

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

**ESTUDO DE NOVA CONFIGURAÇÃO DE COLUNAS DE
DESTILAÇÃO AUMENTANDO EFICIÊNCIA ENERGÉTICA**

Autor: Gustavo Henrique Santos Florês Ponce

Orientadora: Prof.^a Dra. Maria Regina Wolf Maciel

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

Campinas - São Paulo
Abril de 2011

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

P773e Ponce, Gustavo Henrique Santos Florês
Estudo de nova configuração de colunas de destilação
aumentando eficiência energética / Gustavo Henrique
Santos Florês Ponce. --Campinas, SP: [s.n.], 2011.

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

1. Destilação. 2. Simulação. 3. Água-etanol. 4.
Integração energética. I. Maciel, Maria Regina Wolf. II.
Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Study of a new set of distillation columns for increasing
energy efficiency

Palavras-chave em Inglês: Distillation, Simulation, Water-ethanol, Energy
integration

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Daniel Ibraim Pires Atala, César Benedito Batistella

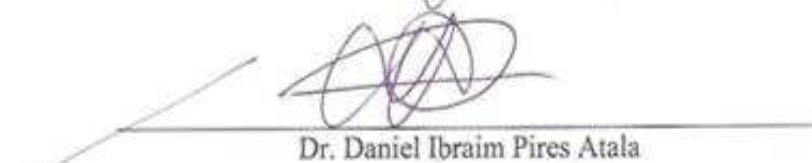
Data da defesa: 14/04/2011

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Gustavo Henrique Santos Florês Ponce e
aprovada em 14 de abril de 2011 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof.ª Dra. Maria Regina Wolf Maciel



Dr. Daniel Ibraim Pires Atala



Dr. César Benedito Batistella

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



Prof.^a Dra. Maria Regina Wolf Maciel

Aos meus pais, Solange e Afonso e meu irmão Victor
pelo apoio, compreensão e confiança,
dedico este trabalho.

“Quem sabe faz à hora não espera acontecer”

Geraldo Vandré

“A angústia é a única fonte da criação”

Jackes Lacan

RESUMO

O objetivo dessa dissertação foi o de comparar, através de simulações utilizando o software Aspen Plus[®] os gastos energéticos de uma coluna de destilação usual com relação a uma Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC), para o mesmo fim. A destilação é um processo que consome muita energia sendo que possui uma baixa eficiência energética (em torno de 10%). A CDIIC atua aumentando a temperatura da seção de retificação colocando esta em contato direto com a seção de esgotamento, fazendo-as trocar calor, provendo parte, ou toda energia, necessária a ser adicionada e retirada da coluna. Trata-se de uma recente tecnologia com a vantagem de uma menor degradação energética ao longo da coluna e, conseqüente, maior eficiência. Nas simulações foram realizadas concentrações (em percentual mássico de etanol) de uma mistura de etanol - água a 92,6% a partir da concentração que a mistura de vinho fermentado de-levedurado do processo batelada alimentada contendo 8% em massa. A mistura etanol-água foi estudada porque hoje existe um grande interesse no Brasil em tecnologias que diminuam o seu custo de produção. Sendo a destilação a etapa fundamental do processo de concentração dessa mistura, e a mesma se tratar de um processo que demanda muita energia, o projeto se encaixa justamente na prerrogativa da diminuição dos gastos na obtenção do produto de interesse. Os resultados mostram uma economia energética na coluna CDIIC próxima de 80% com relação à coluna convencional. Por não possuir o valor experimental do coeficiente global para a mistura e este ser essencial para o cálculo da troca térmica (assim como a área efetiva de troca térmica) na CDIIC, utilizou-se correlações para seu cálculo, estas tiveram grande enfoque teórico/metodológico no trabalho e influenciaram diretamente nos resultados.

Palavras-chave: Destilação, Simulação, Água - etanol, integração energética

ABSTRACT

The objective of this thesis was to compare, through simulations using the software Aspen Plus[®] energy spent of a usual distillation column with respect to a Internal Heat Integration Distillation Column (i-HIDIC) for the same purpose. Distillation is a process that consumes lots of energy being that has a low efficiency (around 10%). The CDIIC works by increasing the temperature of the rectifying section putting it in direct contact with the stripping section, making the heat exchange, providing some or all energy needed to be added and removed from the column. This is the latest technology with the advantage of a lower energy degradation along the column and, consequently, greater efficiency. In the simulations were conducted concentrations (in mass percentage of ethanol) of a mixture of ethanol - water to 92.6% from the concentration of the mixture of fermented wine without yeast of fed batch process with 8% by weight. The ethanol-water mixture was studied because today there is great interest in Brazil in technologies that reduce their cost of production.

As the distillation is the key step in process of concentration in the blend, and the same it is a process that demands lots of energy, the project fits in the reduction of expenses in obtaining the product of interest. The results show an energy economy in the CDIIC column of 80% compared to conventional column. Why not have the experimental value of the overall coefficient of heat transfer for the mix and this is essential for calculating the heat exchange (as well as the effective area of heat exchange) in CDIIC, correlations was used for your calculation, these had highly approach theoretical and methodological at work and directly influence in the results.

Keywords: Distillation, Simulation, Water-ethanol, Energy integration

Sumário:

Lista de Figuras:	xvii
Lista de Tabelas	xxi
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Organização da dissertação e objetivos:.....	2
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA:.....	5
2.1 Tecnologias no campo da destilação para aumento da eficiência energética.....	5
2.1.1 Coluna Múltiplo-efeito	5
2.1.2 Recompressão direta de vapor (VRC).....	6
2.1.3 Coluna de destilação Diabática.....	8
2.1.4 Coluna de destilação com integração interna de calor (CDIIC).....	9
2.2 Diferentes aplicações e configurações da CDIIC	12
2.2.1 Colunas Concêntricas	13
2.2.2 Colunas Multi-Tubos (Shell & Tube Column).....	13
2.2.2.1 Planta piloto do Japão:.....	13
2.2.3 Coluna de trocador de calor de aletas (Plate-fin column)	17
2.2.4 Coluna concêntrica com painéis de troca térmica	17
2.2.4.1 Planta piloto escala experimental universidade TU Delft	19
2.3 Troca de calor na CDIIC	24
2.3.1 Mecanismo da troca de calor na CDIIC	24
2.3.2 Características da Fluidodinâmica de filmes líquidos descententes.....	26
2.3.3 Coeficiente de película externo da troca de calor h_{ext}	31
2.3.3.1 Correlação de Chun e Seban (1971).....	32
2.3.3.2 Correlação de Alhusseini et al., (1997) para regime turbulento de escoamento	33
2.3.4 Coeficiente de película interno da troca de calor h_{ext}	35
2.4 Hidráulica nos pratos	40
2.4.1 Perda de Pressão nos pratos.....	40
2.4.2 Vazamento ou Choro	42
2.4.3 Perda de pressão devido aos painéis.....	43
2.4.4 Cálculo do diâmetro hidráulico da Coluna	44
2.4.4.1 Correlação de Fair	45
2.5 Metodologia Pinch aplicada na CDIIC.....	46
2.5.1 Pinch na CDIIC	47
2.6 CDIIC ideal (i-CDIIC)	49
2.7.1 Conceitos dos modelos de Equilíbrio	50
2.7.2 Modelagem Matemática Genérica:.....	51
2.7.3 Modelagem aplicada à CDIIC	57
2.7.4 Limitações da modelagem matemática da CDIIC	58
2.8 Eficiência de pratos	59
2.8.1 Métodos para prever a eficiência de estágios	63
2.8.1.1 Métodos teóricos para prever a eficiência de estágios	63
2.8.1.2 Métodos Empíricos para predição da eficiência de estágios	65
2.9 Caracterização termodinâmica do sistema	67
2.10 Eficiência Termodinâmica da CDIIC	68

3	MATERIAIS E MÉTODOS.....	71
3.1	Descrição geral	71
3.1.1	Efeitos da configuração da CDIIC.....	74
3.2	Viabilidade Termodinâmica	77
3.3	Parâmetros hidráulicos adotados	78
3.4	Metodologia Aplicada	78
3.5	Diferentes procedimentos para integração interna da CDIIC.....	82
3.6	Conclusões Materiais e Métodos:.....	82
4.	ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	83
4.1	Estudo de caso	83
4.1.1	Simulação CDIIC	85
4.2	ANÁLISE I.....	87
4.2.1	CDIIC 30 estágios	87
4.2.2	Resultados da CDIIC com painéis de troca de calor para 30,40 e 50 estágios.....	98
4.2.3	CDIIC com painéis de troca de calor; Troca de calor constante	104
4.2.4	Quantidade de líquido escoando e quantidade de vapor condensando nos painéis	109
4.2.5	Eficiência Global (E_{OC}) da CDIIC.....	111
4.3	Análise II	113
4.3.1	Eficiência Global (E_{OC}) da CDIIC.....	119
4.4	Análise III	119
5.	CONCLUSÕES	124
5.1	Conclusões Análises I.....	124
5.2	Conclusões Análises II	125
5.3	Conclusões Análise III	126
5.4	Conclusões gerais e trabalhos futuros:.....	126
6.	REFERÊNCIAS:	129
	APENDICE A. Validação do Modelo Termodinâmico	139
	APENDICE B. Procedimento para o cálculo da área dos painéis.....	146

Lista de Figuras:

Figura 2.1. Típico processo de destilação múltiplo-efeito (Desidratação de Glicóis) (Fonte: TSUN-JEN HO, 2010).	6
Figura 2.2. Figura esquemática que simbolizando a re-compressão direta de vapor. (F: alimentação; D: produto de topo; B: produto de fundo) (Fonte: TSUN-JEN HO, 2010). 7	7
Figura 2.3. Coluna diabática com trocas de calor em todos os estágios. (Fonte: Adaptado de JANA, 2010).....	8
Figura 2.4. Coluna diabática com somente uma corrente de troca de calor para cada seção da coluna. (F: alimentação; D: produto de topo ; B: produto de fundo) DE RIJKE (2007).	9
Figura 2.5. CDIIC com detalhe do calor deixando a seção de retificação em direção a seção de esgotamento, e o acoplamento das duas seções da coluna (Fonte: Adaptado de GPROMS, 2010).	11
Figura 2.6. Detalhes da construção da coluna CDIIC em escala industrial no Japão. Cada um dos sete tubos representa um coluna CDIIC onde a seção de esgotamento se apresenta externamente à seção de retificação. (Fonte: Adaptado de JANSENS et al., 2006).	14
Figura 2.7. Fotografia da coluna piloto no Japão (Fonte: JANSENS et al., 2006)	15
Figura 2.8. Estrutura de uma coluna individual presente na planta piloto da configuração CDIIC japonesa (Fonte: NAKANISHI et al., 2008).	16
Figura 2.9. Detalhes de uma coluna recheada (conjunto de dois tubos anulares) utilizada na planta piloto da configuração CDIIC no Japão (fonte: Adaptado de NAKANISHI et al., 2008).	16
Figura 2. 10. Vista lateral da configuração CDIIC com painéis de troca de calor alocados na seção de esgotamento (área ativa do prato) de tal coluna. A parte central corresponde à seção de retificação e as setas representam o sentido do vapor na seção de retificação e esgotamento (Fonte: DE RIJKE, 2007).	18
Figura 2.11. Vista superior da CDIIC concêntrica com alocação dos painéis de troca de calor na seção de esgotamento (Fonte: DE RIJKE, 2007).	18
Figura 2.12. Esquema do evaporador externo (à esquerda), a fotografia de um painel unitário (no centro), e (à direita) segue uma fotografia de um estágio acoplado com um conjunto de painéis de troca de calor (Fonte: Adaptado de JANSENS et al., 2006).	19
Figura 2.13. Foto da coluna CDIIC em escala laboratorial (à esquerda), possíveis locais de alocação dos painéis na coluna (à direita) (Fonte: JANSENS et al., 2006).	20
Figura 2.14. Figura ilustrativa da troca térmica ocorrendo com a utilização de painéis na seção de esgotamento objetivando maior troca térmica (Fonte: GADALLA et al., 2007).21	21
Figura 2.15. Situação geral do escoamento do fluido pelo painel na retificação e no esgotamento (Fonte: Adaptado de GADALLA et al., 2007).	21
Figura 2.16. (a) Painéis de troca de calor alocados no vertedouro da coluna (downcomer) e (b) painéis de troca de calor alocados na região do regime espuma do prato (Fonte: DE RIJKE 2007).	22
Figura 2. 17. (a) painel de troca de calor (b) distribuidor de líquido com defletores e (c) painéis de troca térmica usados no vertedouro com aparatos de distribuição de líquido (a+b) (Fonte: Adaptado de DE RIJKE, 2007).	23
Figura 2.18. Mecanismo da transferência de calor em uma superfície genérica na nova configuração CDIIC (Fonte: HASHIMOTO, 2006).	25

Figura 2. 19. Figura ilustrativa do escoamento de um fluido descendente no regime laminar ondulatório com número de Reynolds = 282. (Fonte: KARABELAS, 2003).....	27
Figura 2.20. Perfil de velocidade do escoamento de um fluido descendente em regimes distintos (Fonte: Adaptado de WEISE, 2007).	28
Figura 2.21. Evolução do escoamento de um fluido descendente em uma superfície vertical (Fonte: Adaptado de WEISE, 2007).	28
Figura 2.22. Processo de remoção de líquido de uma superfície na condensação em forma de gotas.	36
Figura 2.23 Gráfico utilizado para encontrar o valor do coeficiente de Descarga C_v (Fonte adaptada: Adaptado de KISTER 1992).	41
Figura 2.24. Principais fatores que afetam a perda de pressão no prato (Fonte: DUARTE e ALMEIDA, 2007).	43
Figura 2.25. Representação esquemática da conexão dos painéis de troca térmica com a coluna de destilação (Fonte: Adaptado de DE RIJKE, 2007).	44
Figura 2.26. Correlação para vazão de arraste de Fair (Fonte: KISTER, 1992).	46
Figura 2.27. Representação gráfica do “Pinch point” energia requerida e fornecida ao processo.	47
Figura 2.28. Sistema benzeno-tolueno representado em um diagrama Entalpia vs Temperatura. (100kmol/h alimentação equimolar; 20 estágios; razão de re-compressão de 2,5: 1,0; 99,5% de benzeno no destilado e 0,5% no fundo) (Fonte: Adaptado de GADALLA et al., 2005).	49
Figura 2.29. Representação de uma coluna de destilação genérica (Fonte: Adaptado de KISTER, 1992).	52
Figura 2.30. Desenho esquemático de um estágio de equilíbrio (Fonte: KISTER, 1992).	52

Figura 3.1. Representação esquemática da CDIIC no ambiente de simulação (Fonte: Adaptado de GADALLA, 2006)	72
Figura 3.2. Diagrama esquemático da estrutura interna da CDIIC (Fonte: LEE, 2007).	74
Figura 3.3. Possíveis configurações da CDIIC, seções com diferentes estágios na retificação e esgotamento (DE RIJKE 2007).	76
Figura 3.4. Algoritmo para a análise da viabilidade termodinâmica.	78

Figura 4.1. Colunas ABB1 para produção de Álcool (etanol) hidratado. (Fonte: MEIRELLES, 2006)	84
Figura 4.2. Figura representativa da configuração CDIIC no simulador. (1: alimentação; 2: vapor da seção de esgotamento; 3: vapor após compressão; 4: produto de topo CDIIC; 5: fundo retificação; 6: produto de fundo da CDIIC) (Fonte: TSUN-JEN HO, 2010).	87
Figura 4.3. Diferentes temperaturas alcançadas na retificação da variando-se o aumento de pressão proporcionado pelo compressor.	89
Figura 4.4. Gastos energéticos totais das CDIICs comparadas a coluna convencional (C.C.), levando-se em conta gastos do compressor.	90
Figura 4.5. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor.	91
Figura 4.6. Variação de temperatura entre os estágios termo-acoplados na CDIIC.	92

Figura 4.7. Temperatura na retificação da coluna convencional e de ambas as CDIIC (com e sem painéis) em diferentes aumentos de pressões.....	93
Figura 4.8. Composição molar do Etanol na fase vapor para diferentes pressões e a respectiva comparação com a coluna convencional.	94
Figura 4.9. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados em diferentes aumentos de pressões.....	94
Figura 4.10. Variação da massa de vapor na retificação referente aos estágios termo-acoplados em diferentes aumentos de pressões.....	95
Figura 4. 11. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor, com área fixa de 40 m ² e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.	100
Figura 4.12. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados para CDIIC com painéis para diferentes números de estágios, com área fixa de 40 m ² e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.	101
Figura 4.13. Variação de temperatura entre os estágios termo-acoplados para CDIIC com diferentes números de estágios, com área fixa de 40 m ² e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.	102
Figura 4.14. Composição molar do Etanol na fase vapor para CDIIC com diferentes números de estágios, com área fixa de 40 m ² e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.	103
Figura 4.15. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor para colunas com diferentes números de estágios e troca térmica constante.	106
Figura 4.16. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados para colunas com diferentes números de estágios e troca térmica constante entre os estágios.....	107
Figura 4.17. Variação da área de troca de Térmica necessária para uma troca térmica constante entre os estágios.....	108
Figura 4.18. Valores de coeficiente global para os estágios termo-acoplados da CDIIC (30 estágios; $P_{ret}-P_{esg}= 1,4$ atm) variando-se igualmente o percentual de líquido escoando e de vapor condensando pelos painéis. O percentual é tomado referente ao total de fluido em cada estágio (da seção correspondente de retificação/esgotamento).....	110
Figura 4.19. Gastos energéticos totais das CDIICs comparada a coluna convencional (C.C.), levando-se em conta gastos do compressor.....	114
Figura 4.20. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor com área fixa de troca térmica.....	115
Figura 4.21. Comparação entre os resultados de gastos energéticos para a CDIIC com 30 estágios acoplada com painéis de troca de calor variando-se a pressão entre as seções de esgotamento e retificação. Os resultados correspondem a Análises I e II e coeficiente global constante de 2 kW/m ² K.	116
Figura 4.22. Variação de temperatura entre os estágios termo-acoplados na CDIIC.....	117
Figura 4.23. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados em diferentes cargas de pressões.	118
Figura 4.24. Comparação dos gastos energéticos totais das CDIICs com painéis de troca de calor, levando-se em conta gastos do compressor.....	121
 Figura A.1. Diagrama x-y do sistema etanol-água a 760 mmHg: comparação entre dados experimentais e calculados pelo simulador.	 140

Figura A.2. Diagrama x-y do sistema etanol-água a 2595,5 mmHg: comparação entre dados experimentais e calculados pelo simulador.	141
Figura A.3. Ajuste de modelos termodinâmicos aos valores experimentais à 5171,8 mmHg	142
Figura B.1. Análise geométrica da configuração CDIIC com painéis de troca de calor. (Fonte: Adaptado de GADALLA et al., 2007).....	146

Lista de Tabelas

Tabela 4.1. Especificações da coluna para mistura etanol-água:	88
Tabela 4.2. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:.....	91
Tabela 4. 3. Valores da área de troca térmica por estágio para a CDIIC com painéis variando-se a pressão entre a retificação e o esgotamento:	98
Tabela 4. 4. Especificações da coluna para mistura etanol-água; variação do número de estágios:	99
Tabela 4. 5. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração diferentes números de estágios ($P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$):	100
Tabela 4.6. Diferença de produção diária para diferentes colunas para uma mesma vazão de entrada e especificação do produto.....	104
Tabela 4.7. Quantidade de energia requerida por estágio para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração diferentes números de estágios entre as colunas ($P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$):.....	105
Tabela 4.8. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração diferentes números de estágios entre as colunas ($P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$):..	105
Tabela 4.9. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis e 30 estágios conforme foi variada a pressão entre a seção de retificação e esgotamento:.....	111
Tabela 4.10. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis conforme foi variado o número de estágios:	111
Tabela 4.11. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis e com troca térmica constante:	111
Tabela 4.12. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:.....	114
Tabela 4.13. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis de 30 estágios conforme foi variada a pressão entre a seção de retificação e esgotamento:.....	119
Tabela 4.14. Especificações da coluna para mistura etanol-água:	120
Tabela 4.15. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:.....	122
Tabela 4.16. Gastos energéticos do condensador para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:	122
 Tabela A. 1. Valores dos modelos obtidos pelo simulador e valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) à pressão de 760 mmHg.	 143
Tabela A.2. Valores dos modelos obtidos pelo simulador e valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) à pressão de 2595,5 mmHg.	144
Tabela A.3. Valores dos modelos obtidos pelo simulador e valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) à pressão de 5171,8 mmHg.	145

1. INTRODUÇÃO

Destilação é o processo mais importante de separação física, sendo utilizada em 95% das separações de fluidos na indústria química e é responsável por 3% do consumo da energia mundial (HUMPHREY, 1992; ENGELIEN E SKOGESTAD, 1998). Nos Estados Unidos cerca de 10% da energia consumida na indústria decorre da destilação (BROWN, 1998; SALAMON E NULTON, 1998). Mesmo assim, a eficiência global termodinâmica de uma destilação convencional é por volta de 5-20% (HUMPHREY et al., 1991; DE KOEIJER E KJELSTRUP, 2002).

Mesmo com a grande importância da destilação como processo de separação, observa-se nela uma grande degradação da energia, que ocorre devido às grandes diferenças de temperatura no condensador e no refeedor da coluna. Essa realidade impulsionou diversos estudos, resultando em novas configurações para o processo de destilação. Dentre as diversas configurações propostas, podem ser citadas com maior importância a Recompressão Direta de Vapor (VRC), Destilação Diabática, destilação Múltiplo-efeito e a mais recente, Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC), sendo esta a de maior relevância atualmente (DE RIJKE, 2007).

Embora um menor gasto energético possa ser observado nas diversas configurações apresentadas, em quase todos os processos nota-se um decréscimo na pureza dos produtos. A configuração CDIIC oferece não apenas os menores gastos energéticos dentre as demais configurações, mas também tem a capacidade de aumentar a recuperação do produto (CAMPBELL, 2008).

Por diminuir a quantidade de energia requerida no refeedor da coluna, a CDIIC também apresenta efeitos positivos, tais como, menor emissão de CO_2 dentre outros aspectos ambientais positivos (GUTIÉRREZ et al., 2011).

A CDIIC agrega vantagens da re-compressão de vapor e da operação diabática para o seu funcionamento. Consiste da separação da coluna usual nas suas duas seções características (retificação e esgotamento) e do acoplamento térmico destas. A seção de retificação (onde geralmente se tem uma temperatura mais baixa), após a re-compressão do vapor proveniente da seção de esgotamento, fica em uma temperatura mais elevada. Com

isso no acoplamento, é propiciada a situação na qual o calor flui da seção de retificação para seção de esgotamento (DE RIJKE 2007).

Atualmente, dois grupos de pesquisa se destacam mundialmente nos avanços tecnológicos de estudo e implementação da CDIIC. Um grupo situado no Japão e outro na universidade Tecnológica de DELF na Holanda.

Grande parte dos estudos ministrados até o presente momento, tanto nos centros de pesquisa que possuem a coluna quanto naqueles que não a possuem, se apresentam na forma de simulações da CDIIC em simuladores comerciais. É feita uma aproximação genérica para a CDIIC nos simuladores através de um arranjo dos seus blocos de cálculos.

Embora pesquisas na CDIIC tenham alcançado testes em escalas industriais, o número de metodologias para o desenvolvimento da coluna no âmbito das simulações abrange poucas delas e essas não são muito claras (SUPHANIT, 2010).

A aplicação a CDIIC para a mistura etanol-água é de grande interesse no país, principalmente pelo Brasil ser um dos maiores produtores de bioetanol do mundo (segundo maior produtor e maior exportador mundial).

O etanol, ou bioetanol, que é produzido nas usinas canavieiras do Brasil, tem uma grande relevância na produção de combustíveis alternativos ao petróleo para veículos automotores em todo o mundo. Não obstante, este pode ser utilizado como matéria prima na produção de diferentes produtos químicos produzidos normalmente a partir de derivados do petróleo, como o etileno (JUNQUEIRA, 2010).

O presente trabalho apresenta como objetivo a obtenção de resultados da simulação da configuração CDIIC para a separação da mistura etanol-água, como uma aproximação teórica simplificada da mistura proveniente do processo de fermentação em uma usina sucro-alcooleira. Sendo a destilação o processo mais utilizado para a separação do etanol após processo de fermentação e, sendo este, um dos processos que mais demandam energia na planta industrial, um estudo comparativo da destilação convencional em relação CDIIC foi realizado. A diminuição do gasto energético da destilação prevê menores custos de produção do etanol e, conseqüentemente, um maior retorno de capital para as empresas.

