
begin
```

```
while not eof(dados) do
```

```
begin
```

```
readln (dados,xx);
```

```
val(xx,x,erro);
```

```
reg.xh2o := x;
```

```
readln (dados,xx);
```

```
val(xx,x,erro);
```

```
reg.tetah2o := x;
```

```
readln (dados,xx);
```

```
val(xx,x,erro);
```

```
reg.tetabut := x;
```

```
readln (dados,xx);
```

```
val(xx,x,erro);
```

```
reg.t := x;
```

```
write(regis,reg);
```

```
end;
```

```
end;
```

```
{Início do programa principal}
```

```
begin
```

```
clrscr;
```

```
writeln; writeln;
```

```
writeln(' :20,'DIGITE OS NOMES DOS
ARQUIVOS');
```

```
writeln; writeln;
```

```
write(' :5,'Nome do arquivo de dados = ');
```

```
readln (arqdados);
```

```
writeln;
```

```
write(' :5,'NOME DO ARQUIVO TIPO
REGISTRO = ');
```

```
readln(nomeger);
```

```
writeln;
```

```
write(' :5,'NOME DO ARQUIVO A SER
CRIADO = ');
```

```
readln(nomeaux);
```

```
writeln;
```

```
assign(regis,nomeger);
```

```
assign(texto,nomeaux);
```

```
assign (dados,arqdados);
```

```
reset(dados);
```

```
rewrite(regis);
```

```
rewrite(texto);
```

```
{Conversão do arquivo de dados}
```

```
converte;
```

```
close(dados);
```

```
reset (regis);
```

```
writeln; writeln;
```

```
{Inicialização das variáveis}
```

```
writeln(texto, ' xh2o ',' tetah2o',' tetabut' , '
t ',' tsm ');
```

```
writeln(texto);
```

```
repeat
```

```
begin
```

```
read (regis,reg);
```

```
c2 :=
```

```
cc(reg.xh2o,reg.tetah2o,reg.tetabut,reg.t);
```

```
{Cálculo da raiz para o intervalo  $x_1 - x_2$ }
```

```
raiz := rtnewt(x1,x2,xacc);
```

```
{Cálculo da tensão superficial da mistura
água-butanol}
```

```
tsm := (raiz*exp(0.25*ln(reg.tetah2o))+
(1-raiz)*exp(0.25*ln(reg.tetabut)));
```