1.1 Organização da dissertação e objetivos:

O trabalho apresentará a seguinte divisão: contextualização da nova configuração (coluna de destilação com integração interna de calor (CDIIC)) no cenário virtual

(simulação) reunindo a maior quantidade de informações possíveis para sua realização. Posteriormente o trabalho tomou foco no sentido da escolha da mistura a ser trabalhada e simulada na coluna CDIIC. (As simulações foram realizadas no simulador de processos Aspen Plus[®], por não ser trivial somente o uso deste software, a utilização do software Excel também foi necessária em conjunto com o Aspen Plus[®]) Dessa forma, os objetivos principais do trabalho foram:

- Modelar a configuração da CDIIC no Simulador de Processos ASPEN PLUS. Por se tratar de uma configuração não convencional, este simulador (como qualquer outro disponível) não possui este como arranjo de Operação Unitária. Necessitando simular situações criando estratégias de convergência. Em se tratando de simulador comercial, muitas facilidades serão encontradas e poderão ser implementadas, além do vasto banco de dados e de equações disponíveis.
- Obter resultados das Simulações, dentre outros de: coeficientes de transferência de calor global das placas na área ativa do prato em função da diferença de temperatura entre as seções de retificação e de esgotamento da coluna fracionadora; eficiência de prato global em função dos fluxos na coluna; determinar a variação da temperatura em função dos estágios (prato - aqui estes dois termos serão chamados de forma equivalente) da coluna; e taxa de transferência de calor em função da diferença de pressão nas duas seções da coluna; cálculo do calor do refeedor nas configurações estudadas e comparação com o projeto convencional; e avaliação termodinâmica das configurações.
- Simular a CDIIC para a mistura etanol-água;

A dissertação será dividida em quatro partes principais: Revisão bibliográfica, Materiais e Métodos, Análise e Discussão dos Resultados e Conclusões. Na Revisão bibliográfica será realizada uma revisão das tecnologias para diminuição dos gastos energéticos, uma revisão correspondente a todos os cálculos utilizados na dissertação também serão inseridas nessa parte do trabalho. Em Materiais e Métodos uma descrição detalhada de como é feita a simulação será realizada. Na Análise e Discussão dos Resultados será apresentado um estudo de caso relacionado à produção Álcool Hidratado Etilico Carburante (AHEC) onde se aproximou a solução após a fermentação a uma mistura

binária (etanol-água). No estudo de caso uma comparação entre os gastos energéticos de uma coluna convencional com relação à CDIIC será realizada.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA:

Nesta revisão esta apresentada inicialmente algumas das muitas tecnologias para diminuição dos gastos energéticos da destilação que surgiram ao longo dos anos até alcançar a Coluna de Destilação com Integração Interna de Calor (CDIIC). Uma amostra de algumas das diferentes configurações CDIIC existentes será mostrada com um enfoque maior na CDIIC com painéis de troca de calor e em seus equipamentos específicos (que foi a utilizada nas simulações do trabalho e potencialmente mais econômica).

Posteriormente, uma descrição de como ocorre a troca térmica, a teoria envolvida na troca de calor e um detalhamento das equações/correlações a esse respeito, será feita. A teoria com relação à modelagem matemática específica da CDIIC, as teorias envolvidas para os cálculos necessários para as simulações (perda de carga), metodologia *Pinch* aplicada na CDIIC, CDIIC ideal. Eficiência de pratos e caracterização termodinâmica do sistema também serão apresentadas.

Tem-se como foco abranger toda a teoria envolvida nos cálculos da dissertação.

2.1 Tecnologias no campo da destilação para aumento da eficiência energética

Para melhorar a eficiência energética dos processos de separação por destilação, algumas técnicas de integração energética foram propostas e evoluíram para a configuração CDIIC, a qual será o objeto de estudo desse projeto. Algumas dessas tecnologias e suas evoluções são: Coluna Múltiplo-efeito; Re-compressão direta de vapor (VRC); Coluna de destilação Diabática.

2.1.1 Coluna Múltiplo-efeito

Aplica um conceito parecido com o conceito da evaporação multi-efeito, onde o vapor do efeito anterior é utilizado para aquecer o próximo efeito, conforme exposto na Figura 2.1. Sua utilização é preferível em colunas que operam em conjunto, tais como aplicações na destilação de Usinas de açúcar e álcool (JUNQUEIRA, 2010).

A idéia básica da destilação multi-efeito é usar a energia contida no vapor do topo de uma coluna para suprir parte do calor requerido no refeedor da coluna posterior (DE RIJKE, 2007). A fim de promover a diferença de temperatura necessária para a realização

do sistema multi-efeito, as colunas devem ser operadas com diferenças de pressões entre elas (LINNHOFF, 1993; GLENCHUR e GOVIND, 1987; LANG, 1996).

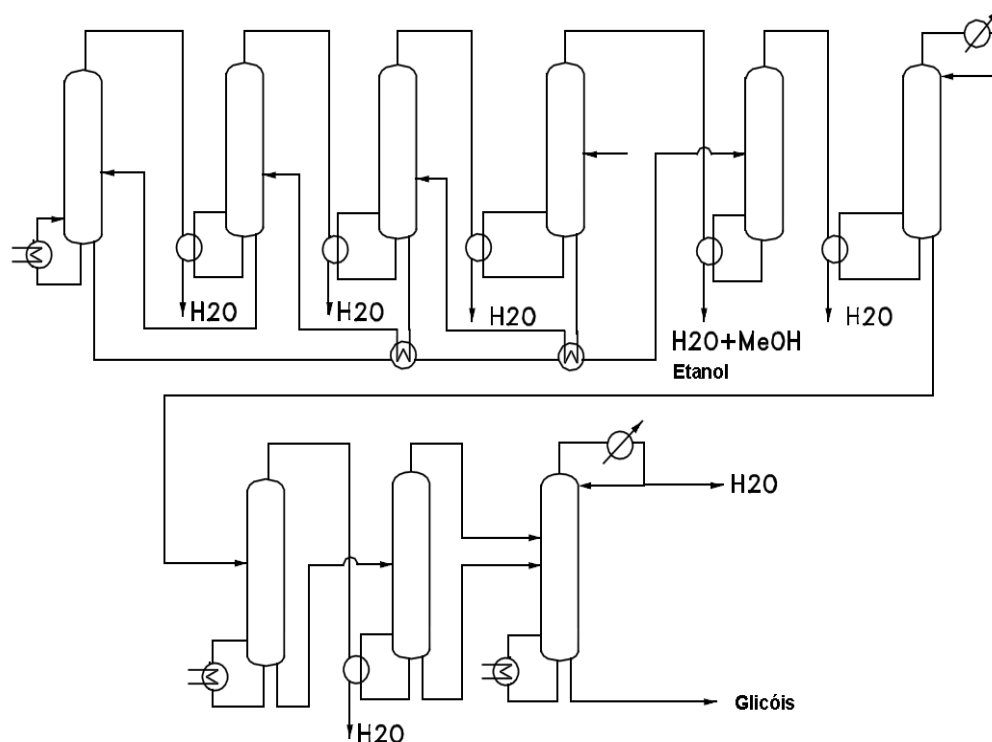


Figura 2.1. Típico processo de destilação múltiplo-efeito (Desidratação de Glicóis) (Fonte: TSUN-JEN HO, 2010).

Este tipo de arranjo tem provado substancialmente uma menor demanda de energia para sua realização. O que não possibilita esse sistema de ser comercializado, entretanto, são suas dificuldades operacionais; por possuir um sistema não linear, multi-variável e de natureza iterativa (JANA, 2010).

2.1.2 Recompressão direta de vapor (VRC)

Foi introduzida como uma alternativa para o aumento da eficiência energética na destilação em processos químicos e petroquímicos depois da crise do petróleo de 1973. Ao contrário da destilação multi-efeito, é necessária somente uma coluna para realização da recompressão direta de vapor (JANA, 2010).

A VRC é considerada muito efetiva, pois ela ataca o problema na fonte no que diz respeito a introduzir e remover o calor em um processo de destilação. Consiste basicamente

na re-compressão do vapor de topo, com isso a temperatura do vapor aumenta a um patamar considerável, possibilitando, assim, trocar calor deste com o refeedor da mesma coluna. Apesar da re-compressão direta de vapor parecer muito promissora, ela só é viável para misturas com pontos de ebulição muito próximos. (DE RIJKE, 2007)

Embora a re-compressão direta de vapor ser vantajosa, com respeito a baixas demandas de energia requeridas para separação de misturas com pontos de ebulição próximos, ela ainda tem um custo muito elevado para sua realização (JANA, 2010).

Para melhorar a tecnologia de re-compressão de vapor, aparte da melhora da eficiência do compressor, outras formas avançadas de apresentar essa configuração baseadas em absorção e adsorção têm sido desenvolvidas para processos de destilação (PADILLA E RODRÍGUEZ, 2007; DAWOUND et al., 2007).

A Figura 2.2 apresenta um modelo esquemático que simboliza a re-compressão direta de vapor.

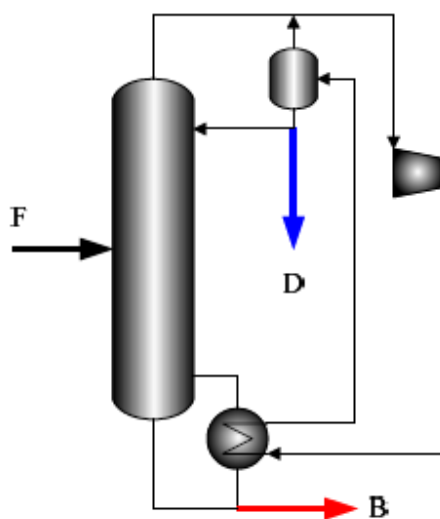


Figura 2.2. Figura esquemática que simbolizando a re-compressão direta de vapor. (F: alimentação; D: produto de topo; B: produto de fundo) (Fonte: TSUN-JEN HO, 2010).

Apesar da VRC tratar-se de uma tecnologia promissora, foi mostrado que uma coluna de destilação com integração interna de calor (CDIIC), que será abordada em 2.1.4, leva a uma economia de energia de 30 a 40% em comparação a ela (OLUJIC et al., 2008).

2.1.3 Coluna de destilação Diabática

A destilação diabática é outra alternativa para se ter economia no gasto energético. Trata-se também de uma tecnologia onde somente uma coluna é utilizada.

A coluna diabática substitui o refeedor e o condensador, normalmente conectados no fundo e no topo de uma coluna convencional por um condensador e um refeedor integrados na seção de retificação e na seção de esgotamento, respectivamente. Em virtude do gradual fornecimento/remoção de calor ao longo da seção de esgotamento e da seção de retificação, benefícios de um uso mais eficiente de calor de condensação e de calor de evaporação são oferecidos. A troca térmica acontece em baixas diferenças de temperatura, o que implica em pequenas perdas energéticas associadas com a transferência de calor (DE RIJKE, 2007).

De acordo com Jana (2010) nas primeiras introduções do conceito da coluna diabática, as trocas de calor eram realizadas por correntes quentes e frias entrando em todos os estágios (Figura 2.3), o que acarretava em problemas de arranjo configuracional e aumento de custo. Para solucionar esses problemas Rivero (1993) e Le Goff et al. (1996) simplificaram a coluna diabática utilizando somente um cruzamento de dois trocadores de calor na totalidade da coluna, sendo um deles na seção de esgotamento e o outro na seção de retificação como segue na Figura 2.4.

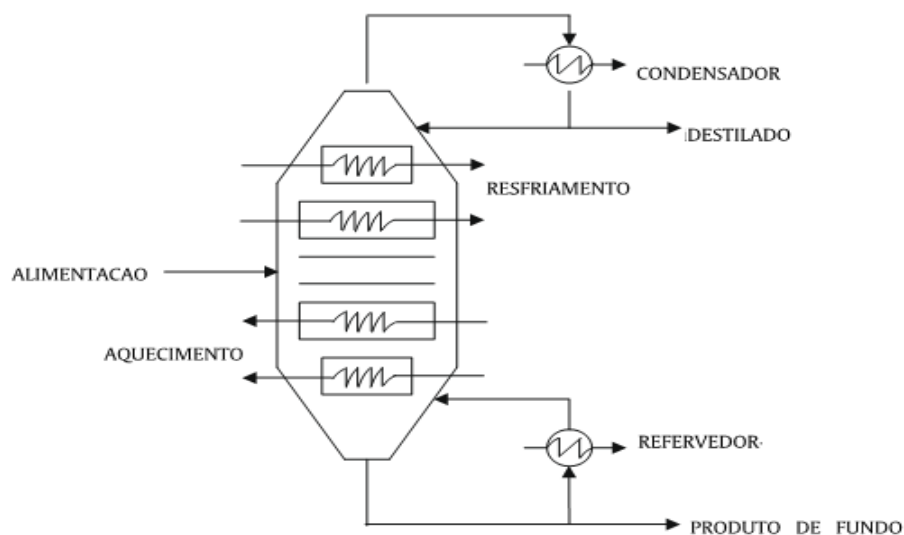


Figura 2.3. Coluna diabática com trocas de calor em todos os estágios. (Fonte: Adaptado de JANA, 2010)

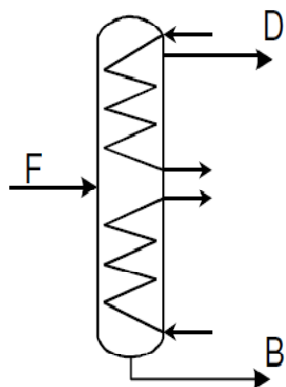


Figura 2.4. Coluna diabática com somente uma corrente de troca de calor para cada seção da coluna. (F: alimentação; D: produto de topo ; B: produto de fundo) DE RIJKE (2007).

A grande dificuldade em se trabalhar com esse tipo de colunas (além do investimento mais elevado para se produzir tal coluna) é a dificuldade em determinar temperaturas ótimas e perfis de temperatura que assegurem que a operação tenha uma minimização da entropia utilizada (JANA, 2010).

2.1.4 Coluna de destilação com integração interna de calor (CDIIC)

A coluna de destilação com integração interna de calor (CDIIC) é a mais promissora tecnologia no intuito de se economizar energia no processo de destilação. Ela combina as vantagens da re-compressão direta de vapor com vantagens da destilação diabática (DE RIJKE, 2007).

O princípio básico de uma coluna de destilação convencional consiste na subdivisão desta em duas partes, uma acima da alimentação chamada de seção de retificação e uma abaixo da alimentação chamada de seção de esgotamento (isto em uma conotação teórica, pois na prática tem-se somente uma coluna).

A seção de retificação tende a concentrar os componentes mais voláteis no topo da, enquanto que a seção de esgotamento faz o oposto. Necessariamente, a seção esgotamento possui temperatura mais elevada que a seção de retificação, mostrando um perfil de diminuição de temperatura do fundo para o topo da coluna.

A coluna de destilação com integração interna de calor atua aumentando a temperatura da seção de retificação colocando esta em contato direto com a seção de

esgotamento, fazendo-as trocar calor, provendo parte, ou toda energia, necessária a ser adicionada e retirada da coluna.

Inicialmente, se separam as duas seções da coluna convencional, fazendo-se um rearranjo de forma a colocar a seção de retificação dentro da seção de esgotamento. Assim, a seção de retificação pode entrar em contato térmico com a seção de esgotamento.

O conceito da re-compressão direta de vapor é utilizada nessa configuração porque o vapor proveniente da seção de esgotamento é re-comprimido. O vapor re-comprimido caminha na direção da seção de retificação que se encontra dentro da seção de esgotamento. Com a re-compressão, é esperado que o vapor, entrando na seção de retificação, promova um perfil de temperatura maior nesta seção que o corresponde ao perfil de temperatura na seção de esgotamento. Com uma temperatura maior, o calor (que é uma energia em trânsito) se move da seção de retificação rumo à seção de esgotamento como pode ser visto na Figura 2.5.

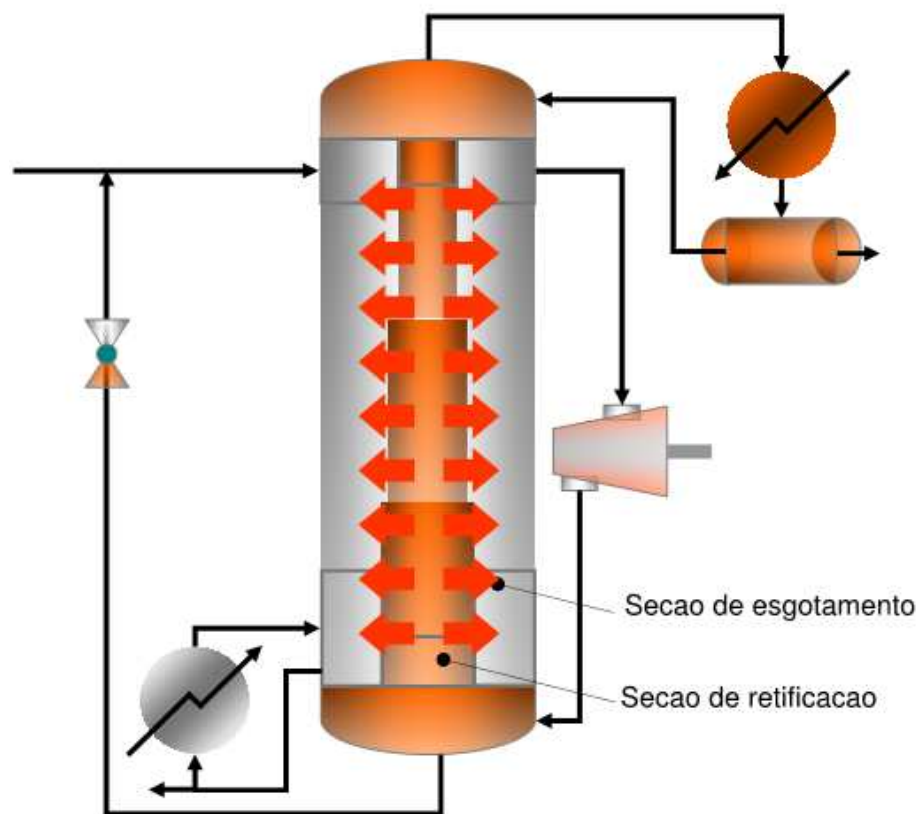


Figura 2.5. CDIIC com detalhe do calor deixando a seção de retificação em direção a seção de esgotamento, e o acoplamento das duas seções da coluna (Fonte: Adaptado de GPROMS, 2010).

Como pode ser inferenciado do que já foi dito, um gradiente de temperatura existente é o que faz com que as trocas de calor aconteçam. Devido às trocas térmicas se realizarem, evidencia-se uma condensação contínua na seção de retificação e uma evaporação contínua na seção de esgotamento.

O primeiro a aplicar uma análise termodinâmica extensiva ao processo de destilação e sugerir a transferência de calor da seção de retificação a seção de esgotamento foi Freshwater (1961). Flower e Jackson (1964) sistematizaram a idéia e deixaram claras as vantagens dessa aproximação através de simulações baseadas na segunda lei da termodinâmica. Tratando do mesmo princípio, Fitzmorris e Mah (1980) e Mah et al. (1977) avaliaram o conceito da CDIIC com o nome “Secondary Reflux a Vaporization” (SRV);

pela primeira vez, eles estabeleceram um processo geral de configuração para aproximar o modelo teórico, baseado na segunda lei da termodinâmica. Durante os anos 70 e 80, algumas patentes foram propostas (HASELDEN, 1977; SEADER, 1980; GOVIND, 1986; 1987). Desde 1985, Nakaiwa vem trabalhando com CDIIC teoricamente e experimentalmente e confirmou por avaliações experimentais as vantagens de colunas com integração interna de calor. Takamatsu et al. (1996) introduziu os conceitos da CDIIC ideal que opera sem condensador e sem refeedor (NAKAIWA et al., 2003).

Em 2000 o grupo de Tecnologia de separação da universidade tecnológica de Delft (TU Delft) começou a investigar CDIIC focados principalmente em problemas relacionados à implementação, configuração, e eficiência da CDIIC (DE RIJKE, 2007).

A patente de De Graauw et al. (2004) trata de uma CDIIC concêntrica na qual a seção retificação a pressões mais altas fica envolta a uma seção de esgotamento a pressões mais baixas. Painéis de transferência de calor podem ser colocados nas seções de esgotamento ou retificação para obter uma larga e variável área de transferência de calor (GADALLA, 2004).

2.2 Diferentes aplicações e configurações da CDIIC

Diferentes tecnologias configuracionais para a CDIIC vem sendo desenvolvidas, o maior desafio delas é promover uma área de troca de calor compatível com as pretensões de diminuição energética.

Uma busca no intuito de se aumentar a área de troca calor na área ativa do prato foi feita desde os primeiros estudos com a CDIIC, principalmente por pesquisadores japoneses e holandeses, sendo que, na Holanda, pelos pesquisadores da Universidade de TU Delft.

Dentre as principais configurações para a CDIIC tem-se:

- a) coluna concêntrica (GADALLA; RIJKE; OLUJIC; JANSSENS; NAKAIWA)
- b) coluna concêntrica com configuração multi-tubo (Shell & Tube Column);
- c) coluna concêntrica com a introdução de painéis para realização de trocas de calor
- ;
- d) coluna compacta com trocador de calor (Plate-fin column).

Um maior detalhamento das diferentes CDIICs citadas segue no próximos itens;

2.2.1 Colunas Concêntricas

Como o próprio nome diz, trata-se das seções da coluna dispostas de forma concêntrica com a seção de retificação dentro da seção de esgotamento. O conceito foi proposto para colunas de pratos, com a área de troca de calor correspondente à parede da coluna da seção de retificação (DE RIJKE, 2007).

Conceitualmente, a seção de retificação, que está dentro da seção de esgotamento, está a uma temperatura maior e a uma pressão maior que a seção de esgotamento. Dessa forma, o calor tende a fluir naturalmente da seção de retificação para a seção de esgotamento.

2.2.2 Colunas Multi-Tubos (Shell & Tube Column)

Na tentativa de solucionar os problemas de pequenas áreas para trocas de calor na CDIIC concêntrica, foi desenvolvida como alternativa a coluna multi-tubos. A patente foi proposta por ASO et al. (1998).

Seu projeto se assemelha a um trocador de calor casco-tubo, desta forma, tem-se um trocador de calor de fracionamento ao invés de uma coluna de destilação com troca térmica (DE RIJKE, 2007). Assim como na coluna concêntrica, o calor pode apenas ser transferido para a seção de esgotamento, que é configurada ao redor dos tubos (o interior destes tubos representam à seção de retificação).

2.2.2.1 Planta piloto do Japão:

O exemplo em escala industrial da CDIIC multi-tubos pode ser encontrada no Japão. A planta piloto da CDIIC foi construída e operada em 2005 na fábrica de Chiba da Petroquímica Maruzen Co., Ltd. É uma absorvedora de ciclopentano de uma corrente de 12 componentes destilados da gasolina. A CDIIC piloto tem 22,8 m de altura e 1,4 m de diâmetro. Ela consiste de 07 tubos inseridos dentro de uma coluna externa a estes (Figura 2.6); cada um dos tubos possui um tubo interno. O diâmetro foi alterado 3 vezes (165 mm, 216 mm e 267 mm) e o diâmetro da coluna externa foi fixado a 406 mm.

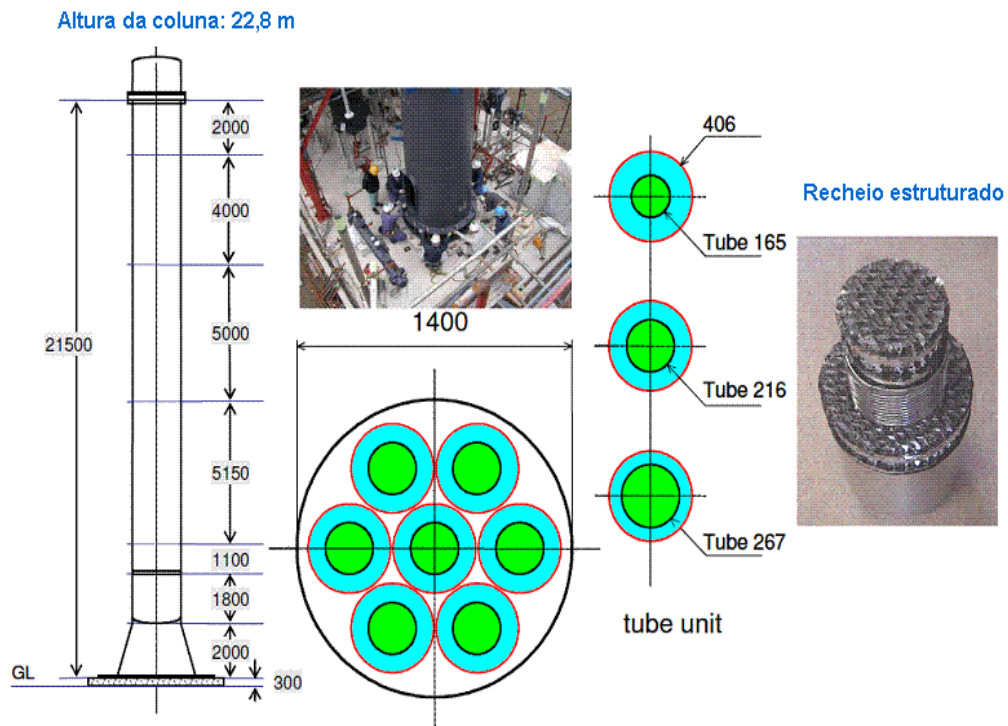


Figura 2.6. Detalhes da construção da coluna CDIIC em escala industrial no Japão. Cada um dos sete tubos representa um coluna CDIIC onde a seção de esgotamento se apresenta externamente à seção de retificação. (Fonte: Adaptado de JANSSENS et al., 2006).



Figura 2.7. Fotografia da coluna piloto no Japão (Fonte: JANSENS et al., 2006)

O projeto da coluna multi-tubos existente no Japão possui algumas peculiaridades. A coluna é desenvolvida com recheio e não pratos; este é preenchido em ambas as seções, esgotamento e retificação. São denominadas seções visto que cada tubo (conjunto de dois tubos anulares) funciona como uma coluna CDIIC. As colunas funcionam em paralelo e são agrupadas em uma única coluna externa assim como foi ilustrado na Figura 2.7. Mais detalhes sobre cada coluna individual e do recheio destas pode ser visualizado nas Figuras 2.8 e 2.9 a seguir:

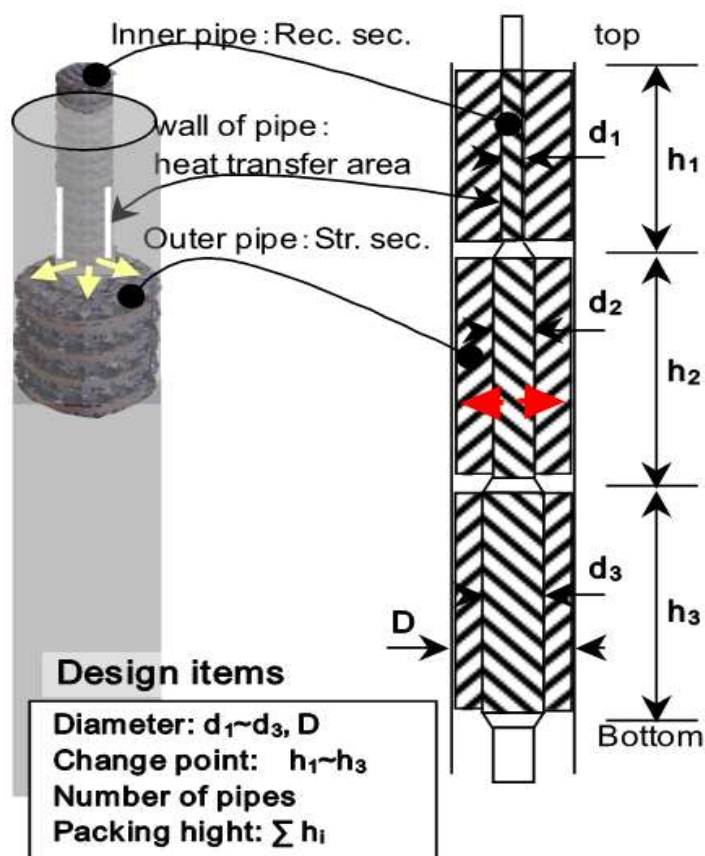


Figura 2.8. Estrutura de uma coluna individual presente na planta piloto da configuração CDIIC japonesa (Fonte: NAKANISHI et al., 2008).



Figura 2.9. Detalhes de uma coluna recheada (conjunto de dois tubos anulares) utilizada na planta piloto da configuração CDIIC no Japão (fonte: Adaptado de NAKANISHI et al., 2008).

A Figura 2.9 mostra detalhes de como se apresenta o recheio. É importante também ressaltar sobre o revestimento da seção de retificação (chamado de “espiral de arame”), que trata de uma superfície corrugada e que tem como finalidade assegurar a troca de calor e ao mesmo tempo espalhar uma apropriada quantidade de líquido no recheio da seção de esgotamento (NAKANISHI et al., 2008).

2.2.3 Coluna de trocador de calor de aletas (Plate-fin column)

Esta coluna se assemelha a um trocador de calor de placas. Esse arranjo consiste em um número de placas planas paralelas com placas intermediárias corrugadas (aletas). As placas planas separam as correntes do processo e promovem uma troca de calor primária. As aletas promovem uma superfície secundária de troca de calor. Na aplicação da CDIIC, o trocador de calor placa-aleta (P.F.H.E.-Plate Fin Heat Exchanger) é arranjado para fluxos verticais e paralelos que alterna em camadas o esgotamento e a retificação. Em cada camada há um fluxo contracorrente de gás e líquido, com o líquido fluindo para baixo na forma de um filme nas paredes. Dentro de cada camada, as aletas podem (dependendo do tipo de aleta) dividir o espaço em um determinado número de passagens paralelas (HUGILL e DORST, 2005).

Os estudos mais recentes foram veiculados por Hugill e Dorst (2005), que estudou vários arranjos diferentes no que diz respeito ao comprimento e espaçamento das aletas.

2.2.4 Coluna concêntrica com painéis de troca térmica

De Graauw et al. (2004) fizeram a patente de uma CDIIC concêntrica equipada com painéis para troca de calor. Os painéis podem ser posicionados tanto na seção de retificação quanto na seção de esgotamento.

Pela maior área disponível, a alocação dos painéis na seção de esgotamento tem maior aceitação. Para esse arranjo existe uma grande complexidade no desenho e no projeto de tal coluna além do grande investimento fixo (Figuras 2.12 e 2.13) (JANA, 2010).

As vantagens de tal coluna residem principalmente na grande e flexível área de troca de calor. Ela permite ao designer da coluna excluir certos estágios para troca de calor

se necessário, porém tem a desvantagem de se apresentar com uma complexidade muito elevada para implementação industrial (DE RIJKE, 2007).

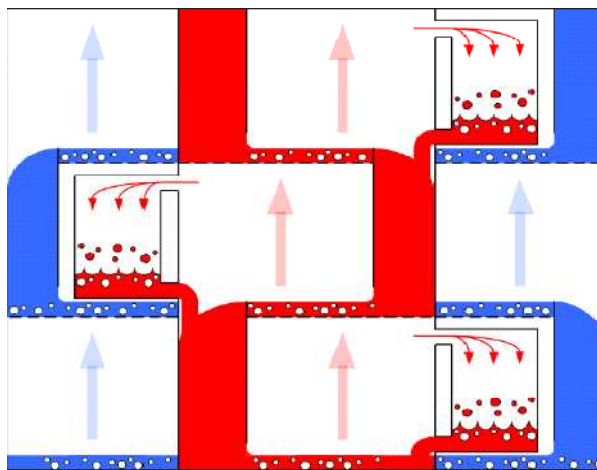


Figura 2.10. Vista lateral da configuração CDIIC com painéis de troca de calor alocados na seção de esgotamento (área ativa do prato) de tal coluna. A parte central corresponde à seção de retificação e as setas representam o sentido do vapor na seção de retificação e esgotamento (Fonte: DE RIJKE, 2007).

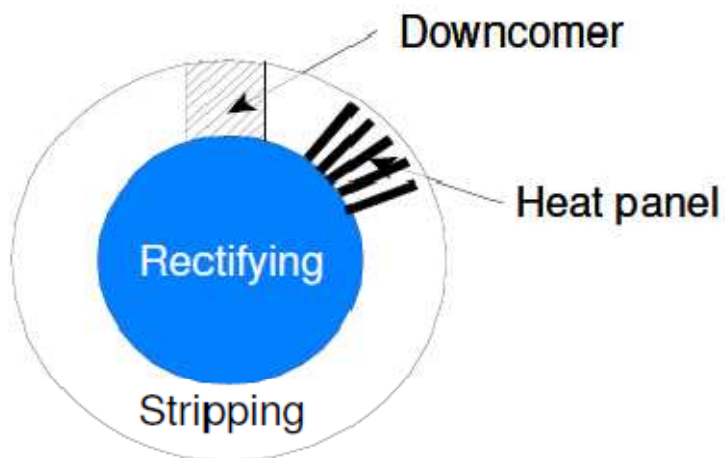


Figura 2.11. Vista superior da CDIIC concêntrica com alocação dos painéis de troca de calor na seção de esgotamento (Fonte: DE RIJKE, 2007).

2.2.4.1 Planta piloto escala experimental universidade TU Delft

Pesquisadores da Universidade de Tecnológica de Delft na Holanda (Z. OLUJIC, L. SUN, M. GADALLA, A. DE RIJKE, P. J. JANSENS) realizaram uma série de experimentos em uma planta piloto em escala laboratorial alocando painéis de troca de calor em locais distintos de uma coluna CDIIC (no vertedouro e na área ativa do prato). O objetivo da introdução dos painéis visa o aumento da superfície de troca térmica e consequente diminuição de energia gasta no refeedor.

De maneira simplificada, a coluna experimental trata somente da seção de esgotamento da nova configuração onde são alocados os painéis de troca de calor (Figura 2.14 e 2.15). Os painéis são alimentados com vapor proveniente de um sistema de geração de vapor externo à coluna (Figura 2.14), os painéis trocam calor com a mistura presente no prato, que está sendo destilada. O vapor alimentado nos painéis simula o vapor proveniente da seção de retificação da configuração CDIIC.

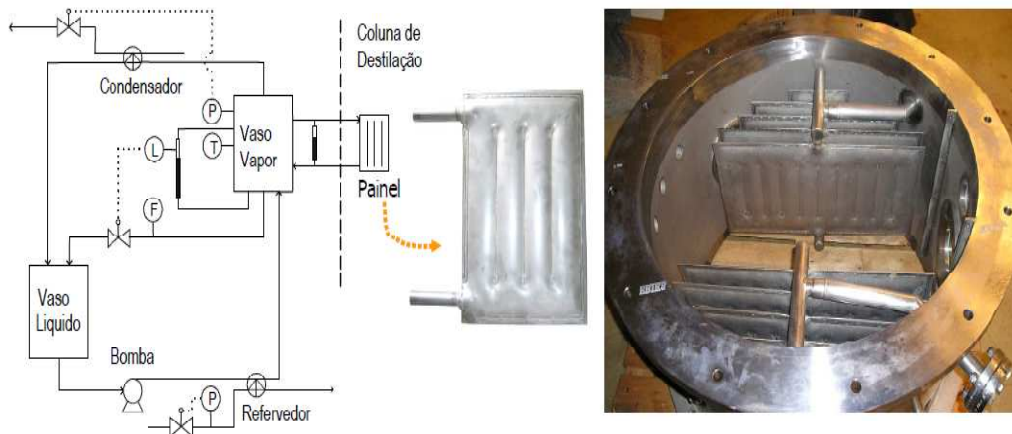


Figura 2.12. Esquema do evaporador externo (à esquerda), a fotografia de um painel unitário (no centro), e (à direita) segue uma fotografia de um estágio acoplado com um conjunto de painéis de troca de calor (Fonte: Adaptado de JANSENS et al., 2006).



Figura 2.13. Foto da coluna CDIIC em escala laboratorial (à esquerda), possíveis locais de alocação dos painéis na coluna (à direita) (Fonte: JANSENS et al., 2006).

2.2.4.2 Estudos com painéis de troca de calor

Em uma típica configuração concêntrica com painéis alocados na seção de esgotamento, o vapor (proveniente da seção de retificação) entra no painel, enquanto os fluxos líquidos frios (provenientes da seção de esgotamento) entram em toda a superfície externa (Figuras 2.16 e 2.17). Devido a diferença de temperatura, o vapor se condensa dentro do painel e os líquidos vaporizam-se na superfície externa do painel Gadalla (2005). Maiores detalhes podem ser vistos na Figuras 2.16 e 2.17.

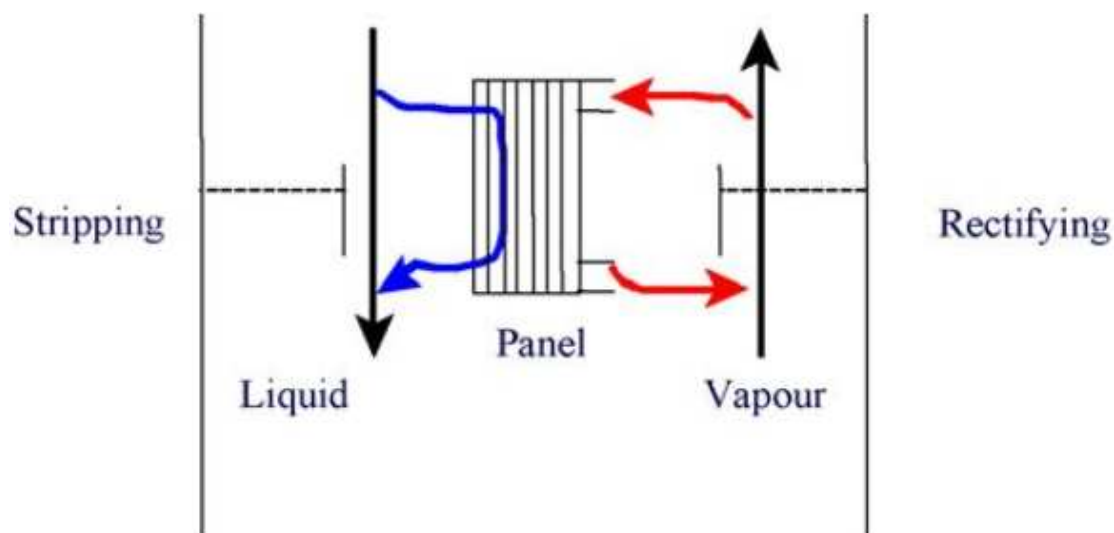


Figura 2.14. Figura ilustrativa da troca térmica ocorrendo com a utilização de painéis na seção de esgotamento objetivando maior troca térmica (Fonte: GADALLA et al., 2007).

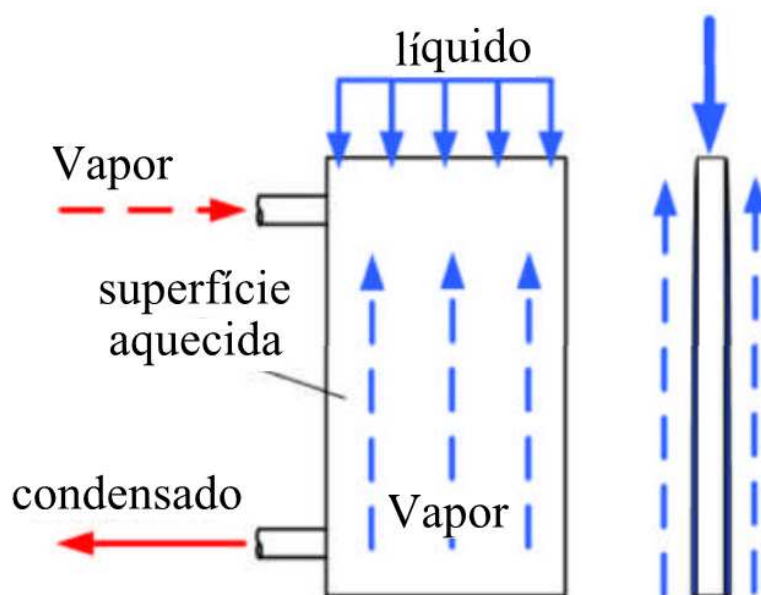


Figura 2.15. Situação geral do escoamento do fluido pelo painel na retificação e no esgotamento (Fonte: Adaptado de LEE, 2007).

Tratando-se de painéis de troca de calor, é esperado verificar um escoamento do líquido da seção de esgotamento por toda a superfície do painel de troca de calor. Nessa situação a troca de calor torna-se a mais alta possível (GADALLA et al., 2007).

De Rijke (2007), em seu trabalho com a coluna experimental da Universidade Tecnológica Delft descreveu rigorosamente a troca de calor que podia existir na coluna; tentativas de correlacionar os valores experimentais com valores teóricos obtidos com correlações específicas para as trocas de calor foram realizadas. Foram testados dois locais possíveis para a alocação dos painéis. O primeiro local onde os painéis foram alocados foi na região do regime de espuma do prato (área ativa). Outro local estudado para alocação dos painéis foi colocá-los no vertedouro da coluna experimental (Figura 2.18). O vertedouro de escoamento de líquido na Figura 2.18 mostra-se claramente superdimensionado, isso se deve ao fato de este poder proporcionar a alocação dos painéis de troca térmica. Os painéis alocados na área ativa do prato foram mais estudados porque estes mostram uma situação mais realista que poderá ser mais facilmente verificada em escala industrial. Os painéis de troca de calor alocados no vertedouro (*downcomer*) trazem consigo uma dificuldade extra de configuração e geometria no que diz respeito à coluna de retificação, portanto, estes possuem menor relevância.

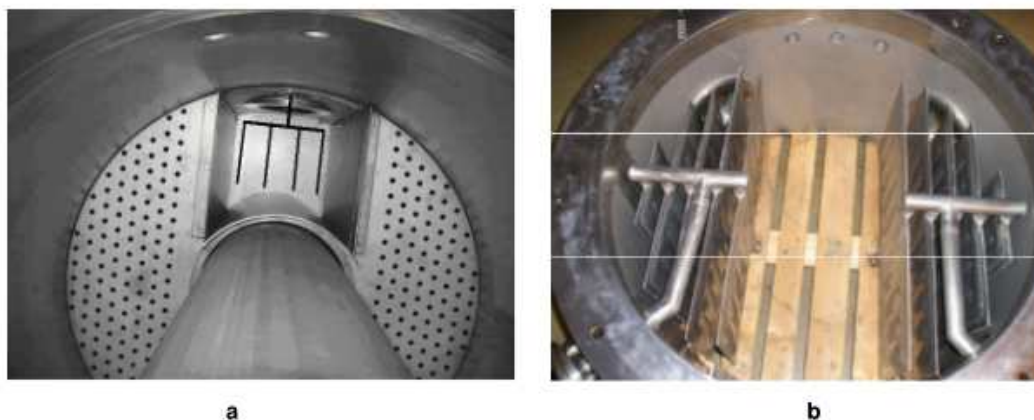


Figura 2.16. (a) Painéis de troca de calor alocados no vertedouro da coluna (*downcomer*) e (b) painéis de troca de calor alocados na região do regime espuma do prato (Fonte: DE RIJKE 2007).

Um entendimento melhor deve ser dado com relação ao comportamento do fluido nas superfícies de troca de calor. Uma questão um tanto quanto relevante é com respeito de como acontece a troca de calor nos painéis de troca de calor e também de como é proporcionado o escoamento de líquido através da placa (painel). Como já abordado, os painéis de troca de calor na coluna experimental de que se tem informação (pertencente à

Universidade de TU DELF) foram alocados na área de regime de espuma do prato e no vertedouro (*downcomer*) da coluna.

No que se refere a colocar os painéis no vertedouro é perceptível que o líquido presente no prato irá passar em sua totalidade pelos painéis de troca de calor. Geralmente, para melhor espalhar e promover um melhor escoamento descendente de líquido pela superfície do painel, utiliza-se um distribuidor de líquido com defletores que é colocado na parte superior do conjunto de painéis. Em (c) da Figura 2.19 pode se verificar melhor como é utilizado o aparato para distribuição do líquido nos painéis alocados no vertedouro.

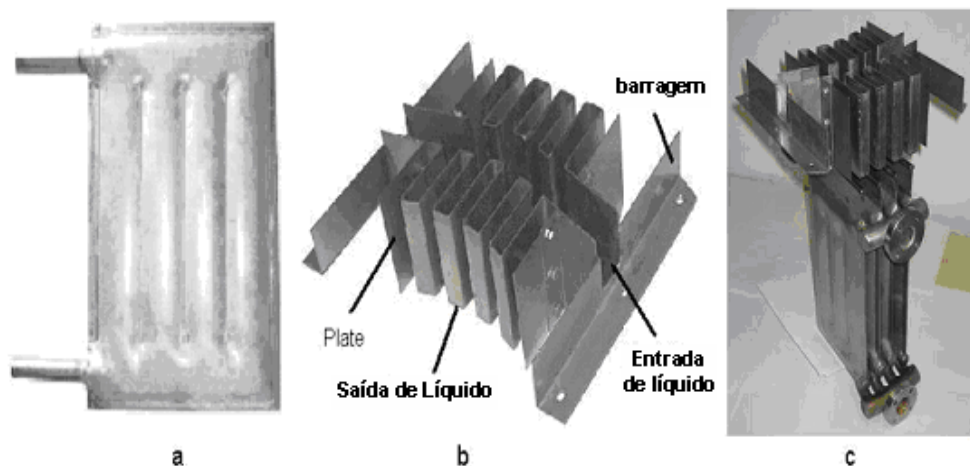


Figura 2. 17. (a) painel de troca de calor (b) distribuidor de líquido com defletores e (c) painéis de troca térmica usados no vertedouro com aparatos de distribuição de líquido (a+b) (Fonte: Adaptado de DE RIJKE, 2007).

Já no que diz respeito aos painéis de troca de calor alocados na área ativa do prato (região de espuma) não fica tão evidente de como se dá o escoamento do líquido pela superfície do painel. Na verdade, quando os painéis são alocados na região do regime de espuma do prato, o líquido periodicamente espirra contra a superfície do painel, devido ao movimento oscilatório do líquido na área ativa do prato e do líquido proveniente do prato superior, isso ocorre até a próxima carga de líquido chegar e espirrar novamente. É visualmente observado que os espirros de líquido do regime de espuma no prato atingem os painéis uma vez a cada um ou dois segundos. Isto resulta nos painéis sendo completamente molhados não sendo visualizadas regiões secas na superfície do prato (DE RIJKE 2007).

2.3 Troca de calor na CDIIC

A troca de calor, em qualquer configuração da CDIIC, que se dá entre os estágios é abordada de maneira simples e pode ser considerada pela equação geral que segue abaixo:

$$Q = U \times A \times \Delta T_{estágios} \quad (1)$$

U = coeficiente global de troca térmica ($\text{W}/\text{m}^2\text{K}$).

A = área disponível para a troca de calor (m^2)

$\Delta T_{estágios}$ = diferença de temperatura entre a T_R (temperatura na retificação) e a T_E (temperatura no esgotamento) no estágio da coluna em questão.

Um dos maiores desafios do trabalho é encontrar o valor do coeficiente global de troca térmica U ($\text{kW}/\text{m}^2\text{K}$) de uma forma correta e embasada teoricamente. O cálculo dessa variável se apresenta de forma complexa na literatura; algumas considerações com relação à configuração interna da coluna devem ser tomadas a fim de que se chegue ao seu valor.

O cálculo do coeficiente global de troca térmica é dado por:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_{\text{int}}} + \frac{1}{h_{\text{ext}}} + \frac{e}{K} \quad (2)$$

Onde:

h_{int} = coeficiente de película interno ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)

h_{ext} = coeficiente de película externo ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)

e = espessura do material (m)

K = condutividade térmica do material ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)

2.3.1 Mecanismo da troca de calor na CDIIC

O entendimento do mecanismo para o cálculo da troca de calor entre os estágios é essencial para prever o desempenho da CDIIC.

De acordo com estudos a esse respeito, somando-se a dados apresentados literatura disponível, pode-se evidenciar um padrão nas contínuas trocas de calor dos dois lados da superfície de troca de calor.

Pode-se verificar que na seção de esgotamento (lado o qual a direção do calor flui) ocorre uma vaporização do líquido que se encontra na superfície de troca térmica; de forma contrária ocorre na seção de retificação. Na retificação ocorre condensação do vapor na superfície de troca de calor. A Figura 2.20 traz de forma genérica como ocorre este fenômeno.