```
tsm := exp(4*ln(tsm));
```

```
{Impressão dos resultados}
```

```
writeln(texto, reg.xh2o:4:3,'
```

```
,reg.tetah2o:5:3,' ',
```

```
reg.tetabut:5:3,' ', reg.t:4:1,' ',tsm:5:3);
```

```
end;
```

```
until eof(regis);
```

```
close (regis);
```

```
close (texto);  
end.
```

APÊNDICE E

CÁLCULO DAS VELOCIDADES SUPERFICIAIS DO LÍQUIDO E DO VAPOR

VELOCIDADES SUPERFICIAIS DO LÍQUIDO E DO VAPOR

E.1 - Velocidade Superficial do Líquido

Para calcular a velocidade superficial do líquido no interior da coluna basta dividir a vazão volumétrica medida pela área da seção transversal da coluna :

$$v_L = \frac{Q_L}{\text{Área}} \quad (\text{E.1})$$

onde : v_L = velocidade superficial do líquido [cm/s];

Q_L = vazão volumétrica do líquido [ml/s];

Área = área da seção transversal da coluna [cm²].

E.2 - Velocidade Superficial do Vapor

Para calcular a velocidade superficial do vapor é necessária a vazão volumétrica do vapor :

$$Q_v = \frac{V R T}{P} \quad (\text{E.2})$$

onde : Q_v = vazão volumétrica do vapor [cm³/s];

V = vazão molar do vapor [mol/s];

R = constante geral dos gases [82,057 atm cm³/mol K];

P = pressão [atm];

T = temperatura de equilíbrio [K].

Como a coluna operava em refluxo total, a vazão molar do líquido é igual a do vapor e pode ser calculada da seguinte forma :

$$V = L = \frac{Q_L \rho_L}{PM_L} \quad (\text{E.3})$$

onde : L = vazão molar de líquido [ml/s];

ρ_L = massa específica da mistura líquida [g/cm^3];

PM_L = peso molecular da mistura líquida.

APÊNDICE F

DETERMINAÇÃO DOS COEFICIENTES DE CORRELAÇÃO

A determinação dos coeficientes de correlação, w_1 a w_6 , da equação genérica 5.8, é feita através do ajuste dos dados experimentais utilizando o método de otimização dos mínimos quadrados. A função objetivo a ser minimizada é dada por :

$$\varphi = \sum_{j=1}^m \left(\frac{h}{d_{\text{exp}}} - \frac{h}{d_{\text{calc}}} \right)^2 \quad (\text{F.1})$$

A equação H.1 pode ser escrita da seguinte forma, linearizando as equações :

$$\varphi = \sum_{j=1}^m \left[\ln \left(\frac{h}{d_{\text{exp}}} \right) - \ln \left(\frac{h}{d_{\text{calc}}} \right) \right]^2 \quad (\text{F.2})$$

A equação genérica 5.8 pode ser escrita da seguinte forma :

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{h}{d} \right) = & \ln(w_1) + w_2 \ln(\phi) + w_3 \ln \left(\frac{g d}{v_G^2} \right) + w_4 \ln \left(\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right) + \\ & + w_5 \ln \left(\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G} \right) + w_6 \ln \left(\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L} \right) \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Substituindo esta equação na F.2, obtemos a seguinte função objetivo a ser minimizada.

$$\varphi = \sum_{j=1}^m \left[\ln \left(\frac{h}{d_{\text{exp}}} \right) - \ln(w_1) - w_2 \ln(\phi) - w_3 \ln \left(\frac{g d}{v_G^2} \right) - w_4 \ln \left(\frac{\sigma}{\mu_L v_G} \right) - \right.$$

$$+w_5 \ln\left(\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G}\right) - w_6 \ln\left(\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L}\right) \quad (\text{F.4})$$

O ponto de mínimo de uma função é obtido através da derivada primeira da função objetivo a ser minimizada ser nula, em relação a uma dada variável. Assim, obtemos o seguinte conjunto de equações lineares :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial (\ln w_1)} = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^m \ln\left(\frac{h}{d_{\text{calc}}}\right)_j = \sum_{j=1}^m \ln\left(\frac{h}{d_{\text{exp}}}\right)_j \quad (\text{F.5})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial w_2} = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{calc}}}\right) \ln(\phi) \right]_j = \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{exp}}}\right) \ln(\phi) \right]_j \quad (\text{F.6})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial w_3} = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{calc}}}\right) \ln\left(\frac{g d}{v_G^2}\right) \right]_j = \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{exp}}}\right) \ln\left(\frac{g d}{v_G^2}\right) \right]_j \quad (\text{F.7})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial w_4} = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{calc}}}\right) \ln\left(\frac{\sigma}{\mu_L v_G}\right) \right]_j = \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{exp}}}\right) \ln\left(\frac{\sigma}{\mu_L v_G}\right) \right]_j \quad (\text{F.8})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial w_5} = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{calc}}}\right) \ln\left(\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G}\right) \right]_j = \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{exp}}}\right) \ln\left(\frac{v_G d \rho_G}{\mu_G}\right) \right]_j \quad (\text{F.9})$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial w_6} = 0 \rightarrow \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{calc}}}\right) \ln\left(\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L}\right) \right]_j = \sum_{j=1}^m \left[\ln\left(\frac{h}{d_{\text{exp}}}\right) \ln\left(\frac{v_L d \rho_L}{\mu_L}\right) \right]_j \quad (\text{F.10})$$

Substitui-se a equação F.3 em cada uma das equações F.5 a F.10 obtendo um sistema de equações lineares. A resolução deste sistema de equações é feita através do Método de Decomposição LU por um programa desenvolvido em linguagem Turbo Pascal, denominado de DECOMLU, apresentado a seguir.