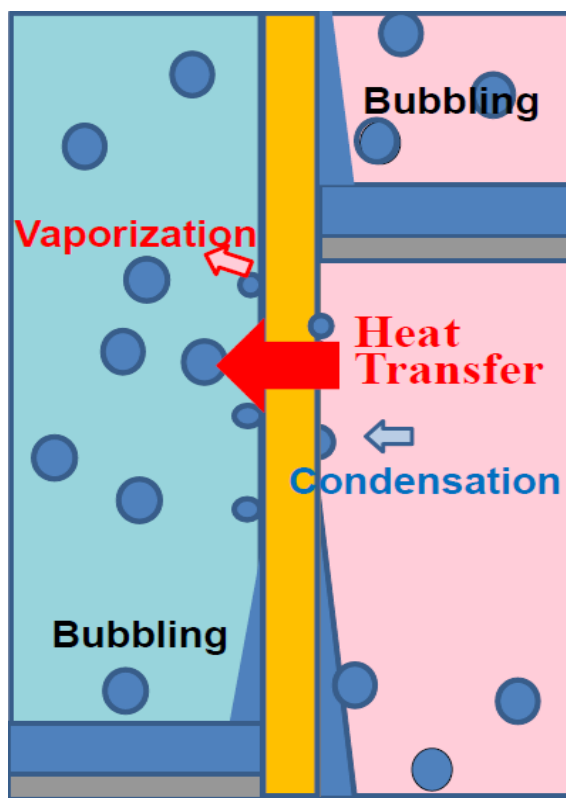


Figura 2.18. Mecanismo da transferência de calor em uma superfície genérica na nova configuração CDIIC (Fonte: HASHIMOTO, 2006).

A Figura 2.20 retrata uma situação genérica de troca de calor válida para as diferentes configurações CDIIC. Pode-se verificar que uma camada líquida escoa sobre as duas seções da superfície trocando calor na CDIIC, portanto as trocas térmicas ocorrem em superfícies molhadas tais quais as que ocorrem em evaporadores industriais.

O entendimento do mecanismo da troca de calor nas superfícies que o fazem na CDIIC leva o cálculo da transferência de calor a um patamar mais detalhado. Muitas considerações podem ser feitas partindo-se do entendimento do mecanismo, o que acarreta na escolha de modelos mais ou menos adequados que representem à troca de calor no estágio.

2.3.2 Características da Fluidodinâmica de filmes líquidos descententes

Vários pesquisadores realizaram pesquisas no campo de escoamento de fluidos abordando líquidos descententes em superfícies com troca de calor, dentre eles pode-se citar Kapitza (1964), Tailby e Portalsky (1960).

Os estudos, em geral, mostram que assim como o escoamento de um fluido em um tubo, o escoamento de um filme líquido descentente em uma superfície (tratando-se de uma placa ou de uma superfície tubular) se caracteriza por três regiões:

- (a) Região laminar: Caracteriza-se por números de Reynolds muito baixos.
- (b) Região de transição: Caracteriza-se por um fluxo que apresenta ondas na sua superfície (*wavy-laminar*) e dependendo do número de Reynolds pode apresentar-se parcialmente turbulento.
- (c) Regime Turbulento: É caracterizado em situações onde o fluxo ultrapassa o valor do Reynolds de transição considerado.

A Figura 2.21 mostra como o fluxo se apresenta em uma superfície na forma de ondas.

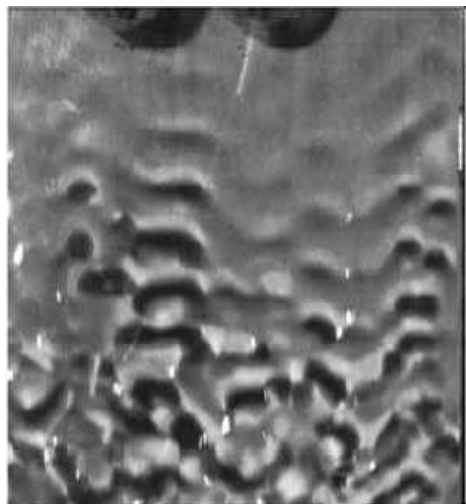


Figura 2. 19. Figura ilustrativa do escoamento de um fluido descendente no regime laminar ondulatório com número de Reynolds = 282. (Fonte: KARABELAS, 2003).

No regime laminar, o escoamento do filme descendente encontra-se na forma de um filme plano o qual é chamado de “suave-laminar”. Nessas condições, o filme desenvolve um perfil de velocidade parabólica descrita pela teoria de Nusselt (WEISE, 2007).

No caso de um regime de escoamento turbulento, o perfil de velocidade muda tornando-se mais achatado. O perfil de velocidade apresentado nessas superfícies pela camada de filme líquido é análogo ao perfil de escoamento desenvolvido em uma tubulação. Na Figura 2.22, podemos verificar o perfil de velocidade correspondente a um filme líquido descendente em duas situações distintas de escoamento laminar (à esquerda) e turbulento (à direita):

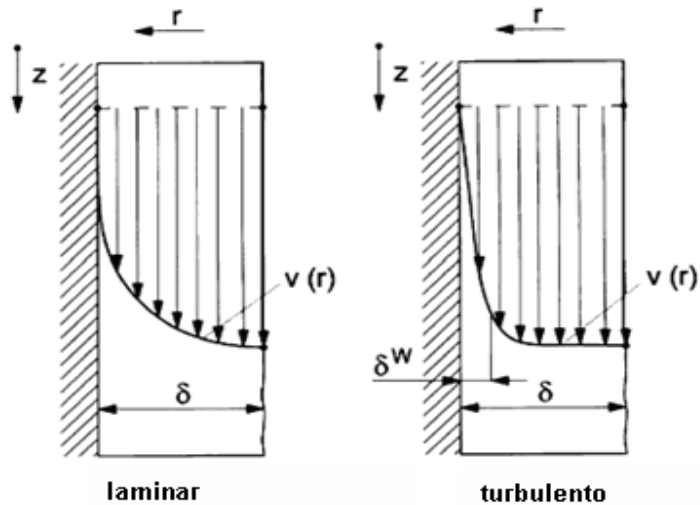


Figura 2.20. Perfil de velocidade do escoamento de um fluido descendente em regimes distintos (Fonte: Adaptado de WEISE, 2007).

A Figura 2.23, mostra as características do escoamento de um fluido genérico em uma superfície vertical. Na proporção que o regime de escoamento muda, até atingir um escoamento totalmente turbulento, verifica-se a presença de ondas maiores e irregulares.

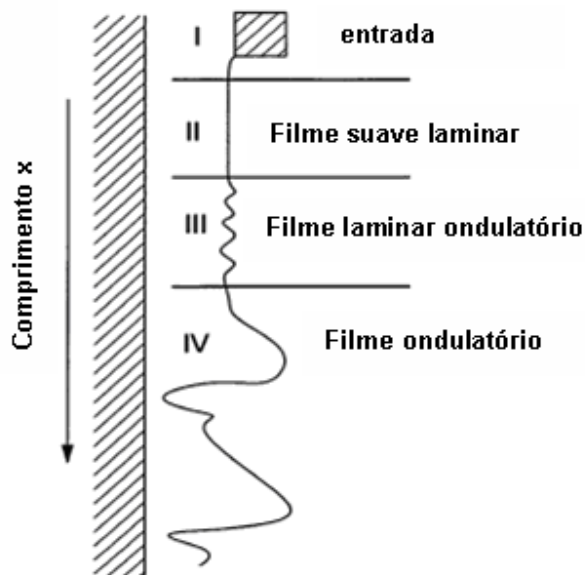


Figura 2.21. Evolução do escoamento de um fluido descendente em uma superfície vertical (Fonte: Adaptado de WEISE, 2007).

Nas condições onde o fluxo é totalmente turbulento pode-se verificar que ocorre um aumento significativo nas taxas de transferência de massa e calor (WEISE, 2007).

Uma questão importante a ser estudada é a espessura do filme líquido formado na superfície de escoamento descendente. Primeiramente, NUSSELT (1916) avaliou o seu valor a partir de um balanço de forças viscosas e gravitacionais que pode ser representada na equação (3), como a seguir:

$$\delta = \left((0,137)^2 \cdot \frac{\mu^2}{\rho^2 \cdot g} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \text{Re}^{\frac{1}{3}} \quad \text{para } \text{Re} > 160 \quad (3)$$

ρ = densidade (Kg m^{-3})

g = gravidade (m s^{-2})

Re = número adimensional de Reynolds

μ = viscosidade ($\text{Kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$)

δ = espessura do filme líquido formado (m)

Assim como a correlação de Nusselt (1916), para o cálculo da espessura do filme líquido, existem outras correlações presentes na literatura. Alhusseini et al. (1997) utilizam em seus cálculos (cálculos estes referentes ao coeficiente de troca térmica de um fluido evaporando em regime turbulento) a correlação de Brauer (Equação 4) para o cálculo da espessura do filme líquido escoando em uma superfície em regime turbulento:

$$\delta^+ = 0,094 \cdot \text{Re}^{0,8} \quad (4)$$

δ^+ = espessura do filme líquido formado (adimensional)

Al-Sibai (2005) estudou a influência das propriedades do fluido na fluidodinâmica e na transferência de calor de superfícies em filmes descendentes. Através de seus experimentos utilizando um aparato sofisticado, podendo citar aparelhos para capturar imagens das partículas, provou que podem ser observados diferentes perfis ondulatórios

para escoamentos com o mesmo número de Reynolds. O número de Kapitza é utilizado para considerar diferentes propriedades do fluido, especialmente a influência da tensão de superfície na evolução das ondas e transferência de calor (WEISE, 2007).

O número de Kapitza é definido como descrito na equação (5)

$$Ka = \frac{\mu^4 \cdot g}{\rho \cdot \sigma^3} \quad (5)$$

g = gravidade (m s^{-2})

σ = tensão de superfície (N m^{-1})

ρ = densidade (Kg m^{-3})

É importante conhecer em qual regime de escoamento se encontra o fluido descendente. Embora para a condensação de vapor na forma de fluidos descendentes utiliza-se um número fixo de Reynolds, para a evaporação de filmes descendentes os valores diferem com relação às características do fluido em questão. São encontradas na literatura várias correlações para o cálculo do número de Reynolds de transição, para evaporação de filmes líquidos descendentes (chamado também aqui de Reynolds crítico Re_c) escoando em superfícies descendentes. A seguir, serão apresentadas algumas delas, sendo que as equações (6) e (7) abaixo foram descritas por Chun e Seban (1971):

$$Re_c = \frac{5900}{Pr^{1,06}} \quad (6)$$

Pr = número adimensional de Prandtl

Ou por:

$$Re_c = \frac{0,215}{\frac{1}{Ka^3}} \quad (7)$$

Pr = número adimensional de Prandtl

Correlações distintas visando o mesmo propósito existem segundo Krupiczka et al. (2002), decorrentes do fato de que a equação (7) tem uma abordagem teórica um pouco

diferente da (6). Em (7), se considera que o calor é transferido por um gradiente linear de temperatura na superfície quando o filme escoando sobre ela tem características de escoamento suave e laminar (para casos os quais $Re_{\text{trans}} < 1600$). A partir dessas considerações, pode-se avaliar o Reynolds de transição como função do número de Kapitza (KRUPICZKA et al., 2002).

Wilke (1962), em seus experimentos com soluções de glicol-água encontrou valores relativamente menores que os preditos por (6), e são apresentados na equação (8):

$$Re_c = \frac{2460}{Pr^{0,65}} \quad (8)$$

Já valores preditos pela correlação (7) estão bem próximos aos valores preditos por Wilke (1962).

2.3.3 Coeficiente de película externo da troca de calor h_{ext}

Quando se fala em um coeficiente convectivo de troca de calor externo é preciso estabelecer a condição em que se dá a troca de calor. Muito do que diz respeito à correlação, seja ela referente a um painel ou mesmo a superfície anular de uma das colunas acopladas na configuração CDIIC, leva em consideração a circunstância na qual se encontra a superfície.

Muitas aplicações em equipamentos industriais se valem da transferência de calor e massa como processo de separação ou concentração de misturas. Os equipamentos que apresentam filmes descendentes são caracterizados por altos coeficientes de troca de calor e baixos tempos de residência. A taxa de evaporação é pequena comparada com a razão de líquido escoando descendentemente (KRUPICZKA et al., 2002).

Os fenômenos de transporte a respeito de filmes líquidos descendentes com evaporação foram por muitos anos estudados por diversos autores. Os estudos das correlações que serão descritas nos itens 2.3.3.1-2 corresponderam principalmente casos de estudos relacionados a evaporadores, tais quais os utilizados nas indústrias em geral para concentrar soluções.

É importante ressaltar que existem vários regimes de evaporação do filme descendente muitos deles descrevem a formação de bolhas de vapor ainda na fase líquida. A formação de bolhas obedece a padrões com relação à diferença de temperatura entre a superfície e o líquido evaporando. A existência de diferentes padrões não limita e nem restringe a utilização das correlações utilizadas nesse trabalho.

2.3.3.1 Correlação de Chun e Seban (1971)

Chun e Seban (1971) desenvolveram trabalhos notáveis referente a correlações de evaporação de filmes líquidos descendentes. Seus experimentos avaliaram água evaporando em um tubo aquecido por resistências elétricas. A correlação abrange vários regimes de escoamento desde laminar até turbulentos com número de Reynolds variando entre 320 até 21000. Com números de Prandtl variando de 1,77-5,7 (ALHUSSEINI et al., 1997).

As correlações correspondentes para regime laminar-ondulatório (equação 09) e regime turbulento (equação 10) apresentadas por Chun e Seban (1971), são respectivamente:

$$h^* = 0,821 \cdot \text{Re}^{-0,22} \quad \text{Re} < \text{Re}_c \text{ (região laminar-ondulatória)} \quad (9)$$

h^* = coeficiente de película externo (adimensional)

$$h^* = 0,0038 \cdot \text{Re}^{0,4} \text{Pr}^{0,65} \quad \text{Re} > \text{Re}_c \text{ (região totalmente turbulenta)} \quad (10)$$

Onde h^* acima referido é adimensional; para ocorrer a sua dimensionalização do seu valor utiliza-se (equação 11):

$$h^* = h \cdot \left(\frac{\nu^2}{g} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{1}{k} \quad (11)$$

ν = viscosidade cinemática ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)

k = condutividade térmica ($\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$)

h = coeficiente de película externo ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)

O número adimensional de Prandtl, que é utilizado na correlação e em outras correlações presentes no trabalho trata teoricamente de uma razão entre a medida difusividade de momento e a difusividade térmica e é representada pela equação (12):

$$\text{Pr} = \frac{\mu \cdot c_p}{k} \quad (12)$$

c_p = capacidade calorífica ($\text{J Kg}^{-1}\text{K}^{-1}$)

k = condutividade térmica ($\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$)

1.3.3.2 Correlação de Alhusseini et al., (1997) para regime turbulento de escoamento

Trabalhos para o cálculo do coeficiente de película foram realizados com a vaporização de componentes puros em um tubo aquecido. O grande problema desses trabalhos para o cálculo de transferência de calor é que, se limitam a uma faixa relativamente pequena de valores de determinadas propriedades físicas. Podendo citar como exemplo o número de Prandtl de faixas de cálculo de 1,7 até 5,7 enquanto em aplicações práticas os valores de Prandtl podem eventualmente alcançar valores maiores.

Alhusseini et al. (1997) conseguiram dados para o coeficiente de película em termos de números adimensionais de Reynolds e Kapitza para filmes em regimes laminares ondulatórios e uma correlação semi-empírica para h^* foi proposta para regimes turbulentos de escoamento. Aproximou uma relação matemática simples para o cálculo de h^* que foi proposta para o modelo turbulento. Foi feita uma aproximação similar à usada por Sandall et al. (1988); uma expansão assintótica da integral da equação de energia é obtida como um fluido que tem o número de Prandtl aproximado do infinito. Para esta expressão aproximada, o número de Prandtl turbulento (Pr_t) foi assumido o valor de 1,1. Maiores detalhes do procedimento podem ser encontrados em Alhusseini (1995).

Cálculo do coeficiente de película proposto por Alhusseini et al. (1997) para regime turbulento é dado por:

$$h^*_{turbulento} = \frac{\text{Pr} \cdot (\delta^+)^{\frac{1}{3}}}{(A_1 \cdot \text{Pr}^{\frac{3}{4}} + A_2 \cdot \text{Pr}^{\frac{1}{2}} + A_3 \cdot \text{Pr}^{\frac{1}{4}} + C_t) + (B \cdot \text{Ka}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{Pr}^{\frac{1}{2}})} \quad (13)$$

Valores das variáveis presentes na correlação para coeficiente de troca de calor (13) para regime turbulento seguem nas equações (14), (15), (16), (17) e (18):

$$A_1 = 9,17 \quad (14)$$

$$A_2 = \frac{(0,328 \cdot \pi \cdot (130 + \delta^+))}{\delta^+} \quad (15)$$

$$A_3 = 0,0289 \cdot (152100 + 2340\delta^+ + 7\delta^{+2}) / \delta^{+2} \quad (16)$$

$$B = \frac{(2,51 \times 10^6 \cdot (\delta^+)^{0,333} \cdot \text{Ka}^{-0,173})}{\text{Re}^{(3,49 \cdot \text{Ka}^{0,0675})}} \quad (17)$$

$$C_t = 8,82 + 0,0003 \cdot \text{Re} \quad (18)$$

A espessura do filme líquido escoando sobre a superfície de troca de calor é dada pela equação:

$$\delta^+ = 0,0946 \cdot \text{Re}^{0,8} \quad (19)$$

Alhusseini et al. (1997) também trazem em seu trabalho uma correlação para o número de Nusselt utilizando dados experimentais novos e estendidos para o regime laminar ondulatório (Equação 20):

$$h^*_{laminar} = 2,65 \cdot \text{Re}^{-0,158} \cdot \text{Ka}^{0,0563} \quad (20)$$

Uma expressão generalizada que combina valores para coeficiente de transferência de calor para o filme descendente em uma superfície onde está ocorrendo evaporação,

válida para todos os números de Reynolds, pode ser obtida pela equação (21), de acordo com os valores de coeficiente de troca térmica apresentados por Alhusseini et al. (1997) no regime laminar e turbulento:

$$h^*_{geral} = (h^{*5}_{laminar} + h^{*5}_{turbulento})^{0,2} \quad (21)$$

Vale lembrar que para transformar h^* adimensional em um número dimensional h (kW/m²K) utiliza-se a equação (11).

Em misturas líquidas escoando sobre uma superfície aquecida, o componente mais volátil irá preferencialmente evaporar em uma quantidade maior na interface (gás-filme líquido), causando uma depleção (diferença) local na concentração daquele componente. Em condições de estado estacionário, a convecção axial interagiria com a difusão transversa para suprir o fluxo molar do componente mais volátil em direção a interface. Para condições turbulentas, este processo resulta num perfil de composição local com concentração máxima na superfície do sólido e concentração mínima na interface (DE RIJKE, 2007).

Segundo De Rijke (2007), misturas com pontos de ebulição muito próximos tais como propileno-propano, benzeno-tolueno entre outros foram utilizados preferencialmente estudo da CDIIC. Nessas condições, o efeito da resistência à transferência de massa devido à difusão do componente mais volátil é menor pronunciada. Assim, é possível uma aproximação dos modelos de um único componente a uma mistura binária.

De Rijke (2007), em seu trabalho mostrou que as resistências à transferência de massa na CDIIC possuem desvios muito baixos no cálculo do coeficiente Global de troca térmica (U) e na maioria dos casos podem ser desprezados. Com a finalidade de simplificação nos cálculos e modelagem, neste trabalho foram desprezados estes efeitos no cálculo do coeficiente de convecção do filme evaporando na CDIIC.

2.3.4 Coeficiente de película interno da troca de calor h_{ext}

A condensação ocorre quando o vapor possui uma temperatura maior que a superfície que ele esta em contato.

A condensação em superfícies que trocam calor pode ocorrer de duas formas, na forma da permanência de gotas ou na forma de condensação de filmes. As condições da superfície dizem como irá se efetuar a condensação.

Os regimes de escoamento do líquido condensando se apresentam na literatura com valores fixos (NUSSELT, 1916):

(a)	$Re \leq 30$	Laminar
(b)	$30 \leq Re \leq 1800$	Laminar ondulatório
(c)	$Re \geq 1800$	Turbulento

2.3.4.1 Condensação na forma de gotas

A condensação na forma de gotas é extremamente difícil de ser mantida. Após a exposição de uma superfície a condensação de vapor, por um determinado período de tempo, verifica-se que esta fica molhada em sua maioria. Algumas gotas de líquido acabam se aglutinando em outras, formando gotas maiores; estas, por forças gravitacionais acabam escoando sobre a superfície. Melhores detalhes podem ser vistos na Figura 2.24.

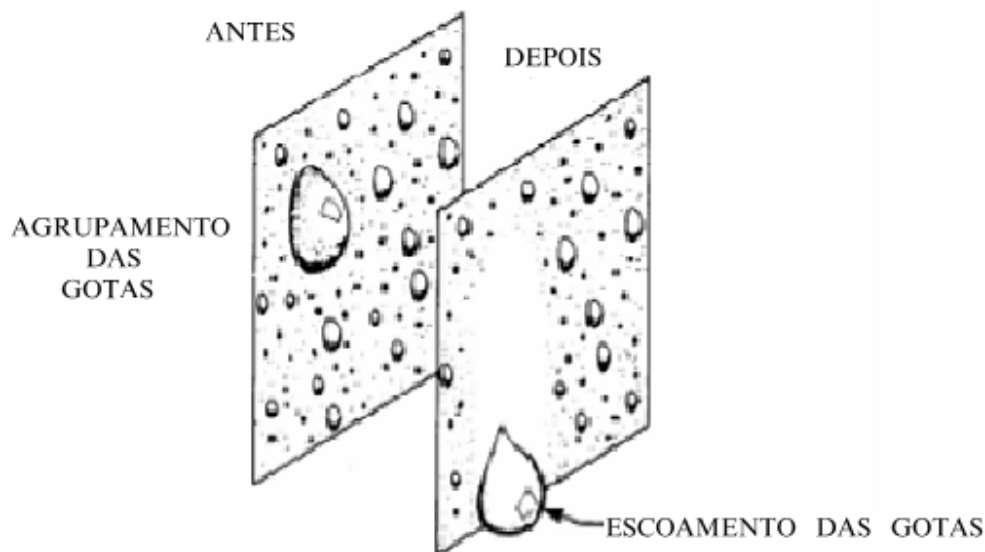


Figura 2.22. Processo de remoção de líquido de uma superfície na condensação em forma de gotas.

2.3.4.2 Condensação laminar ($Re < 30$), Laminar-ondulatória ($30 < Re < 1800$) e turbulenta ($Re > 1800$) em forma de filme em superfície vertical

Como já foi descrito, o escoamento do filme ocorre em um determinado regime, que é delimitado pelo número de Reynolds.

O desenvolvimento de correlações para o cálculo do coeficiente de película se fez presente na literatura ao longo dos anos. Apesar da sua fácil utilização existe uma complexidade teórica elevada por detrás de cada uma. Muitos efeitos têm significativa relevância e outros podem ser desprezados no presente estudo.

Grande parte das correlações em regime laminar encontradas na literatura decorrem do trabalho inicial de Nusselt (1916). Das correlações apresentadas segue a correlação para condensação laminar-ondulatória presente no Handbook de Vdi-Warmeatlas (2002), que é a mesma utilizada no trabalho de De Rijke (2007) e algumas outras correlações para o cálculo do número de Nusselt nos diferentes regimes de escoamento presentes no livro de Bejan (1993).

Condensação laminar em uma superfície vertical ($Re < 30$)

A equação de Nusselt para a condensação do Filme Laminar segue a seguir na equação (22). Esta baseada na hipótese de que o efeito de inércia é negligenciável no balanço de momento decorrente da análise do fluxo de líquido em filme descendente (BEJAN, 1993).

Considera-se o número de Nusselt médio correspondente a uma região inteira de comprimento H; geralmente esse valor leva em consideração a altura da placa no estágio o qual está ocorrendo a troca de calor. Para parede vertical segue como em BEJAN (1993):

$$Nu = \frac{h \cdot L}{k} = 0,943 \cdot \left[\frac{\Delta h \cdot (\rho - \rho_d) \cdot g \cdot H^3}{(T_s - T_w) \cdot \nu \cdot k} \right]^{1/4} \quad (\text{Nusselt}) \quad (22)$$

T_s = temperatura média (°C)

T_w = temperatura da superfície de aquecimento (°C)

Δh = entalpia de vaporização (J/g)

T_s = temperatura de saturação (°C)

ν = viscosidade cinemática (m²/s)

k = condutividade térmica (W m⁻¹ K)

H = altura que se está considerando (m)

Condensação laminar/laminar-ondulatória em uma superfície vertical DE RIJKE

(2007)

Outra opção para o cálculo do número de Nusselt é dada segundo DE RIJKE (2007). Devido ao tamanho dos painéis utilizados em seu trabalho apresentarem alturas relativamente baixas, o filme condensado é esperado permanecer no regime laminar/laminar-ondulatório. Uma correção proposta por Kutateladze (1963) modifica a equação clássica de Nusselt (NUSSELT, 1916) para o filme condensando em regime laminar abrangendo-a para o regime de escoamento laminar-ondulatório. Abaixo, segue a equação para o cálculo do número de Nusselt estendida para incluir o regime laminar ondulatório:

$$Nu_{z,l} = h_{z,l} \cdot \left(\frac{\nu^2}{g} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{1}{k} = 1,1 \cdot \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_l} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot (Re_f)^{-0,22} \quad (23)$$

Onde :

$h_{z,l}$ = coeficiente local de película (W m⁻² °C⁻¹)

k = condutividade térmica (W m⁻¹ K⁻¹)

ν = viscosidade cinemática (m²/s)

g = aceleração da gravidade (m/s²)

Re_f = corresponde ao líquido descendente em um superfície.

O número de Reynolds para os painéis segue como mostrado na equação (24) e (25). Este trata da massa que escoar efetivamente em cada painel.

$$Re = \frac{\Gamma_z}{\mu} \quad (24)$$

Ou

$$Re = \frac{4 \cdot \Gamma_z}{\mu} \quad (\text{equação restrita ao uso do sistema inglês}) \quad (25)$$

Γ_z = fluxo mássico por unidade de comprimento ($\text{Kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$)

μ = viscosidade dada em (Pa s)

Segundo De Rijke (2007), no regime laminar e no laminar ondulatório no lado onde ocorre condensação, o coeficiente de troca de calor corresponde a uma mistura binária com propriedades físicas que se assemelham a de um dos componentes puro. Isso porque o transporte de calor através do filme é controlado por difusão. Em um regime turbulento, entretanto, o coeficiente de transferência de calor de uma mistura será menor que a de um componente puro porque existe uma preferência na condensação do componente mais pesado da mistura na interface. Este fato causa um gradiente de concentração no filme.

A depleção local do componente mais volátil na interface irá levar ao transporte difusivo desse componente na direção oposta ao fluxo convectivo de calor, a chamada resistência à transferência de massa. Este efeito resulta em um menor valor do coeficiente de transferência de calor no lado em que ocorre a condensação (DE RIJKE, 2007).

Condensação Laminar ondulatória/turbulenta em uma superfície vertical CHEN et al. (1987) ($Re > 30$)

Experimentos revelam que a transferência de calor em regiões turbulentas e ondulatórias é consideravelmente maior que as estimadas em regimes laminares (CHEN et al., 1987).

Um dos registros mais consideráveis de dados experimentais e correlações de condensação de transferência de calor em regime ondulatório e turbulento foi revisto por Chen et al. (1987) e Chun e Kim (1990). Chen et al. (1987), que desenvolveram a equação (26) para o coeficiente médio de transferência de calor em um comprimento L para filmes se encontrando em regimes ondulatórios e turbulentos (BEJAN, 1993).

$$\frac{\bar{h}_L}{k_l} \cdot \left(\frac{\nu^2}{g} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\text{Re}_L^{-0,44} + 5,82 \cdot 10^{-6} \cdot \text{Re}_L^{0,8} \cdot \text{Pr}_l^{1,3} \right)^{0,5} \quad (26)$$

Re_L = número adimensional de Reynolds para o líquido condensado

Pr_l = número adimensional de Prandtl para o líquido condensado

A equação (26) tem um desvio médio de 10% com relação aos valores experimentais.

2.4 Hidráulica nos pratos

A hidráulica de pratos envolve inúmeros fenômenos estudados nos pratos das colunas de destilação. Todos eles têm um grande grau de importância no que se refere ao projeto e dimensionamento da coluna. Por não se conhecer as dimensões do prato, alguns valores precisaram ser tomados arbitrariamente (dentro de uma faixa aceitável existente na literatura) para se proceder alguns cálculos necessários ao trabalho. Dentre os fenômenos que influenciam a hidráulica de pratos (e eventualmente causam problemas) os que mais necessitam de uma mensuração para uma boa operação da coluna são: arraste, queda de pressão no prato, velocidade de líquido no vertedouro (downcomer), Vazamento ou “choro”, e a inundação.

2.4.1 Perda de Pressão nos pratos

Segundo Duarte e Almeida (2007), em geral, a perda de carga pode ser avaliada por três diferentes fatores no cálculo da perda de pressão em colunas de destilação. Um deles é denominado perda de pressão no prato seco h_{cd} , ela corresponde à perda de pressão que o vapor tem ao passar pelo furo do prato ou pela campânula do mesmo. Para o caso da coluna deste trabalho, a qual em teoria se trabalha com pratos perfurados, tem-se para a perda de pressão no prato seco como na equação (27):

$$h_{cd} = \frac{\rho_v}{\rho_l} \cdot \left(\frac{0,186}{Co^2} \right) \cdot U_h^2 \quad (27)$$

ρ_v = densidade do vapor (Kg m^{-3})

ρ_l = densidade do líquido (Kg/m^3)

C_o = coeficiente de descarga (adimensional)

U_h = velocidade do vapor (m/s)

Onde U_h é a velocidade do vapor baseada na área dos furos, sendo dada por:

$$U_h = \frac{Q_{\text{vapor}}}{A_h} \quad (28)$$

Q_{vapor} = vazão de vapor ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)

A_h = Área dos furos no prato (m^2)

O coeficiente de descarga (C_o) pode ser obtido da Figura (2.25), de acordo com Kister (1992):

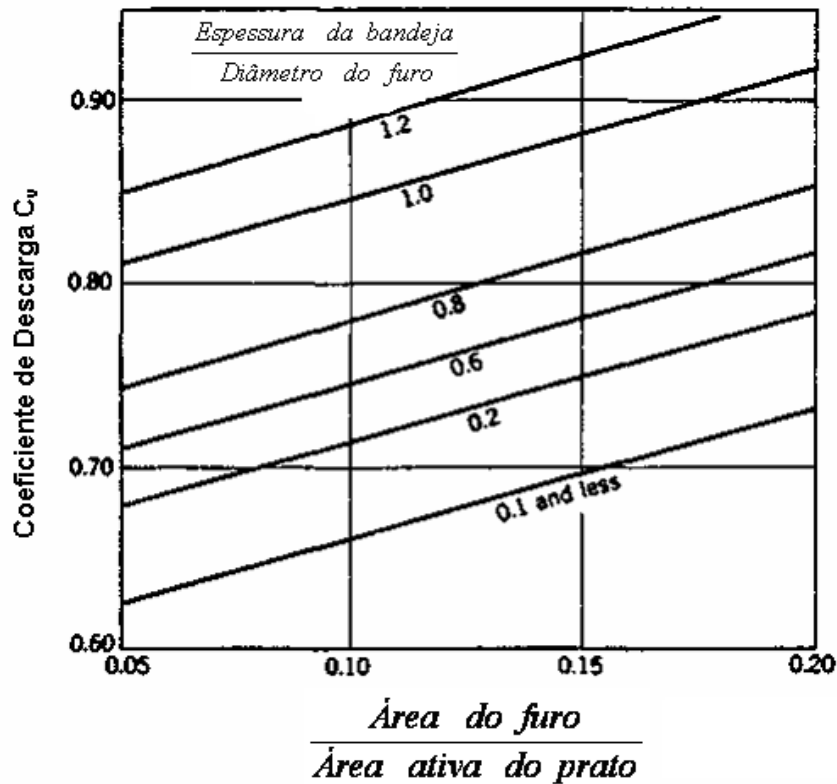


Figura 2.23 Gráfico utilizado para encontrar o valor do coeficiente de Descarga C_v

(Fonte adaptada: Adaptado de KISTER 1992).

Também ocorre à perda de carga devido à tensão superficial h_{σ} do líquido como segue na equação (29):

$$h_{\sigma} = \frac{0,04 \cdot \sigma}{\rho_l \cdot d_h} \quad (29)$$

Onde:

σ é a tensão superficial do fluido (N/m)

d_h é o diâmetro do furo (in)

O outro fator importante para a perda de pressão no prato corresponde à altura de líquido acima do prato, h_{al} . A equação geral da perda de pressão é calculada através da equação (30):

$$\Delta P = h_{cd} + h_{al} + h_{\sigma} \quad (30)$$

A queda de pressão na prática deve estar na faixa de 3 à 5 polegadas de água para toda a coluna (KISTER, 1992). Lembrando que a queda de pressão nos pratos não altera diretamente a eficiência dos mesmos, ela é somente uma função do processo (DUARTE e ALMEIDA, 2007).

1.4.2 Vazamento ou Choro

Vazamento, ou choro, é o fenômeno que ocorre quando há vazamento de líquido para o prato inferior. As causas deste fenômeno são proporcionadas basicamente por baixas vazões de vapor. Pode ocorrer este fenômeno também quando a razão entre a área dos furos dividida pela área total ativa do prato alcançar valores muito elevados (em geral maiores que 20% (KISTER, 1992). Existe uma relação entre as pressões na qual se pode prever o fenômeno, assim como em (31):

$$h_{cd} + h_{\sigma} > h_w + h_{ow} \quad (31)$$

onde os termos da direita h_w, h_{ow} são os principais parâmetros para o cálculo da perda de pressão devido a altura de líquido. A perda de pressão devido à altura de líquido corresponde respectivamente à altura do ressalto do vertedouro (h_w) somando-se a altura de líquido sobre o vertedouro (h_{ow}) de saída. Na Figura 2.26 abaixo fica perceptível os parâmetros descritos :

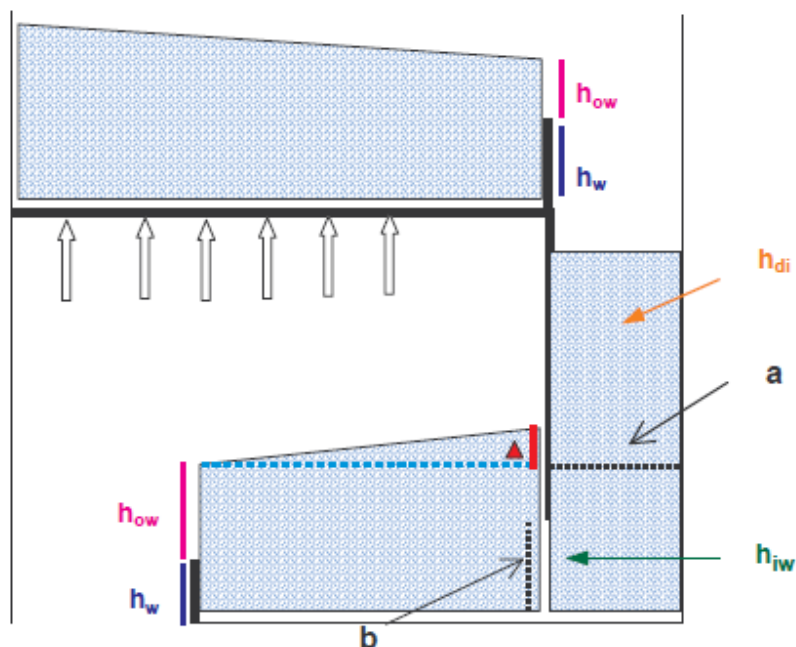


Figura 2.24. Principais fatores que afetam a perda de pressão no prato
(Fonte: DUARTE e ALMEIDA, 2007).

Δ = altura do desnível líquido no vertedouro (in)

h_{di} = perda de carga no vertedouro (in)

h_{iw} = perda de carga no vertedouro de entrada (in)

2.4.3 Perda de pressão devido aos painéis

De Rijke (2007), confirma que não ocorre perda de pressão devido aos painéis (na seção de retificação e na seção de esgotamento). Através de resultados experimentais ele

pôde comprovar tal fato. Possivelmente, a maior dificuldade esteja em visualizar a ausência da perda de pressão dentro dos painéis.

A velocidade do vapor em uma coluna de destilação é relativamente pequena, assim as fricções do vapor nas paredes dos painéis são ditas negligenciáveis. Consequentemente, (em hipótese), não haverá queda de pressão entre o vapor entrando e o líquido saindo de dentro do painel Figura 2.27 (DE RIJKE, 2007).

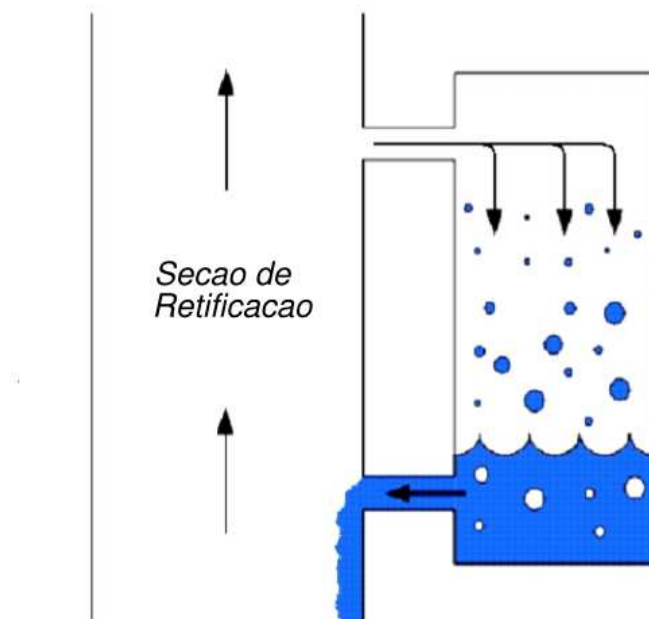


Figura 2.25. Representação esquemática da conexão dos painéis de troca térmica com a coluna de destilação (Fonte: Adaptado de DE RIJKE, 2007).

2.4.4 Cálculo do diâmetro hidráulico da Coluna

Segundo Gadalla (2009), o diâmetro hidráulico da CDIIC (ou a área de seção transversal da coluna) é determinado com as vazões obtidas da simulação. O diâmetro é calculado a partir dos limites previstos por inundações através da utilização da correlação Fair (KISTER, 1992). Os diâmetros são calculados para cada estágio da retificação e do esgotamento da CDIIC.

2.4.4.1 Correlação de Fair

As correlações que tentam prever a condição de inundação no prato geralmente se baseiam no regime de inundação Spray como no caso da correlação de Fair.

Grande parte das correlações que predizem a vazão de inundação para o regime Spray derivam do trabalho de Souders e Brown (1934). Eles analisaram a teoria o fluxo de inundação em termos velocidade de queda das gotas do prato superior. A inundação ocorre quando a velocidade do vapor subindo é alta suficiente para suspender as gotas do líquido e não deixá-las cair no prato inferior.

O termo C_{SB} é definido como a constante de Souders e Brown. Correlações desenvolvidas posteriormente ao trabalho deles não consideram o termo C_{SB} como uma constante, mais sim como uma função de varias variáveis tais como: o espaçamento do prato, a altura de líquido no prato, fração de área de furo dos pratos entre outros (KISTER, 1992).

Na correlação de Fair, C_{SB} é baseada na área total de seção transversal e é avaliado através da equação (31), espaço entre os pratos da coluna, tensão de superfície e área da fração de furos no prato como segue na equação (32).

$$u_{S,flood} = C_{SB} \cdot \left(\frac{\sigma}{20} \right)^{0,2} \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_v}{\rho_v}} \quad (32)$$

ρ_L = densidade do líquido (Kg m⁻³)

ρ_v = densidade do líquido (Kg m⁻³)

A Figura 2.28 que segue abaixo se aplica para áreas de furos nos pratos maiores ou iguais a 0,1 que será caso do projeto:

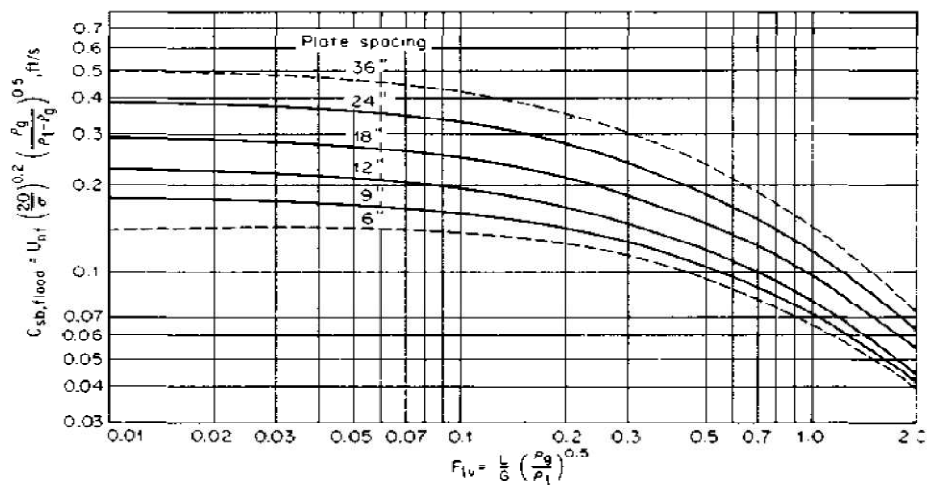


Figura 2.26. Correlação para vazão de arraste de Fair (Fonte: KISTER, 1992).

2.5 Metodologia *Pinch* aplicada na CDHC

A tecnologia *Pinch* foi iniciada nos anos 80 depois das crises mundiais do petróleo em 1973 e 1979 visando uma maior recuperação de energia em processos com troca térmica, principalmente nas refinarias de petróleo e afins. A tecnologia considera a energia e custos capitais, ambos com profundo grau de importância. A análise pode ser feita tanto em plantas em construção quanto em plantas já existentes, onde seja necessária uma melhora da eficiência energética.

De maneira geral, uma otimização do uso das utilidades (correntes quentes e frias) de uma planta é procurada. Para realização da análise levam-se em conta principalmente conceitos termodinâmicos relacionados à 2ª Lei da termodinâmica.

Segundo Linnhoff (1993), os três princípios básicos mais conhecidos da análise são as curvas compostas (*composite curves*), o diagrama de grades (*grid diagram*) e o ponto de estrangulamento energético (PEE ou *pinch point*).

Na Figura 2.29, se pode observar como é feita a representação gráfica da análise *Pinch* (*composit curves*). A representação gráfica toma forma em um gráfico de entalpia por temperatura, que representa o balanço de energia do processo. A linha vermelha corresponde a um conjunto de correntes da planta que fornecem calor e necessita ser resfriado; a linha azul representa um conjunto de correntes frias do processo que precisam ser aquecidas e recebem calor. O espaço horizontal entre as curvas simboliza à direita, a quantidade de energia que ainda deve ser fornecida ao processo e à esquerda a quantidade

de energia que necessita ser retirada do processo (como pode ser visto na Figura 2.29). O ponto onde as curvas se aproximam é onde se encontra o “Pinch point” (mínima força motriz), que também pode ser visualizado na Figura 2.29. No ponto de estrangulamento energético, a diferença de temperatura é mínima; dessa forma, para a realização de uma troca de calor considerável neste local necessita-se de uma área de troca térmica muito grande. Decorrente da elevada área necessária (diretamente ligada aos custos de projeto), ao longo do *Pinch Point*, evita-se a troca de calor.

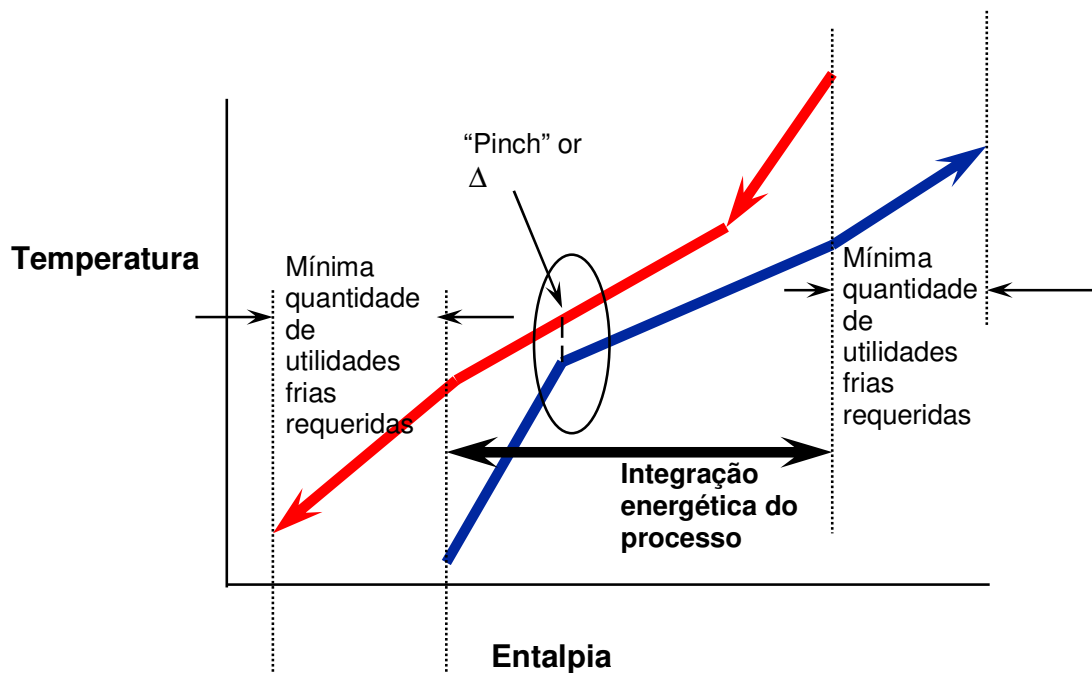


Figura 2.27. Representação gráfica do “Pinch point” energia requerida e fornecida ao processo.

Maiores detalhes sobre a metodologia *Pinch* podem ser encontrados em Linnhoff (1993).

2.5.1 Pinch na CDIIC

A metodologia *Pinch* aplicada em uma configuração CDIIC pode melhorar o desempenho da coluna e viabiliza a escolha de uma maior ou menor área de troca de calor

necessária para um estágio. A idéia da configuração CDIIC, que tem analogia com a metodologia *Pinch*, corresponde ao fato de considerar cada estágio termo-acoplado (estágios em contato térmico das duas seções da coluna) na CDIIC como um genérico trocador de calor na metodologia *Pinch* (GADALLA et al., 2005).

A seção de retificação é vista como uma larga fonte de calor e, similarmente, a seção de esgotamento é considerada como a fonte consumidora de calor ou sumidouro de calor. Por esse ponto de vista, a CDIIC pode ser desenvolvida como um conjunto de trocadores de calor acoplados, que recupera calor da seção de retificação para a seção de esgotamento (GADALLA et al., 2005).

Na aplicação da análise *Pinch*, nas mais diversas plantas industriais, teoricamente se pode trocar calor com duas correntes quaisquer de uma planta (desde que os princípios da análise não sejam violados). O mesmo não ocorre na CDIIC onde tem-se as trocas térmicas fixadas. Não se pode trocar calor do primeiro prato da seção de retificação com o quinto prato da seção de esgotamento, por exemplo. Dessa forma, para determinar a possibilidade ou não de transferência de calor na CDIIC, a seção de retificação deve apresentar um perfil de temperatura superior ao da seção de esgotamento. Os pontos onde a diferença de temperatura é mínima, ou melhor, atingem o menor valor é onde se encontra o *Pinch Point*. Quem controla essa diferença de temperatura é a carga de re-compressão que é dada ao vapor que deixa a seção de esgotamento; quanto maior é essa carga, maior a temperatura que se atinge ao longo da seção de retificação.

Um gráfico de temperatura por entalpia é montado para cada carga de re-compressão efetuada no compressor (assim como a Figura 2.30). A seção de retificação corresponderia à curva das correntes quentes e a seção de esgotamento corresponderia à curva das correntes frias. Para analisar a informação do gráfico, alguns princípios da análise *Pinch* devem ser levados em conta.

Os principais princípios da análise *Pinch*, que podem ser utilizados na CDIIC são os de que: nenhum resfriamento é permitido acima do *Pinch* e similarmente nenhum aquecimento é permitido abaixo do *Pinch*. Em adição, nenhuma troca de calor deve ser transferida ao longo do *Pinch* (*across pinch*) (SMITH,1995).