```

{$N+}
{$E+}
PROGRAM DECOMLU;

{Programa para resolver um sistema de
equações lineares pelo Método de
Decomposição LU, subrotina retirada de Press
e colaboradores (1988), calculando os
parâmetros de uma correlação empírica e
determinando os coeficientes de correlação.}

uses crt,printer;
const
  np=10;
  n=6;
  g=980;
type
  Registro = record h : real;
                  vg : real;
                  vl : real;
                  rog : real;
                  rol : real;
                  mig : real;
                  mil : real;
                  ts : real;
                  a : real;
                  d : real;
  end;
  arquivodedados = file of real;
  arquivo = file of registro;
  glnpbynp = array [1..np,1..np] of double;
  glnarray = array [1..n] of double;
  glindx = array [1..n] of integer;
var
  i, j : integer;
  sx, sy, sxy, sx2, sy2, cc, erroimp : double;
  errorma, errome, erroparc, erel, aux : double;
  t1, t2, t3, t4, t5, t6, ecalc, aux2, erroaux :
      double;
  b : glnarray;
  m : glnpbynp;
  indx : glindx;
  nomeger, nomeaux, arqdados : string[13];
  texto : text;
  reg : registro;
  regis : arquivo;
  dados : text;
  da,GR1,GR2,GR3,GR4,GR5,GR6 : real;

```

```
{Subrotina para formação da matriz LU}
```

```

Procedure LU(var a:glnpbynp; n,np:integer;
             var indx: glindx; var da: real);
const
  tiny = 1.0e-20;
var
  k,j,imax,i: integer;
  sum,dum,big: real;
  vv: glnarray;
begin
  da:=1.0;
  for i := 1 to n do
  begin
    big := 0.0;
    for j := 1 to n do
      if (abs(a[i,j]) > big) then
        big := abs(a[i,j]);
      if (big = 0.0) then
        begin
          writeln ('pausa em LU - matriz
singular');
          readln
        end;
        vv[i] := 1.0/big
      end;
    for j := 1 to n do
      begin
        for i := 1 to j-1 do
          begin
            sum := a[i,j];
            for k := 1 to i-1 do
              begin
                sum := sum-a[i,k]*a[k,j]
              end;
            a[i,j] := sum
          end;
          big := 0.0;
          for i := j to n do
            begin
              sum := a[i,j];
              for k:= 1 to j-1 do
                begin
                  sum := sum-a[i,k]*a[k,j]
                end;
              a[i,j] := sum;
              dum := vv[i]*abs(sum);

```

```

    if (dum >= big) then
    begin
        big := dum;
        imax := i
    end
end;
if (j <> imax) then
begin
    for k := 1 to n do
    begin
        dum := a[imax,k];
        a[imax,k] := a[j,k];
        a[j,k] := dum
    end;
        da := -da;
        vv[imax] := vv[j]
    end;
    indx[j] := imax;
    if (a[j,j] = 0.0) then
    a[j,j] := tiny;
    if (j <> n) then
    begin
        dum := 1.0/a[j,j];
        for i := j+1 to n do
        begin
            a[i,j] := a[i,j]*dum
        end
    end
end;
end;

```

{Subrotina de decomposição LU para a resolução do sistema}

```

Procedure luII(a: glnpbynp; n,np: integer;
indx: glindx;
    var b: glnarray);

```

```

var
    j,ip,ii,i : integer;
    sum : real;
begin
    ii := 0;
    for i := 1 to n do
    begin
        ip := indx[i];
        sum := b[ip];
        b[ip] := b[i];
        if (ii <> 0) then

```

```

begin
    for j := ii to i-1 do
    begin
        sum := sum-a[i,j]*b[j]
    end
    end
    else if (sum <> 0.0) then
    begin
        ii := i
    end;
    b[i] := sum
end;
for i := n downto 1 do
begin
    sum := b[i];
    if (i < n) then
    begin
        for j := i+1 to n do
        begin
            sum := sum-a[i,j]*b[j]
        end
    end;
    b[i] := sum/a[i,i]
end
end;

```

{Subrotina para conversão do arquivo de dados}