Quando a CDIIC é ideal as duas curvas irão iniciar e terminar no mesmo ponto vertical da Figura 1.30. Assim, as energias requeridas no refeedor e no condensador se tornarão zero (GADALLA et al. 2005).

A seguir segue um gráfico retirado de Gadalla et al. (2005), (Figura 2.30) para o sistema Benzeno-Tolueno; nele se pode verificar como fica representada a análise *Pinch* em uma coluna com integração energética.

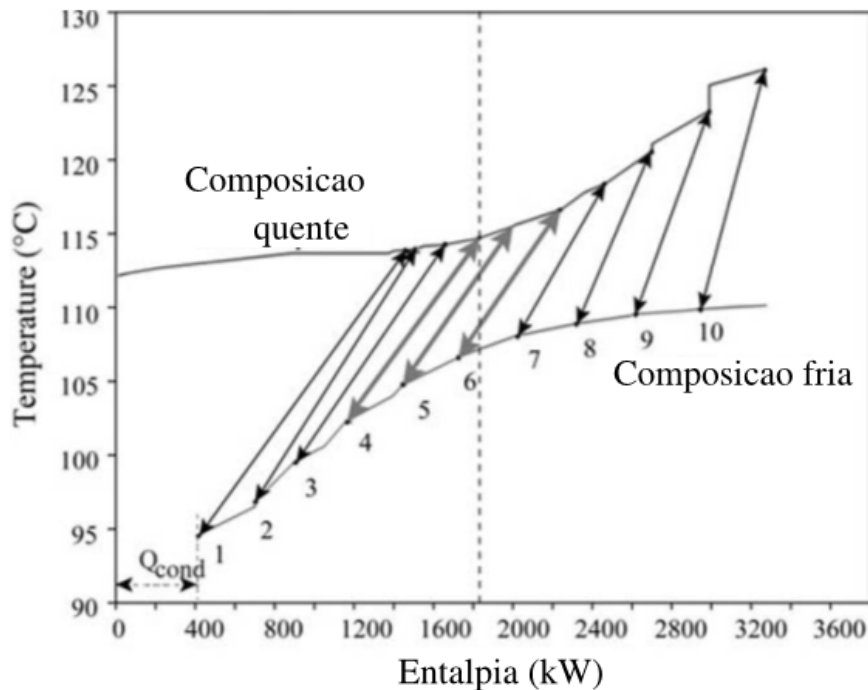


Figura 2.28. Sistema benzeno-tolueno representado em um diagrama Entalpia vs Temperatura. (100kmol/h alimentação equimolar; 20 estágios; razão de re-compressão de 2,5: 1,0; 99,5% de benzeno no destilado e 0,5% no fundo) (Fonte: Adaptado de GADALLA et al., 2005).

2.6 CDIIC ideal (i-CDIIC)

O design ideal da CDIIC, ou também a CDIIC ideal, assume que existe um número equivalente de estágios termicamente acoplados nas duas seções da coluna, com uma constante transferência de calor nos estágios (NAKAIWA et al. 2003). Entretanto, isto no caso prático não é frequente. Por exemplo, o sistema propileno-propano geralmente contém

muitos estágios a mais na seção de retificação que na seção esgotamento como demonstrado em Sun et al. (2003). Isto ocorre em várias misturas binárias possíveis, permitindo que uma parte não integrada da seção de retificação, por exemplo, opere como uma coluna convencional. Tais configurações são chamadas CDIIC parciais (GADALLA et al., 2005). No caso do presente estudo, trabalha-se em alguns aspectos com CDIIC ideal (no que diz respeito ao acoplamento térmico somente).

Quando se trabalha com uma CDIIC parcial, utiliza-se um refeedor e um condensador que atuam parcialmente no fornecimento das utilidades (quentes e frias). Estes aparelhos fornecem/retiram energia suprimindo a quantidade de energia necessária que não foi suprida pelas trocas térmicas ao longo da coluna.

2.7 Modelagem matemática da CDIIC

Por volta de 1950, os métodos computacionais eram pouco desenvolvidos. Cálculos de colunas de destilação utilizando métodos rigorosos eram somente utilizados para colunas pequenas devido à maior facilidade de convergência. Imprecisões e incertezas nos procedimentos “*shortcut*” eram geralmente “resolvidos” por uma configuração superestimada. Dessa forma, se contornava muitos dos problemas normalmente resolvidos pela arte desenvolvida em torno desse processo de separação, eurísticamente ou pelo conhecimento de alguns sistemas parecidos (KISTER, 1992).

Dentre os modelos existentes utilizados para o cálculo de colunas de destilação sem dúvida o mais utilizado é o modelo de estágios de equilíbrio, a este um enfoque maior é dado a seguir.

2.7.1 Conceitos dos modelos de Equilíbrio

O modelo de estágio de equilíbrio afirma que as correntes de líquido e vapor que deixam um estágio teórico (prato) estão em completo equilíbrio, assim pode-se usar as relações termodinâmicas de equilíbrio para determinar as concentrações da mistura em cada estágio. A adoção do modelo de estágio de equilíbrio divide o projeto de uma coluna de destilação em três partes. A primeira parte é a reunião de dados e métodos termodinâmicos necessários para prever as composições das fases em equilíbrio. A segunda parte é o cálculo do número de pratos teóricos necessários para realizar a separação especificada, ou

o cálculo da separação que será conseguida com um dado número de estágios de equilíbrio. A terceira parte é a conversão do número de estágios de equilíbrio ao número equivalente de pratos reais (PERRY e CHILTON, 1980).

2.7.2 Modelagem Matemática Genérica:

As expressões matemáticas que descrevem o processo de destilação (multiestágios e contracorrente) consistem de 4 conjuntos básicos de equações, chamadas equações MESH. Todas as equações utilizadas para descrever a destilação em estado estacionário (multiestágios e contracorrente) estão representadas abaixo:

- (a) Equação de balanço material = M
- (b) Relações de equilíbrio = E
- (c) Equações de Soma = S
- (d) Equações de balanço energético = H

Dessa forma, converte-se a coluna em um conjunto de variáveis e equações. As variáveis das equações MESH frequentemente se referem a variáveis de estado tais como: temperaturas dos pratos, vazões de líquido e vapor entrando e saindo de cada estágio e o perfil das concentrações de cada componente nas fases líquida e vapor.

Algumas especificações podem ser feitas com relação às colunas de destilação devido ao grau de complexidade em sua resolução. Em geral, quando se observa situações não convencionais nas colunas de destilação, tem-se um grau de complexidade maior em sua resolução.

A seguir, são apresentadas as equações que caracterizam uma coluna de destilação (simplificada em um primeiro momento), presentes as Figuras 2.31 e 2.32, as quais mostram variáveis relacionadas às colunas e ao estágio, conforme Kister (1992). As respectivas modificações no balanço de energia, que correspondem as trocas de calor que acontecem ao longo da coluna com integração interna de calor serão detalhadas nos balanços de energia da CDIIC de acordo com o modelo apresentado em Nakaiwa (2003).

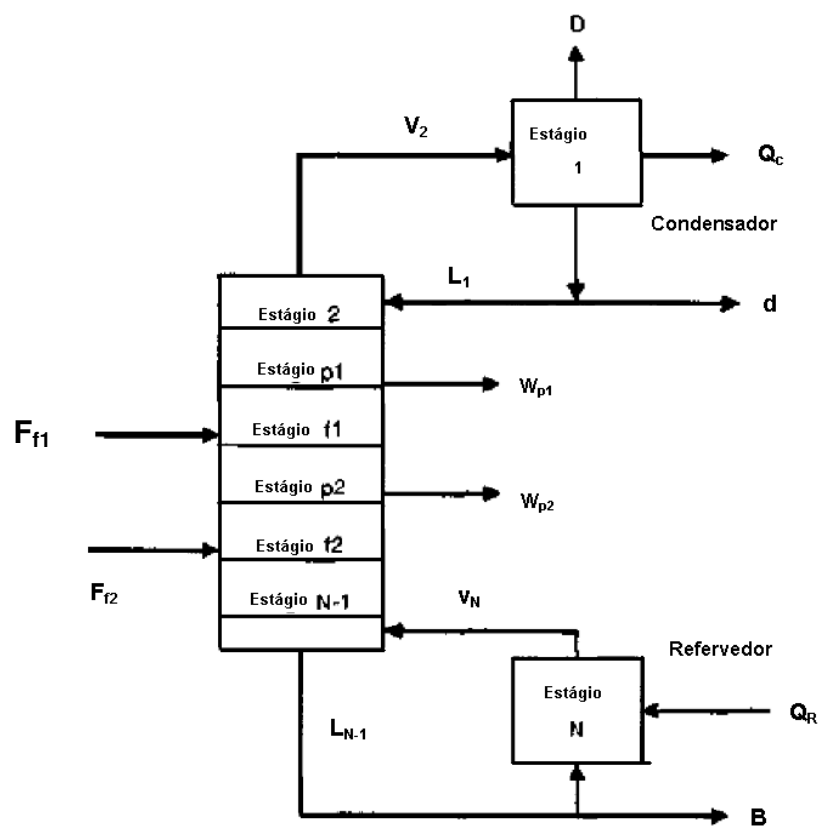


Figura 2.29. Representação de uma coluna de destilação genérica (Fonte: Adaptado de KISTER, 1992).

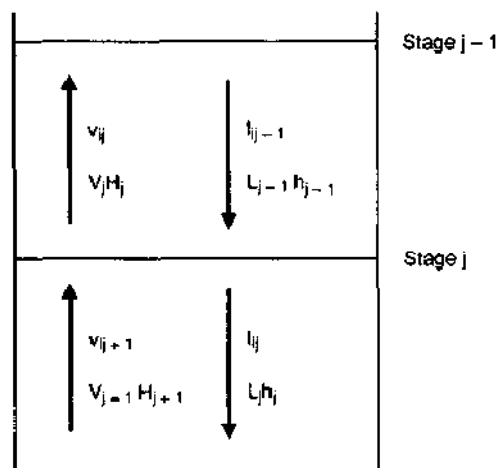


Figura 2.30. Desenho esquemático de um estágio de equilíbrio (Fonte: KISTER, 1992).

x_{ij} = composição do líquido i no estágio j

y_{ij} = composição do vapor do componente i no estágio j

n = número de estágios na retificação

m = número de estágios no esgotamento

j = estágio em questão

i = componente em questão

f_i = vazão de alimentação do componente i

d_i = vazão de destilado do componente i

b_i = vazão de produto de fundo do componente i

v_{ij+1} = vazão interna de vapor do componente i no estágio j+1

l_{ij-1} = vazão interna de líquido do componente i no estágio j-1

v_{ij} = vazão interna de vapor do componente i no estágio j

l_{ij} = vazão interna de líquido do componente i no estágio j

v_{if} = vazão de vapor do componente i no estágio de alimentação

l_{if} = vazão de líquido do componente i no estágio de alimentação

l_{iF} = vazão do componente i entrando na coluna considerando alimentação líquida

L_j = vazão total de líquido no estágio j

F = vazão total da mistura na alimentação

B = vazão total de produto de fundo

D = vazão total de destilado.

F_f = vazão total de alimentação no estágio de alimentação

F_{f1} = vazão total de alimentação no primeiro ponto de alimentação, f1

F_{f2} = vazão total de alimentação no segundo ponto de alimentação, f2

L_f = vazão total de líquido no estágio de alimentação

L_j = vazão total de vapor no estágio j

V_f = vazão total de vapor no estágio de alimentação

V_j = vazão total de vapor no estágio j

h_N = entalpia molar da fase líquida no estágio N, (refervedor)

H_N = entalpia molar da fase vapor no estágio N, (refervedor)

h_1 = entalpia molar da fase líquida no estágio 1, (condensador)

H_1 = entalpia molar da fase vapor no estágio 1, (condensador)

h_j = entalpia molar da fase líquida no estágio j

H_j = entalpia molar da fase vapor no estágio j

H_D = entalpia molar do destilado da fase líquida ou vapor

H_F = entalpia da alimentação englobando todas as fases

Q_C = energia retirada no condensador

Q_R = energia retirada no fervedor

E_{MVij} = Eficiência Murphree do componente i no estágio j

E_{ij} = Eficiência de vaporização do componente i no estágio j

q_j = quantidade de calor nominal trocada

W_{p1} = retirada total de produto no primeiro ponto de retirada, p1

W_{p2} = retirada total de produto no primeiro ponto de retirada, p2

NR = número total de estágios na retificação

Equações de soma

A soma das frações molares em cada estágio é igual à unidade tanto na fase líquida quanto na fase vapor:

$$\sum_{i=1}^C x_{ij} - 1 = 0 \text{ (líquido)} \quad (33)$$

$$\sum_{i=1}^C y_{ij} - 1 = 0 \text{ (vapor)} \quad (34)$$

O balanço de componentes

O balanço geral por componente é dado por:

$$f_i - d_i - b_i = 0 \quad (35)$$

O balanço de componente para um simples estágio é dada por:

$$v_{ij+1} + l_{ij-1} - v_{ij} - l_{ij} = 0 \quad (36)$$

l_{ij} = vazão interna de líquido do componente i no estágio j

Na alimentação o estágio tem-se (o termo l_{iF} simboliza a fração líquida sendo alimentada no caso de vapor sendo alimentado à equação muda):

$$v_{if+1} + l_{if-1} - v_{if} - l_{if} + l_{iF} = 0 \quad (37)$$

Balanço total material

Para um simples estágio:

$$V_{j+1} + L_{j-1} - V_j - L_j = 0 \quad (38)$$

Na alimentação o balanço total fica:

$$V_{f+1} + L_{f-1} - V_f - L_f + F_f = 0 \quad (39)$$

Equações de equilíbrio

As equações de equilíbrio sombolizam o equilíbrio termodinâmico que teoricamente é alcançado no estágio em questão. Segue abaixo uma equação que representa o equilíbrio:

$$y_{ij} = K_{ij} \cdot x_{ij} \quad (40)$$

A constante K é uma função complexa que depende de variáveis como temperatura e pressão, além da composição da fase vapor e líquida de cada componente da mistura. Ela mede a distribuição de um componente na fase vaor com relação à fase líquida. Mais detalhes sobre o equilíbrio termodinâmico na coluna seguem na seção (1.8) do trabalho.

Equações de balanço de energia

Balanço total de energia para uma coluna com somente uma alimentação é descrita por:

$$FH_F - DH_D - Bh_B + Q_R - Q_C = 0 \quad (41)$$

Para um simples estágio :

$$V_{j+1}H_{j+1} - L_{j-1}H_{j-1} - V_jH_j - L_jh_j = 0 \quad (42)$$

Para o refeedor :

$$L_{N-1}h_{N-1} - V_NH_N - B h_N + Q_R = 0 \quad (43)$$

Para o condensador:

$$V_2H_2 - L_1h_1 - dh_1 - DH_1 - Q_C = 0 \quad (44)$$

O resfriamento no condensador é provido por h_1 (a entalpia do refluxo L_1 e o líquido destilado d). A equação (40) trata de um condensador parcial com líquido e vapor como produtos.

Eficiência de estágios

Conforme abordado anteriormente, o modelo de estágios de equilíbrio afirma que as correntes de líquido e vapor que deixam um estágio teórico (prato) estão em completo equilíbrio. Esta idealização, no entanto, não ocorre em uma coluna real. A fim de corrigir as não idealidades, introduz-se o conceito de eficiência de estágios que corrige as suposições da idealidade da coluna teórica. Uma vez que o número de estágios ideais é estabelecido, o número de estágios reais é calculado utilizando a eficiência de estágio.

Pode-se incorporar o conceito de eficiência nas equações MESH tal como apresentou Holland e Liapis (1983) com o conceito de eficiência de vaporização baseado na eficiência de Murphree como sege abaixo:

$$E_{ij} = E_{MVij} + (1 - E_{MVij}) \frac{y_{ij+1}}{K_{ij} \cdot x_{ij}} \quad (45)$$

Como mostrado por Lockett (1986), a maior desvantagem da eficiência de vaporização é que ela varia com a composição próxima ao topo; uma coluna que trabalha com alta pureza tem a eficiência se aproximando da unidade no topo. Dessa forma, a eficiência de vaporização não reflete verdadeiramente as não idealidades desses estágios.

Por isso, a melhor escolha é proceder com o cálculo de estágios de equilíbrio normalmente e posteriormente aplicar uma eficiência global para corrigir as não idealidades dos estágios.

2.7.3 Modelagem aplicada à CDIIC

Para a CDIIC ocorrem algumas modificações com relação ao modelo geral de uma coluna de destilação conforme apresentado em Kister (1992).

Primeiramente, tem-se a modelagem de um conjunto de duas colunas da maneira que foi mostrada anteriormente, uma correspondente a seção de retificação e a outra correspondente a seção de esgotamento. Em função das trocas térmicas que ocorrem entre os estágios da CDIIC, pode-se verificar que as equações correspondentes ao balanço de energia têm algumas modificações. Uma vez que só a energia é trocada (não ocorre transferência de massa entre as seções), as modificações somente se apresentam no balanço de energia (NAKAIWA, 2003).

Balanço total de energia para a CDIIC:

$$FH_F - DH_D - Bh_B + Q_R - Q_C = 0 \quad (46)$$

Para um simples estágio na retificação, tem-se:

$$V_{j+1}H_{j+1} - L_{j-1}H_{j-1} - V_jH_j - L_jh_j - q_j = 0 \quad (47)$$

Para um simples estágio no esgotamento, tem-se:

$$V_{j+1}H_{j+1} - L_{j-1}H_{j-1} - V_jH_j - L_jh_j + q_j = 0 \quad (48)$$

O Termo q_j nas equações do balanço de energia para um simples estágio, no esgotamento e na retificação, simboliza o valor da troca térmica nominal entre os estágios térmicamente acoplados. É importante ressaltar que o valor q_j (em módulo) é o mesmo na seção de retificação e na de esgotamento. Não necessariamente todos os estágios estão termicamente acoplados. Nos estágios em que isso não ocorre o balanço de energia segue sem alteração, como apresentado na equação (41). O termo da troca de calor no estágio j corresponde à troca térmica nominal equivalente a equação (1):

$$Q = q_j = U \cdot A \cdot (T_{ret} - T_{esg}) \quad (49)$$

Na equação (40) do balanço geral não se verifica diferença com relação à modelagem usual. Na verdade, se for considerado o balanço de uma das seções separadamente, um termo de somatório das trocas de energia aparece $\sum_{j=1}^{NR} q_j$ (exemplo para a seção de retificação). Como no balanço total de energia (40) são consideradas que as duas seções estão em um único volume de controle (onde a energia que sai de uma seção entra em outra) tem-se que no balanço geral o termo do somatório das energias trocadas se anula (desconsiderando eventuais perdas de energia no processo).

2.7.4 Limitações da modelagem matemática da CDIIC

Ao se efetuar a simulação CDIIC no simulador Aspen Plus[®] utiliza-se a coluna RADFRAC. Essa coluna no simulador, como já mencionado anteriormente, é utilizada porque ela permite que correntes de calor possam ser transportadas de uma coluna (que corresponde à seção de retificação no ambiente de simulação) para outra coluna (que corresponde à seção de esgotamento) na simulação. O método de resolução utilizado no simulador corresponde ao método de Boston (1980 apud KISTER, 1992).

O principal problema é que as colunas no simulador, por si só, não são capazes de retratar todos os fenômenos envolvidos na CDIIC. E pouca informação sobre uma nova modelagem envolvendo todos esses fenômenos se tem conhecimento.

Um detalhamento dos principais princípios da modelagem da CDIIC deve incluir as variações da retenção do líquido em cada estágio, balanço de energia, comportamento não ideal dos estágios (que pode ser estimado por eficiência de prato), queda de pressão através dos estágios e equação não linear de Francis para o cálculo da altura de líquido no prato. É muito importante incorporar um modelo termodinâmico para representar as não idealidades de fase no modelo da CDIIC, isso porque na seção de retificação trabalha-se em altas pressões. As não idealidades de fase na CDIIC ideal são raramente reportadas na literatura (JANA, 2010).

Recentemente, Kano et al. (2007) desenvolveram um rigoroso modelo para a CDIIC ideal usando o Aspen Custom Modeler. Nesta plataforma do simulador é permitido ao usuário trabalhar com as equações do modelo.

Muitas dificuldades são encontradas em se trabalhar rigorosamente com os modelos matemáticos da coluna (principalmente quando se trata de trabalhar dentro do simulador), tanto isso é verdade que trabalhos ministrados pelos grupos de Japoneses e Holandeses até o recente ano do trabalho foram apresentados no simulador sem levar em consideração tais limitações citadas em Jana (2010).

Gadalla (2009), que é um pesquisador da configuração CDIIC especializado em simulações, apresenta em seu artigo um guia de como modelar a nova configuração no Aspen plus[®]. Ele explica todos os pontos-chave para se realizar a simulação da nova configuração, embora sem levar em consideração as limitações já apresentadas.

De Rijke (2007), apresenta em alguns dos capítulos de sua tese de doutorado estudos simulações com misturas binárias que se realizaram no simulador Aspen Plus[®]. Mais uma vez, não se levam em consideração as limitações já apresentadas.

Iwakabe et al. (2006), propôs um modelo numérico para o cálculo da CDIIC de uma mistura multicomponente e validou o seu modelo com resultados mostrados pela coluna RADFRAC presente no simulador Aspen Plus[®].

2.8 Eficiência de pratos

A maioria das simulações em softwares comerciais são feitas considerando-se que o equilíbrio é totalmente alcançado no estágio denominado estágio teórico. Todavia, em uma operação real, os estágios raramente, ou mesmo nunca, operam em equilíbrio apesar das tentativas para se atingir essa condição através de um projeto apropriado e da escolha de condições adequadas de operação. O meio usual de se considerar o desvio do equilíbrio é a incorporação do conceito de eficiência nas relações de equilíbrio (KRISHNAMURTHY e TAYLOR, 1985).

Uma vez que o número de estágios ideais é encontrado (pelo simulador) o número de estágios reais pode ser calculado utilizando a eficiência de estágio.

Uma das principais dificuldades encontradas para o cálculo da eficiência de estágio para sistemas binários tais como etanol-água é que a eficiência do prato aumenta à medida que o componente mais volátil aumenta sua concentração e deve aproximar da unidade na parte superior da coluna (KING, 1980). Dessa maneira, a eficiência muda ao longo da

coluna, mas não significativamente os coeficientes de transferência de calor e massa (BARROS, 1997).

Abaixo segue um descritivo de importantes conceitos relacionados ao tema, bem como alguns modelos de eficiência; destes, alguns serão utilizados posteriormente no cálculo da eficiência global da CDIIC. Muito do que será descrito conta com as contribuições dos trabalhos de Barros (1997), Domingues (2005) e Kister (1992).

Eficiência de ponto:

Segundo a definição de KISTER (1992):

$$E_{OP} = \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{y_n^* - y_{n-1}} \right)_{point} \quad (50)$$

Onde y_n^* é a composição do vapor em equilíbrio com o líquido no ponto **n**, y_n é a composição atual do vapor naquele ponto. Se houver um gradiente de concentração no prato, a eficiência de ponto irá variar ponto a ponto no prato.

Expressando em termos de unidades de transferência de massa:

$$E_{OP} = 1 - \exp(-N_{OG}) \quad (51)$$

N_{OG} = número global de unidades de transferência

E_{OP} = eficiência de ponto

Os fundamentos da transferência de massa são necessários, geralmente discutidos em relação à teoria dos dois filmes da fase líquida e da fase gás. A teoria postula resistências à transferência de massa em ambos os filmes (líquido e vapor) próximos à interface vapor-líquido (KISTER, 1992).

Para alcançar o valor do N_{OG} considera-se a soma das unidades de transferência da fase líquida e vapor equação (52) e o equilíbrio alcançado na interface como calculada em (51). Simplificadamente, as equações referentes à eficiência de ponto seguem abaixo:

$$y_i = m \cdot x_i + b \quad (52)$$

y_i = composição do vapor na interface líquido-vapor no estágio

x_i = composição da fase líquida na interface líquido-vapor no estágio

m = coeficiente angular do equilíbrio que é considerado linear

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{\lambda}{N_L} \quad (53)$$

N_G = número de unidades de transferência de massa na fase vapor

N_L = número de unidades de transferência de massa na fase líquida

N_{OG} = número de unidades totais de transferência de massa

Onde N_G , N_L são os parâmetros de transferências de massa da fase gás e da fase líquida respectivamente. O parâmetro λ é a razão entre a vazão de líquido e gás pela seção em questão (retificação e esgotamento).

$$N_G = k_G \cdot a_i \cdot t_G \quad (54)$$

k_G = coeficiente de transferência de massa na fase vapor, (m/s)

a_i = área interfacial por unidade de volume (m^2/m^3)

t_G = tempo de residência do gás, s

$$N_L = k_L \cdot a_i \cdot t_L \quad (55)$$

k_L = coeficiente de transferência de massa na fase líquida, (m/s)

a_i = área interfacial por unidade de volume (m^2/m^3)

t_L = tempo de residência do líquido, s

Algumas considerações no processo de transferência de massa são feitas tais como a de que a fase gasosa seja a fase controladora, ou seja, a resistência à transferência de massa pela fase gasosa é dominante em relação à fase líquida. Lockett (1986) mostrou que a resistência da fase líquida a transferência de massa aumenta com a razão de líquido no prato (KISTER, 1992).

Comportamento da mistura de líquido sobre o prato

Algumas considerações são feitas no desenvolvimento da eficiência de ponto tais como assumir que a fase líquida está completamente misturada e que a fase vapor flui através do líquido em fluxo empistonado, ou seja, não ocorre mistura de vapor no eixo horizontal. Lewis (1936) foi o primeiro a trabalhar as condições de mistura do líquido e vapor no estágio em questão, assumindo fluxo empistonado do líquido em todos e diferentes regimes de mistura do vapor no estágio.

Eficiência de Murphree

O conceito é igual ao da eficiência de ponto contanto ao invés de apenas um ponto a eficiência Murphree se aplica a todo estágio. É definida como a integração de das diversas eficiências de ponto ao longo do prato considerando o tipo de escoamento de líquido neste (DOMINGUES, 2005).

$$E_{MV} = \left(\frac{y_n - y_{n-1}}{y_n^* - y_{n-1}} \right)_{estágio} \quad (56)$$

Onde y_n^* é a composição do vapor em equilíbrio com o líquido no estágio n , y_n é a composição atual do vapor naquele estágio.

Eficiência de Global:

A eficiência global de colunas de destilação foi definida por LEWIS (1936) como a razão entre os estágios teóricos (N_t) e o número de estágios reais (N_r) que são precisos para uma dada separação à uma mesma razão de refluxo:

$$E_{oc} = \frac{N_t}{N_r} \quad (57)$$

Segundo Kister (1992), embora muitos estudos revelem limitações matemáticas na utilização da eficiência Global para o cálculo do número de estágios reais para uma dada separação, o conceito ainda é amplamente utilizado e de longe o mais utilizado por um engenheiro projetista.

A eficiência global da coluna pode ser calculada a partir da eficiência de Murphree usando a relação desenvolvida por Lewis (1936) segue na equação (57):

$$E_{oc} = \frac{\ln[1 + E_{MV}(\lambda - 1)]}{\ln \lambda} \quad (58)$$

2.8.1 Métodos para prever a eficiência de estágios

Modelos para prever a eficiência de estágios em uma coluna de destilação foram apresentados ao longo dos anos. São subdivididos aqui em métodos teóricos de predição e métodos empíricos de predição.

2.8.1.1 Métodos teóricos para prever a eficiência de estágios

Modelos teóricos correspondem aos modelos que levam em consideração o cálculo da eficiência baseado na teoria da resistência de transferência de massa entre os filmes líquido e gasoso. Existem inúmeros estudos a esse respeito na literatura, uma revisão bibliográfica completa de todos ou da maioria destes pode ser encontrada em Barros (1997), Domingues (2005) e Kister (1992).

Em acréscimo aos modelos de predição que consideram a resistência à transferência de massa nas interfaces líquido e vapor, modelos mais incrementados como os que serão descritos logo adiante levam em consideração modelos hidrodinâmicos para dispersão acima do prato. Em verdade todos esses modelos visam uma contribuição mais acurada decorrente de um maior detalhamento teórico para o cálculo da eficiência de ponto (posteriormente calcula-se a eficiência de Murphree uma vez escolhido o modelo de mistura para o líquido e vapor acima do prato).

MODELO DE GARCIA E FAIR (2000)

Dentre inúmeros trabalhos na literatura, em respeito aos modelos de predição teóricos, vale comentar a respeito do modelo de Garcia e Fair (2000) que é proveniente do trabalho de Prado e Fair (1990). O modelo de Garcia e Fair (2000) foi estendido para predição de eficiência de sistemas orgânicos, uma vez que o trabalho inicial de Prado e Fair (1990) somente teria validade para o sistema ar-água. No modelo de Prado e Fair (1990), leva-se em consideração o modelo de dispersão hidrodinâmico acima de um prato perfurado e em escoamento cruzado (DOMINGUES, 2005).

O regime de espuma é o mais comumente encontrado em uma coluna de destilação e o principal enfoque do seu trabalho (PRADO E FAIR, 1990). O regime de espuma é caracterizado por uma mistura líquida, contendo uma variedade de tamanhos de bolhas. A distribuição do tamanho de bolhas deve ser predita a fim de que se determine a área de transferência de massa (DE RIJKE, 2007).

O modelo prevê o cálculo de unidades de transferência de massa da fase líquida e vapor para seis regiões do prato. Com a contribuição das unidades de transferência de massa nessas regiões pode se calcular a eficiência de ponto com uma correlação parecida com a equação (58) como segue abaixo:

$$E_{OP} = FJ \cdot (1 - e^{-N_{GFJ}}) + FLB \cdot (1 - e^{-N_{GFJ}}) + FSB \cdot (1 - e^{-N_{G5}}) \quad (59)$$

N_G = número de unidades e transferência de massa na fase vapor

N_{GFJ} = número de unidades de transferência de massa na fase vapor Zonas 1,2 e 6

N_{G5} = número de unidades de transferência de massa na fase vapor Zona 5

FJ = fração dos furos ativos no prato que estão em jetting

FLB = fração dos furos no prato que estão produzindo bolhas grandes

FSB = fração dos furos ativos no prato que estão produzindo bolhas pequenas

Um detalhamento melhor de todas as variáveis pertinentes ao modelo e o procedimento para seu cálculo são encontradas em Domingues (2005) ou em Prado e Fair (1990).

A equação (58) mostrada acima se refere ao modelo de PRADO E FAIR (1990) como já dito antes GARCIA E FAIR (2000) estenderam a validade do modelo para sistemas orgânicos (principais aplicações em hidrocarbonetos). Para extensão foi necessário modificar certos parâmetros, para levar em conta as variações das propriedades físicas em relação às condições hidrodinâmicas do prato. Estes parâmetros são (DOMINGUES, 2005):

- (a) Fatores ϕ e k de correção da difusividade efetiva do líquido e do gás.
- (b) Altura do jet, h_1
- (c) Diâmetro médio Sauter das bolhas, d_{BLS} e d_{BSS}
- (d) Velocidade de subida das bolhas pequenas, u_{SB}
- (e) Distribuição do tamanho das bolhas, d_{BS} e d_{BL}
- (f) Fração de bolhas pequenas na espuma
- (g) $FLC=0$, consideração onde todos os furos do prato tem passagem de vapor.

h_1 = Altura do jet (m)

ϕ = constante do modelo de prado (1986)

κ = constante do modelo de prado (1986)

d_{BLS} = Diâmetro médio de Sauter das bolhas grandes na zona 3 (m)

d_{BSS} = Diâmetro médio de Sauter das bolhas pequenas na zona 5 (m)

u_{SB} = Velocidade terminal de subida das bolhas pequenas (d_{BS}) nas zonas 2 e 4 (m/s)

d_{BS} = Média aritmética do diâmetro das bolhas pequenas na zona 2 e 4 (m)

d_{BL} = Média aritmética do diâmetro das bolhas grandes na zona 2 e 4 (m)

2.8.1.2 Métodos Empíricos para predição da eficiência de estágios

Correlação de (1946)

A correlação de (1946) vem sendo utilizada pela indústria durante décadas. Essa correlação é baseada em 31 colunas de plantas, incluindo separação de hidrocarbonetos, compostos clorados e álcoois (KISTER, 1992).

O método não leva em conta os parâmetros do projeto do prato e apenas inclui duas propriedades físicas do sistema (BARROS, 1997).

Locket (1986) expressou a curva de para pratos com borbulhadores da seguinte forma:

$$E_{oc} = 9,05 \cdot (\mu_L \cdot \alpha)^{-0,245} \quad (60)$$

Onde a volatilidade relativa (α) e a viscosidade do líquido (μ_L) são tomadas na média aritmética na temperatura no fundo e no topo da coluna. O método prediz 90% dos dados de eficiência com 10% de erro, para pratos com borbulhadores. Segundo Kister (1992), o método de possui razoável precisão, boa confiabilidade e simplicidade, e é recomendável.

Van Wilke (1992):

Correlação utilizada para estimar a eficiência de prato de Murphree é expressa em termos adimensionais, baseada em dados binários para pratos com borbulhadores e perfurados (KISTER, 1992). O desvio médio dos valores experimentais foi de 10,6% (MACFARLAND et al ., 1972).

A tendência no desenvolvimento dessa correlação era a de se levar em conta o maior número possível de variáveis; assim, a correlação de Van Winkle embora considere grande número possível de variáveis, está em desacordo com alguns conceitos bem estabelecidos, como por exemplo a eficiência de prato ser inversamente proporcional à difusividade de líquido ; seu uso é desaconselhável , pois pode conduzir resultados inteiramente errôneos (BARROS, 1997).

A correlação para e eficiência de Murphree segundo o modelo empírico de Van Wilke (1972) segue abaixo:

$$E_{MV} = 6,8 \cdot \left(\frac{\sigma}{\mu_L \cdot u_A} \right)^{0,115} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\rho_L \cdot D_L} \right)^{0,215} \cdot \left(\frac{h_w \cdot u_H \cdot \rho_G}{\mu_L} \right)^{0,1} \quad (61)$$

2.9 Caracterização termodinâmica do sistema

Um dos fatores mais importantes na termodinâmica, segundo Smith et al. (2005), é o conceito de equilíbrio como uma condição estacionária, ou seja, a tendência da ausência de modificações em escala macroscópica. O equilíbrio de um sistema pode ser descrito como aquele, no qual, todas as forças estejam completamente equilibradas. Deve-se levar em conta não apenas a invariabilidade temporal do sistema, mas a invariabilidade espacial de certas propriedades macroscópicas, como os potenciais termodinâmicos. Desta forma o equilíbrio termodinâmico é caracterizado pela inexistência de qualquer força motriz para transporte de massa, energia ou quantidade de movimento.

A termodinâmica contempla a interação entre as moléculas e desenvolve modelos os quais permitem estimar com maior precisão o comportamento esperado de misturas de substâncias (nas diferentes fases que estes podem ser encontrados). Os modelos consideram que a mistura dificilmente se comporta de maneira ideal, dessa forma são consideradas não idealidades nas fases.

Nesta abordagem uma equação de estado, através do coeficiente de fugacidade, é usada para prever o comportamento e as não idealidades da fase vapor, enquanto um modelo de energia livre de Gibbs em excesso, através do coeficiente de atividade, é usado para prever o comportamento e as não idealidades da fase líquida. Esta é uma abordagem tradicional, que pode ser aplicada a uma ampla variedade de misturas.

Segundo Dias (2008), a razão de equilíbrio K_i para um componente i pode ser definida em termos do coeficiente de fugacidade na fase vapor e do coeficiente de atividade na fase líquida por meio da expressão representada na equação (62):

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i \cdot f_i^o}{P \cdot \phi_i} \quad (62)$$

Em que γ_i é o coeficiente de atividade do componente i na fase líquida, f_i^o é a fugacidade padrão do componente i , P é a pressão do sistema e ϕ_i é o coeficiente de fugacidade na fase vapor do componente i .

A energia livre de Gibbs em excesso é representada para uma mistura multicomponente com n_i mols do componente i , como segue na equação (63).

$$G^E = RT \sum (n_i \ln \gamma_i) \quad (63)$$

Diversos modelos diferentes calculam o coeficiente de atividade γ a partir de expressões derivadas do cálculo da energia livre de Gibbs em excesso e da equação de Gibbs-Duhem. Dentre alguns modelos para o cálculo do coeficiente de atividade podem ser citados os Modelos de Wilson, NRTL (Non random two liquid) e UNIQUAC abreviatura de modelo Universal Quase Químico (Universal Quasi-Chemical), que é excelente modelo, mais detalhes deste pode ser encontrado em Abrams e Prausnitz (1975).

Para as não idealidades da fase vapor, frequentemente se utilizam equações de estado empíricas. Sendo que destas, as que têm sido usadas com maior proveito são as equações de estado cúbicas. Algumas das mais relevantes são (em ordem cronológica): a equação de Van der Waals (1873), Redlich-Kwong (1949), Soave-Redlich-Kwong (1972) e Peng Robinson (1976).

2.10 Eficiência Termodinâmica da CDIIC

A eficiência termodinâmica de uma coluna de destilação normal é muito baixa. Um dos principais fatores que fazem com que a eficiência da coluna seja baixa, uma vez que o calor é o agente de separação, são as introduções e remoções externas de energia no refeedor e no condensador, respectivamente. Essa peculiaridade da destilação causa uma grande degradação da energia causando uma eficiência global termodinâmica bem menor que 10% (HUMPHREY, 1991).

A eficiência termodinâmica de uma CDIIC ideal foi discutida por Nakaiwa (2003) e Liu (2000) e segue nos próximos parágrafos como apresentada no trabalho de De Rijke (2007).

A eficiência máxima termodinâmica ($E_{\max}$) define-se como o mínimo trabalho termodinâmico ($W_{\min}$) para a separação dividida pela mínimo de energia requerida para o processo para a separação ($Q_{\min}$), sendo para a destilação convencional de um sistema ideal binário como segue na equação (64) abaixo:

$$E_{\min, \text{convencional}} = \frac{W_{\min}}{Q_{\min, \text{convencional}}} = \frac{RT \sum_{i=1}^2 X_i \ln X_i}{\Delta H_{\text{vap}, B} \left[\frac{1}{\alpha_{12} - 1} + X_{F1} \right]} \quad (64)$$

Para a CDIIC ideal funcionando sem refeedor e condensador e com alimentação de líquido saturado, a separação completa faz-se pelo trabalho do compressor. Assim, a energia requerida no compressor segue em (65):

$$Q_{\text{HIDiC}} = W_{\text{compressor}} = VRT_{in} \frac{K}{K-1} \left[\left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^{\frac{K-1}{K}} - 1 \right] \quad (65)$$

Onde V (Kmol/s) é o fluxo de vapor molar à saída do topo da coluna, K (-) é a relação entre o calor específico a pressão constante e volume constante, P_{in} (kPa) é a pressão absoluta na entrada, neste caso a pressão na seção de esgotamento e P_{out} (kPa) é a pressão absoluta à saída, que é a mesma pressão na seção de retificação.

Combinando as equações (64) e (65) tem-se a eficiência termodinâmica de uma coluna CDIIC, para um sistema de separação ideal binário seguindo abaixo (66):

$$E_{\text{HIDiC}} = \frac{F.RT \sum_{i=1}^2 x_i \ln x_i}{V.RT_{in} \frac{K}{K-1} \left[\left(\frac{P_{out}}{P_{in}} \right)^{\frac{K-1}{K}} - 1 \right]} \quad (66)$$

A energia gasta no compressor determina a eficiência da CDIIC. A energia gasta no compressor depende de duas variáveis: a relação de pressões (P_{out}/P_{in}) e o fluxo de vapor que entra ao compressor (V). Este fluxo é também influenciado pela vaporização parcial do líquido a alta pressão que é retroalimentado da seção de retificação. Para maximizar a eficiência termodinâmica da CDIIC, a razão de compressão e carga de vapor entrando no compressor deve ser minimizada (DE RIJKE, 2007).

A Revisão Bibliográfica como foi apresentada tentou mostrar toda a teoria envolvida em uma eventual simulação da CDIIC. A teoria abrangeu principalmente os cálculos de troca térmica, que serão muito importantes nos resultados de gastos energéticos na coluna.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo esta desenvolvida a aproximação genérica da CDIIC no simulador entre outros conceitos importantes. Uma metodologia que contempla o uso dos softwares Aspen Plus® e o software Excel será apresentada, também em materiais e métodos constam às considerações utilizadas para se proceder às simulações.

3.1 Descrição geral

A configuração CDIIC pode ser avaliada a partir da coluna convencional, a qual se realiza a separação da mistura de interesse ou efetua-se uma maior concentração no produto de topo. A descrição do funcionamento e da escolha de alguns parâmetros segue nos parágrafos abaixo e pode ser verificada em Gadalla (2009).

É na coluna convencional (C.C.) que se baseiam vários parâmetros de especificação da configuração CDIIC, principalmente no que diz respeito ao número de estágios das duas colunas. A coluna convencional é dividida em duas outras colunas no simulador para se realizar a configuração genérica da CDIIC; uma coluna correspondendo à seção de retificação e uma à seção de esgotamento. O local relativo à alimentação é mantido inalterado, de modo que a seção superior da coluna convencional será a coluna de retificação (no simulador) da nova configuração, enquanto a seção inferior corresponde à coluna de esgotamento.

Como consequência pode-se assumir que o número de estágios teóricos das duas seções tanto na CDIIC quanto na coluna convencional se equivalem.

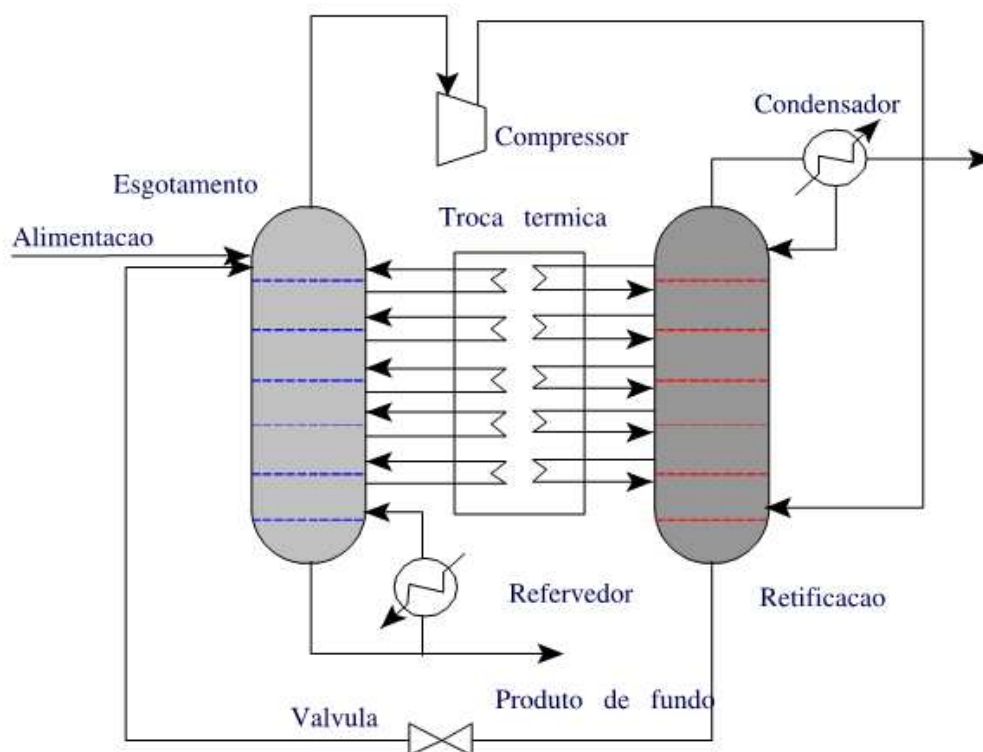


Figura 3.1. Representação esquemática da CDIIC no ambiente de simulação (Fonte: Adaptado de GADALLA, 2006)

A configuração CDIIC pode ser observada na Figura 3.1. Como pode ser visto, trata-se de duas colunas de destilação separadas, correspondendo à seção de esgotamento e à seção retificação da coluna convencional (C.C.) cada uma (na Figura 3.1 elas são chamadas de coluna). Existe uma diferença de pressão entre as colunas na configuração CDIIC por causa da re-compressão do vapor; o vapor de topo da coluna de esgotamento é comprimido e, então, é alimentado no fundo da seção de retificação. Assim, a coluna de retificação opera a altas pressões e altas temperaturas. O líquido do fundo da coluna de retificação é alimentado no topo da coluna de esgotamento como uma corrente de refluxo. A pressão da corrente de líquido reciclada da coluna de retificação é equalizada à pressão da coluna de esgotamento através de uma válvula de alívio. A válvula de alívio trata-se de uma válvula que proporciona uma alta perda de carga. O vapor saindo do topo da coluna (seção) de retificação é o produto leve (ou a mistura mais rica no componente mais volátil), enquanto o produto pesado é a corrente de fundo da coluna (seção) de esgotamento. As

duas colunas são arrançadas de tal forma que a energia proveniente da coluna de retificação é aproveitada na coluna de esgotamento.

A Figura 3.1 corresponde a uma visualização da configuração CDIIC em termos de simulação (simulador Aspen Plus[®]). No simulador, o arranjo dos blocos de cálculo (colunas, compressor etc...) se dispõe da maneira como foi mostrada na Figura 3.1 com exceção das trocas de calor que apresentam diferente visualização. Na prática, o que se tem é uma coluna acoplada dentro da outra, assim como segue na Figura 3.2 abaixo, podendo, ou não, estar provida de acessórios para aumento da troca de calor, como já foi discutido no Item 2.4.

É importante salientar que a CDIIC trata-se somente de uma coluna que é dividida nas seções de retificação e esgotamento. Para se proceder com a simulação da CDIIC (no simulador) utilizam-se duas colunas diferentes, que representam as seções de retificação e esgotamento.

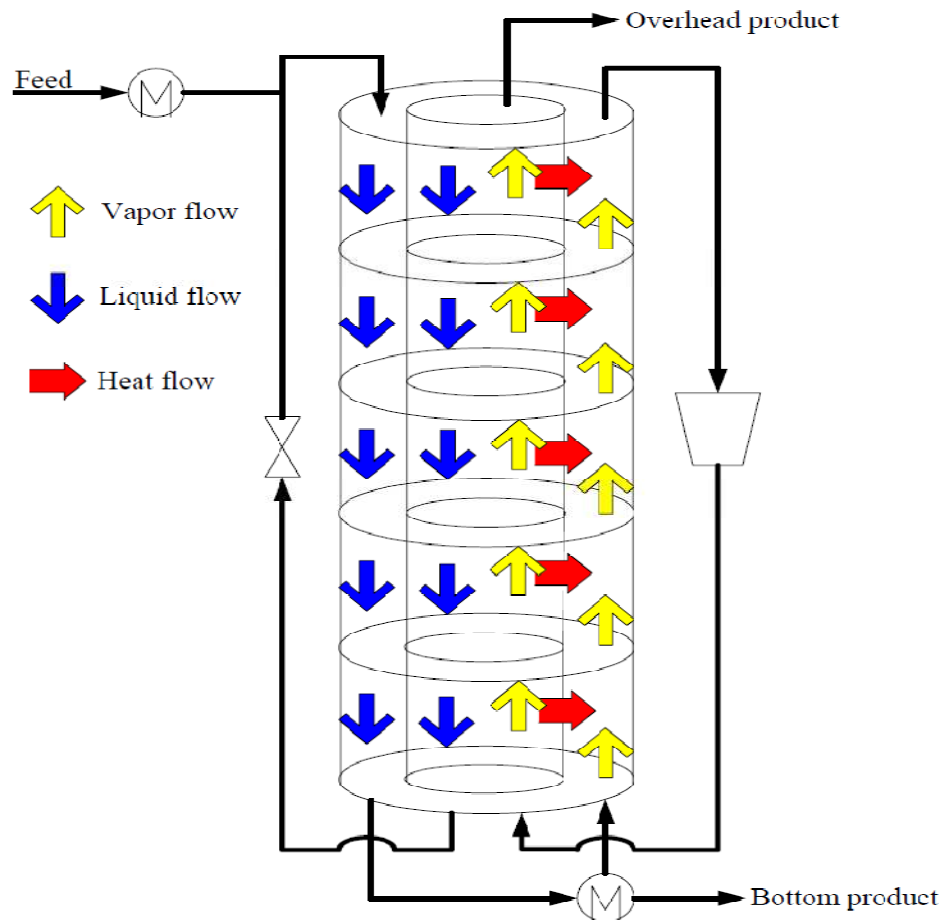


Figura 3.2. Diagrama esquemático da estrutura interna da CDIIC (Fonte: LEE, 2007).