```

Procedure converte;

```

```

var
    xx : string;
    x : real;
    erro : integer;
begin
    while not eof(dados) do
    begin
        readln (dados,xx);
        val(xx,x,erro);
        reg.h := x;
        readln (dados,xx);
        val(xx,x,erro);
        reg.vg := x;
        readln (dados,xx);
        val(xx,x,erro);
        reg.vl := x;
        readln (dados,xx);
        val(xx,x,erro);
    end;
end;

```

```

reg.rog := x;
readln (dados,xx);
val(xx,x,erro);
reg.rol := x;
readln (dados,xx);
val(xx,x,erro);
reg.mig := x;
readln (dados,xx);
val(xx,x,erro);
reg.mil := x;
readln (dados,xx);
val(xx,x,erro);
reg.ts := x;
readln (dados,xx);
val(xx,x,erro);
reg.a := x;
readln (dados,xx);
val(xx,x,erro);
reg.d := x;
write(regis,reg);
end;
end;

{Início do programa principal}

begin
  clrscr;
  writeln; writeln;

  {Abertura dos arquivos}

  writeln(' :20,'DIGITE OS NOMES DOS
ARQUIVOS');
  writeln; writeln;
  write(' :5,'Nome do arquivo de dados = ');
  readln (arqdados);
  writeln;
  write(' :5,'NOME DO ARQUIVO TIPO
REGISTRO = ');
  readln(nomeger);
  writeln;
  write(' :5,'NOME DO ARQUIVO A SER
CRIADO = ');
  readln(nomeaux);
  writeln;
  assign(regis,nomeger);
  assign(texto,nomeaux);
  assign (dados,arqdados);

  reset(dados);
  rewrite(regis);
  rewrite(texto);

  {Conversão do arquivo de dados}

  converte;
  close(dados);
  reset (regis);

  {Inicialização das variáveis}

  sx := 0;
  sy := 0;
  sxy := 0;
  sx2 := 0;
  sy2 := 0;
  cc := 0;
  erroma := -9999;
  errome := 9999;
  erroparc := 0;
  erroimp := 0;
  erel := 0;
  for i := 1 to n do
  begin
    for j := 1 to (n + 1) do
      m[I,J] := 0;
      b[I] := 0;
    end;

    {Cálculos iniciais - Formação da matriz}

    m[1,1] :=filesize(regis);
    repeat
    begin
      read(regis,reg);
      gr1 := reg.h;
      gr2 := ln(reg.a);
      gr3 := ln(g*reg.d/(sqr(reg.vg)));
      gr4 := ln(reg.ts/(reg.mil*reg.vg));
      gr5 := ln(reg.vg*reg.d*reg.rog/reg.mig);
      gr6 := ln(reg.vl*reg.d*reg.rol/reg.mil);
      m[1,2] := m[1,2] + gr2;
      m[1,3] := m[1,3] + gr3;
      m[1,4] := m[1,4] + gr4;
      m[1,5] := m[1,5] + gr5;
      m[1,6] := m[1,6] + gr6;
      b[1] := b[1] + ln(gr1);
    end;
  end;
end;

```



```

m[2,2] := m[2,2] + gr2 * gr2;
m[2,3] := m[2,3] + gr2 * gr3;
m[2,4] := m[2,4] + gr2 * gr4;
m[2,5] := m[2,5] + gr2 * gr5;
m[2,6] := m[2,6] + gr2 * gr6;
b[2] := b[2] + gr2 * ln(gr1);
m[3,3] := m[3,3] + gr3 * gr3;
m[3,4] := m[3,4] + gr3 * gr4;
m[3,5] := m[3,5] + gr3 * gr5;
m[3,6] := m[3,6] + gr3 * gr6;
b[3] := b[3] + gr3 * ln(gr1);
m[4,4] := m[4,4] + gr4 * gr4;
m[4,5] := m[4,5] + gr4 * gr5;
m[4,6] := m[4,6] + gr4 * gr6;
b[4] := b[4] + gr4 * ln(gr1);
m[5,5] := m[5,5] + gr5 * gr5;
m[5,6] := m[5,6] + gr5 * gr6;
b[5] := b[5] + gr5 * ln(gr1);
m[6,6] := m[6,6] + gr6 * gr6;
b[6] := b[6] + gr6 * ln(gr1);
end;
until eof(regis);
close(regis);
for i := 1 to n do
begin
  for j:= i to n do
    m[j,i] := m[i,j];
  end;
end;

{Resolução da matriz}

lu(m,n,np,indx,da);
lull(m,n,np,indx,b);

{Impressão dos coeficientes}

clrscr;
writeln(' :20,'PARAMETROS DA
CORRELACAO');
writeln;
writeln(' :25,'W[1] = ', EXP(b[1]));
writeln;
writeln(' :25,'W[2] = ', (b[2]):7:5);
writeln;
writeln(' :25,'W[3] = ', (b[3]):7:5);
writeln;
writeln(' :25,'W[4] = ', (b[4]):7:5);
writeln;

writeln(' :25,'W[5] = ', (b[5]):7:5);
writeln;
writeln(' :25,'W[6] = ', (b[6]):7:5);

{Impressão no arquivo tipo texto}

writeln(texto,'experim', 'ecalc',' ','errp %',' ',
'T1 T2 T3 T4 T5 T6 ');
writeln(texto);

{Cálculos estatísticos}

reset(regis);
repeat
begin
  read(regis,reg);
  t1 := exp(b[1]);
  t2 := exp(b[2] * ln(reg.a));
  t3 := exp(b[3] * ln(g*reg.d/(sqr(reg.vg))));
  t4 := exp(b[4] *
ln(reg.ts/(reg.mil*reg.vg)));
  t5 := exp(b[5] *
ln(reg.vg*reg.d*reg.rog/reg.mig));
  t6 := exp(b[6] *
ln(reg.vl*reg.d*reg.rol/reg.mil));
  Ecalc := (t1 * t2 * t3 * t4 * t5 * t6);
  sx := sx + reg.h;
  sy := sy + ecalc;
  sxy := sxy + reg.h * ecalc;
  sx2 := sx2 + sqr(reg.h);
  sy2 := sy2 + sqr(ecalc);
  erroaux := ((ecalc - reg.h)/reg.h);
  if erroaux > erroroma then
    erroroma := erroaux
  else
    if erroaux < errorome then
      errorome := erroaux;
    erroparc := erroparc + abs((ecalc -
reg.h)/reg.h);
    erroimp := 100 * (ecalc - reg.h)/reg.h;
    writeln(texto, reg.h:7:5,' ', ecalc:7:5,' ',
erroimp:6:2,' ', t1,' ',t2 ,
' ',t3:6:4,' ',t4,' ',t5,' ',t6:6:4);
  end;
until eof(regis);

{Cálculo do coeficiente de correlação}

```

```
aux1 := sxy - ((sx * sy)/filesize(regis));
aux2 := (sx2 - (sqr(sx)/filesize(regis))) *
  (sy2 - (sqr(sy)/filesize(regis)));
cc := aux1 / sqrt(aux2);
```

{Cálculo do erro relativo}

```
erel := (100 * erroparc)/filesize(regis);
close(regis);
close(texto);
```

{Impressão dos resultados estatísticos}

```
writeln; writeln;
writeln(' :20,'COEFICIENTE DE
CORRELACAO = ',CC:7:5);
writeln(' :20,'ERRO RELATIVO MEDIO
(%) = ',EREL:0:4);
writeln(' :20,'MAIOR ERRO (%) = ',
100*ERROMA:9:4);
writeln(' :20,'MENOR ERRO (%) = ',
100*ERROME:9:4);
repeat until keypressed;
end.
```