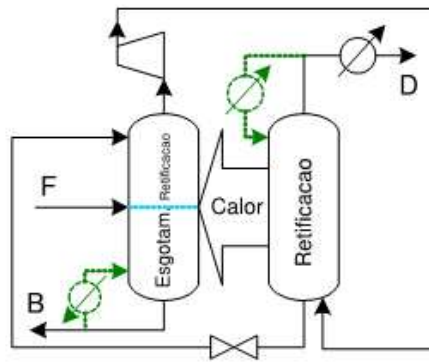
O objetivo principal da CDIIC é a troca de calor entre os estágios da seção de retificação e de esgotamento, essa troca visa suprir a necessidade de energia que é fornecida no refeedor de uma coluna de destilação. Em virtude dessa troca térmica, a energia introduzida no refeedor diminui (no caso da i-CDIIC ela corresponde à zero). Tem sido mostrado que a CDIIC, além de oferecer um mais alto potencial de diminuição na demanda energética dentre as alternativas convencionais, também tem a habilidade de aumentar a recuperação do produto (CAMPBELL, 2008).

3.1.1 Efeitos da configuração da CDIIC

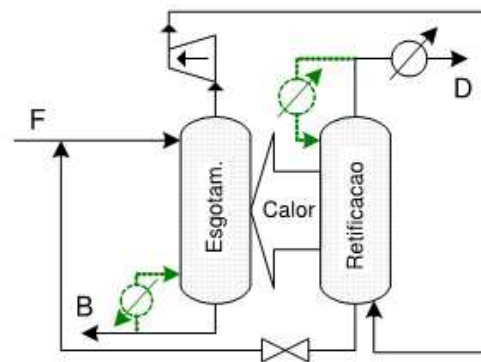
Um problema em potencial com relação à realização das simulações da CDIIC é que nem sempre se tem a situação da CDIIC ideal no que diz respeito o acoplamento térmico. A

CDIIC ideal tem como um de seus princípios a distribuição simétrica de estágios nas duas seções da coluna. Isso está de certa forma subentendido porque quando todos os estágios estão termo-acoplados (em contato), uma máxima troca de calor é provida.

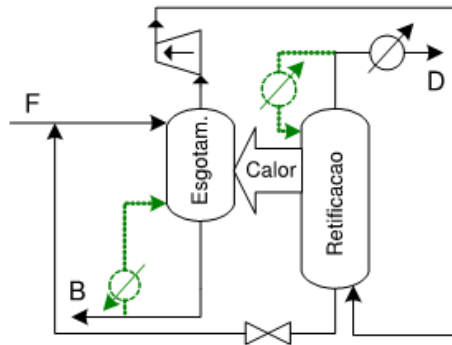
Esta condição ótima de acoplamento muitas vezes não corresponde à situação de melhor alimentação. Quando a coluna possui uma alimentação ótima muito próxima ao topo ou muito próxima ao fundo tem-se um número de estágios diferentes nas duas seções, propiciando assim uma situação bem longe da situação para troca de calor ideal. Na Figura 3.3 mostram-se varias configurações diferentes determinadas através do estágio de alimentação.



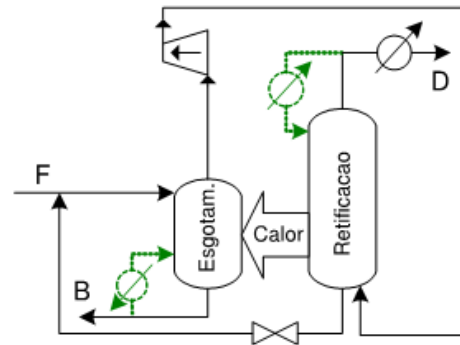
(HIDiC_alimentacao otima)



(HIDiC_total)



(HIDiC_topo)



(HIDiC_fundo)

Figura 3.3. Possíveis configurações da CDIIC, seções com diferentes estágios na retificação e esgotamento (DE RIJKE 2007).

A fim de se obter o mesmo número de estágios em baixa e em alta pressão/temperatura nas duas seções da CDIIC arranja-se o mesmo número de estágios na seção de retificação e na seção de esgotamento configurando a CDIIC_total. CDIIC_topo e CDIIC_fundo representam os dois extremos das configurações assimétricas como pode ser verificado na Figura 3.3 (DE RIJKE 2007).

No que diz respeito à mistura etanol-água no presente estudo, trabalhou-se com o mesmo número de estágios na retificação e esgotamento para se fazer álcool etílico hidratado carburante (AEHC).

3.2 Viabilidade Termodinâmica

Uma coluna com integração interna de calor pode apresentar-se de diversas formas com relação ao perfil de diferenças de temperatura das seções de retificação e esgotamento. O mais importante é a seção de esgotamento apresentar uma menor temperatura do que a seção de retificação em todos os estágios. O algoritmo que avalia essas situações da CDIIC é referenciado em Gadalla et al. (2007) como Viabilidade Termodinâmica da CDIIC. Quanto maior o gradiente de temperatura entre os dois estágios termo acoplados, maior é quantidade nominal da troca de calor, em contrapartida, se gasta um maior valor energético no compressor para se comprimir o vapor proveniente da seção de esgotamento.

Quando não se alcança um perfil de temperatura na seção de retificação maior que o da seção de esgotamento, deve-se mudar o gradiente de pressão ou razão de compressão (ambos se referem à diferença de pressão necessária entre a seção de retificação e esgotamento) aplicado no compressor a fim de se reverter a situação.

Segundo Gadalla (2009), o formato do perfil da diferença de temperatura é uma função do sistema a ser separado. Este formato pode ser dividido em três grupos: (1) perfil paralelo: onde a diferença de temperatura é quase fixa, (2) perfil variável: com uma grande diferença de temperatura nas extremidades e mínima diferença de temperatura no meio da coluna, (3) perfil crescente ou decrescente: com uma grande diferença de temperatura em uma das extremidades. Cada sistema de separação (etanol-água, benzeno-tolueno etc) apresenta-se de alguma forma dentro dos diferentes perfis de diferença de temperatura apresentados.

Abaixo, na Figura 3.4, segue um algoritmo para a viabilidade termodinâmica da CDIIC.

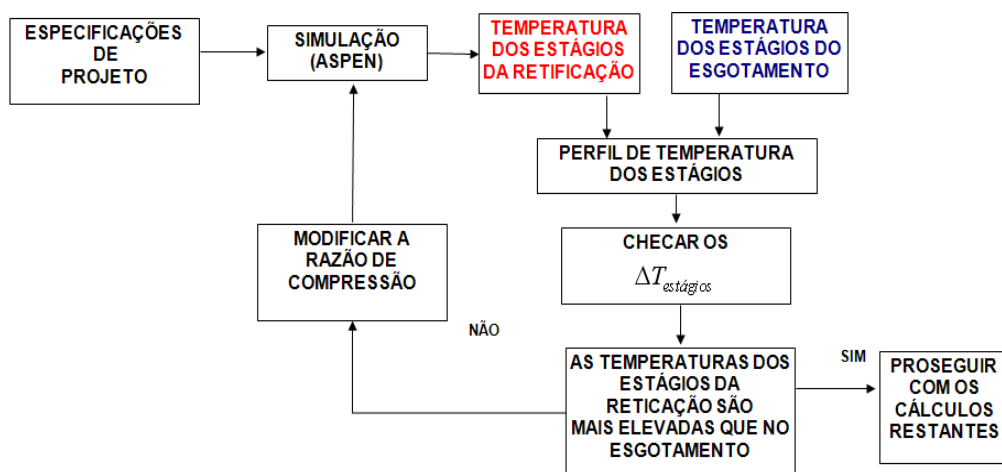


Figura 3.4. Algoritmo para a análise da viabilidade termodinâmica.

3.3 Parâmetros hidráulicos adotados

Alguns parâmetros precisam ser estimados para que se possa proceder com relação aos cálculos da coluna, uma vez que não se dispõe dos valores específicos; Alguns destes valores correspondem a uma faixa de operação da coluna; outros estão de acordo com valores usualmente utilizados para a mistura em questão.

Na prática, no estudo deste projeto utilizam-se os valores *default* do simulador para procederem-se os cálculos. O simulador faz os cálculos de acordo com a especificação de algumas condições da coluna tanto para o cálculo da queda de pressão quanto para o cálculo do diâmetro de inundação da coluna.

3.4 Metodologia Aplicada

O desenvolvimento da simulação da CDIIC foi realizado através de algumas etapas utilizando o simulador Aspen Plus® em conjunto com o software Excel. HUGILL e DORST (2005) apresentaram em seu trabalho uma metodologia para o cálculo da viabilidade técnica da CDIIC (*plate-fin*). Este método será utilizado no presente estudo de maneira genérica para o cálculo da viabilidade técnica da CDIIC concêntrica e da CDIIC com painéis de troca de calor. A disposição dos equipamentos da CDIIC no simulador segue como na Figura 3.1, a simulação acontece conforme é descrito no Item 3.1. É importante salientar que o arranjo mostrado no simulador é a maneira genérica de representação da CDIIC, com estágios de equilíbrio sendo representados pelo bloco de cálculo RADFRAC no Aspen Plus®.

A estrutura geral da combinação entre os softwares Aspen Plus® e o Excel® é mostrada na Figura 2.5. A planilha eletrônica inclui parâmetros e correlações da literatura para descrever as propriedades requeridas tais como: coeficientes de película interno e externos, cálculo da eficiência global, além do cálculo troca de calor nominal entre os estágios.

Escolheu-se o modelo termodinâmico de UNIQUAC associado ao modelo de R-K (Redlich-Kwong) para representar as não idealidades das fases líquida e vapor, da CDIIC (maiores detalhes são encontrados no Apêndice A).

É importante ressaltar que os procedimentos correspondentes à Figura 3.5 ocorrem posteriores a análise da viabilidade termodinâmica, ou seja, a temperatura da seção de retificação seja maior que na seção de esgotamento em todos os estágios.

O diâmetro de inundação é calculado através da correlação de Fair (equação 31), o maior diâmetro (de todos os estágios) correspondeu ao diâmetro utilizado em ambas as seções. A área da CDIIC com painéis de troca de calor é calculada através do método apresentado por Gadalla et al. (2007) que segue no Apêndice B, já a área calculada da CDIIC concêntrica é calculada através da área lateral da seção de retificação. A perda de pressão é calculada pelo simulador. Os coeficientes de película internos e externos cuja combinação se obtém o coeficiente global de troca de calor (equação 2 simplificada somente para convecção) são utilizados de maneira que, para o coeficiente interno (condensação do vapor), podem ser utilizadas as equações 22; 23; 26 variando conforme o regime de escoamento e para o lado externo (evaporação do líquido) foram utilizadas a correlação de Alhusseini et al. (1995) dada pela equação (21) que inclui os vários regimes de escoamento e as correlações de Chun e Seban (1971). Calcula-se a eficiência global da CDIIC e, conseqüentemente, o número de estágios reais da coluna através da correlação empírica de O'Connell.

Procede-se o arranjo da CDIIC no simulador para uma determinada razão de recompressão (ou carga de pressão) no compressor. Do simulador, os seguintes perfis são obtidos: hidráulico, de temperatura, de composição, de propriedades (algumas variáveis necessárias que não se apresentam em outros perfis) e dimensionais das colunas de retificação e de esgotamento para se efetuar os cálculos de área e coeficiente global de troca

térmica. Com a obtenção desses valores, pode-se calcular a troca térmica nominal dada pela Equação (1) entre os estágios termo acoplados.

Obtendo-se todas as variáveis necessárias para o cálculo de troca de calor das duas seções da CDIIC, procede-se com um cálculo individual da troca de calor para cada estágio.

Com o valor da troca térmica nominal obtida pela planilha eletrônica procede-se então, com a integração interna de calor da CDIIC no simulador entre as duas seções, que acontece com a utilização de correntes e energia. As correntes de energia simbolicamente saem de um estágio da seção de retificação encontrando o respectivo estágio em contato térmico na seção de esgotamento (cada seção é representada na simulação através de uma coluna).

Para obtenção dos valores de gastos da CDIIC concêntrica somente se realiza a primeira iteração, correspondente a primeira integração energética. Devido a área de seção transversal e, consequentemente, a área de troca de calor na CDIIC concêntrica não variar muito de uma iteração para outra acontecem baixas trocas de calor. Em consequência do fato descrito anteriormente o perfil de temperatura da coluna varia muito pouco.

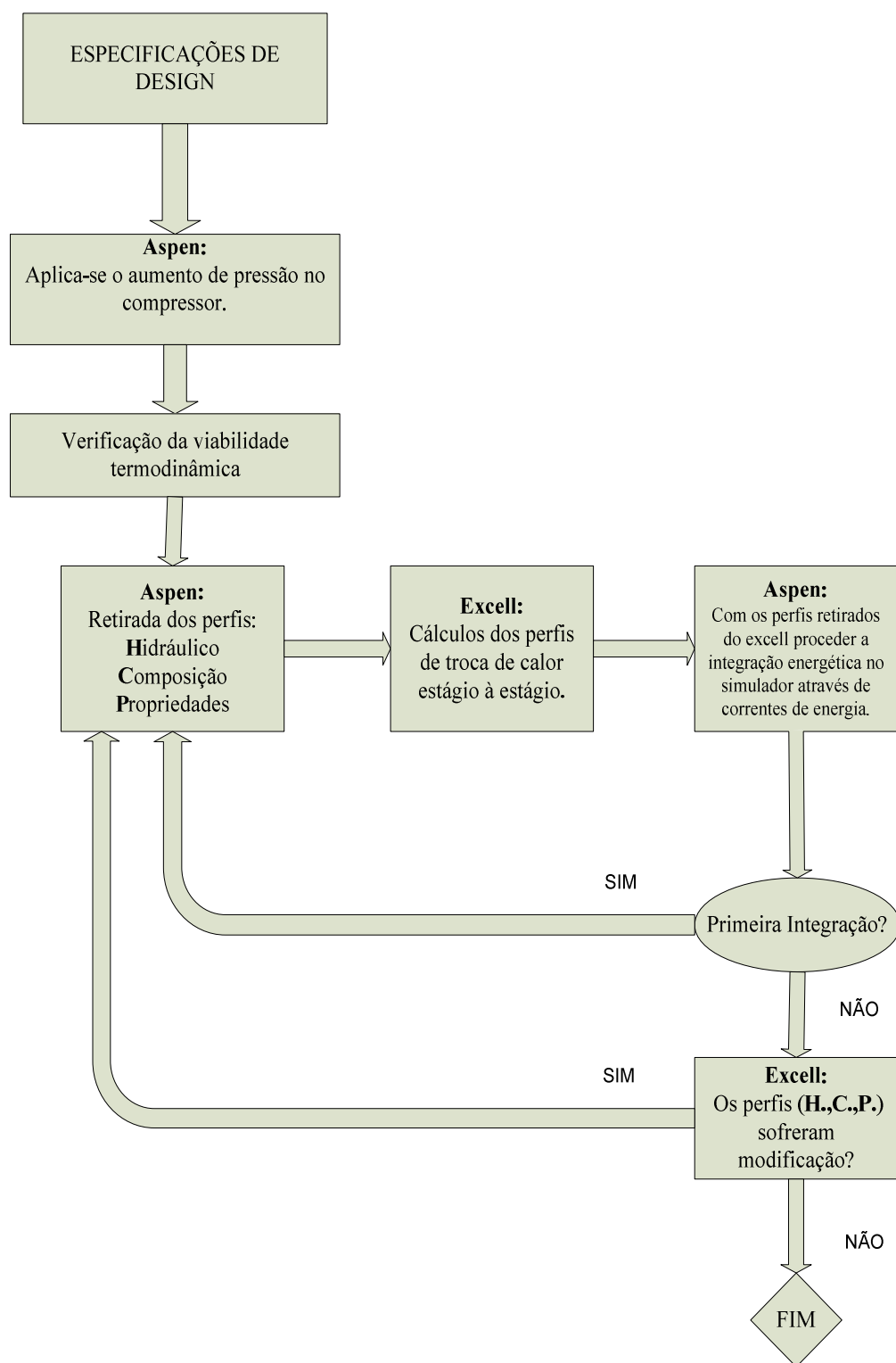


Figura 3.5. Algoritmo de cálculo da CDIIC etanol-água. Os perfis (H.,C.,P.) correspondem respectivamente aos perfis Hidráulico, Composição, Propriedades.

3.5 Diferentes procedimentos para integração interna da CDIIC

Na Seção anterior, (3.4), apresentou-se uma metodologia peculiar para se proceder à troca de calor na CDIIC. Ela consiste em se utilizar uma área fixa de troca de calor em todos os estágios variando-se, assim, o valor nominal da troca térmica em cada um destes, de acordo com o seu respectivo potencial.

Não existe somente o método para a integração energética apresentada em 3.4, mas também outros métodos condizentes para a realização da integração energética. Talvez a mais conhecida consista na integração uniforme do calor em todos os estágios da CDIIC de acordo com a energia necessária para se promover a CDIIC ideal (sem gastos no condensador e refeedor). Assim, um valor igual de energia nominal é trocado em todos os estágios termo-acoplados da coluna.

3.6 Conclusões Materiais e Métodos:

Em Materiais e métodos além de abordar a metodologia utilizada e suas considerações para proceder com a simulação da CDIIC, importantes conceitos foram introduzidos como os efeitos da configuração CDIIC e a viabilidade termodinâmica, sendo esses últimos essenciais para o resultado e procedimento das simulações respectivamente.

A metodologia no presente trabalho se baseou predominantemente na apresentada por HUGILL e DORST (2005), pois está mais detalhada no que se refere aos cálculos efetuados fora da simulação. Existem outras metodologias parecidas na literatura disponível, porém com um menor detalhamento.

Suphanit (2010) apresenta uma metodologia com cálculos iterativos inserindo uma rotina em bloco de cálculo do Excel presente dentro do simulador de processos Aspen Plus®. Este autor utiliza um valor constante de coeficiente global de troca de calor para a mistura benzeno - tolueno.

Olujić et al. (2008) utiliza uma metodologia de caráter iterativo utilizando o software Aspen Plus® juntamente com o software Excel para a mistura propileno - propano, porém somente o utiliza para o cálculo de área uma vez que o coeficiente global é constante. A metodologia não é clara apresentando lacunas para o seu entendimento.

4. ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Será apresentado um estudo de caso nessa parte do trabalho, tratando-se da concentração de uma mistura binária ideal de etanol-água como sendo uma aproximação do vinho de levedurado proveniente da fermentação. Algumas considerações extras com relação à energia no compressor serão abordadas e, posterior a isso, os resultados serão apresentados. Resultados irão seguir em três análises diferentes cujo objetivo da terceira é de verificar a consideração de alimentação ótima no centro da coluna como a melhor opção para se proceder as simulações da CDIIC. Nas duas primeiras, apresentando um caráter investigativo, serão mostradas o caráter das variáveis das simulações bem como os resultados de gastos energéticos comparados a coluna convencional. Considerações se tornaram necessárias com relação à quantidade de fluido passando pelos painéis, o que ocasiona, no uso de diferentes correlações para o cálculo dos coeficientes de película. A influência desses parâmetros no valor do coeficiente global de troca de calor também será mostrada nesta parte do trabalho.

4.1 Estudo de caso

Na simulação da CDIIC sempre é feita à comparação de gastos energéticos com a coluna convencional (C.C.) para produção de álcool (etanol) de maior concentração partindo-se da concentração usual do etanol saindo do processo de fermentação.

É de conhecimento difundido que o processo de produção do álcool (etanol) hidratado na prática faz-se não com uma mas sim com um conjunto de colunas (aproximadamente 3) chamadas de coluna A; B; B1 como segue na Figura 4.1 abaixo.

sistema etanol-água constitui uma mistura não ideal onde o binário forma um azeótropo com fração molar de aproximadamente 89% etanol (ou 95,6% em massa) e 11% água a 1 atm (VASCONCELOS, 1999). Simulações para fazer álcool anidro são menos triviais, pois para se “quebrar” o azeótropo é necessário introduzir outros componentes tais como monoetilenoglicol e ciclohexano, caracterizando destilações extrativa e azeotrópica, respectivamente, as quais possuem agentes de separação mássicos.

Na simulação deste caso de estudo procede-se para produzir aproximadamente 700.000 l/ dia de álcool hidratado na concentração mínima de 92,6 INPM na coluna convencional.

Especificações especiais ao se efetuar a simulação foram os de não se perder uma quantidade de álcool maior que a aceitável na corrente de fundo da coluna. Segundo MEIRELLES (2006), as perdas totais de álcool não podem ultrapassar 0,25 % do total de etanol que alimenta a instalação.

4.1.1 Simulação CDIIC

Procedendo as simulações, uma varredura de diferentes pressões entre as duas seções é efetuada ($P_{ret.} - P_{esg.}$) também chamada de razão de re-compressão ou carga de pressão. Também se refere na dissertação sobre a diferença de pressão entre as duas seções como razão de re-compressão ($\frac{P_{ret.}}{P_{esg.}}$). Carga de re-compressão é outro termo utilizado para

se referir a isso. A variação de pressão é aplicada no compressor ao vapor saindo do topo da seção de esgotamento e os gastos para se aumentar a pressão foram levados em consideração na realização dos cálculos de gastos energéticos. Existe uma diferença entre o valor da energia elétrica cedida ao compressor à equivalente energia térmica requerida, a razão é de 1:3. Assim, multiplicou-se a energia gasta no compressor por um fator de três para contabilizar seu real gasto. O cálculo do gasto energético a fim de comparação, somente é feito para gastos de energia no refeedor e no compressor como segue na equação (67).

$$Q_{total} = Q_{ref.} + 3Q_{comp.} \quad (67)$$

Q_{total} = Energia total despendida (kW)

$Q_{ref.}$ = Energia requerida no refeedor (kW)

$Q_{ref.}$ = Energia requerida no compressor (kW)

Segundo Iwakabe et al. (2006), o fator de três para energia no compressor é assumido para converter o trabalho de compressão em energia térmica requerida para produzir uma equivalente quantidade de energia elétrica; a conversão é determinada empiricamente levando-se em conta custos de eletricidade. O compressor é assumido a operar com 72% de eficiência isentrópica (valor *default* do simulador).

Faz-se a simulação da CDIIC no intuito de acoplar o maior número de estágios possíveis, considerando como critério baixa concentração de fundo de etanol e uma alta concentração de topo (AEHC).

A razão de se procurar um número parecido de estágios tanto na coluna de retificação quanto na coluna de esgotamento é porque (abordado anteriormente no Item 3.1.1), quando se tem uma configuração, a qual apresenta alimentação próxima do centro, consegue-se acoplar e (decorrente disto) trocar calor com um maior número de estágios gastando-se uma menor energia no refeedor.

Análises de sensibilidade foram feitas e conseguiu-se alcançar valores adequados (dentro do intuito já discutido) concentrando o álcool até 92,6% INPM com uma concentração de fundo próxima de 100 ppm em massa.

Uma vez efetuadas as trocas térmicas no simulador, o valor das variáveis e perfis de vazão das colunas se alteram, conseqüentemente, os valores das trocas nominais não permanecem constantes uma vez que dependem dos valores simulados. Dessa forma, um cálculo iterativo é necessário. Procede-se com a simulação CDIIC para duas situações diferentes de troca térmica, de maneira que na primeira situação em Análise I um percentual fixo de condensação e líquido passando nos painéis (na seção de esgotamento) é considerado, em Análise II um número fixo de reynolds é estipulado para condensação e o regime de transição é utilizado no esgotamento (na seção de esgotamento). Em Análise III quer se verificar a viabilidade de diferentes configurações CDIIC com relação à CDIICs de alimentações no centro.

4.2 ANÁLISE I

4.2.1 CDIIC 30 estágios

A quantidade de vapor e a quantidade de líquido que entra em contato com os painéis e dentro e fora destes, respectivamente, não tem como ser mensurada no presente estudo. O que se faz em análise I é considerar um percentual de vapor em contato com a parte de dentro dos painéis e um percentual de líquido em contato com o lado de fora destes. Utilizaram-se as correlações de Chen et. al (1987), equação (26) para a condensação do vapor em forma de um filme em regiões ondulatórias e turbulentas e a correlação de Alhusseini et al. (1997) que engloba os regimes laminar e turbulento, equação (21), para evaporação no filme. Foi assumido um valor de 10% do valor total do vapor na retificação condensando em cada estágio e 10% do valor total do líquido escoando em cada estágio no esgotamento.

A Figura 4.2 abaixo ilustra de maneira genérica a simulação da CDIIC para uma mistura qualquer no simulador.

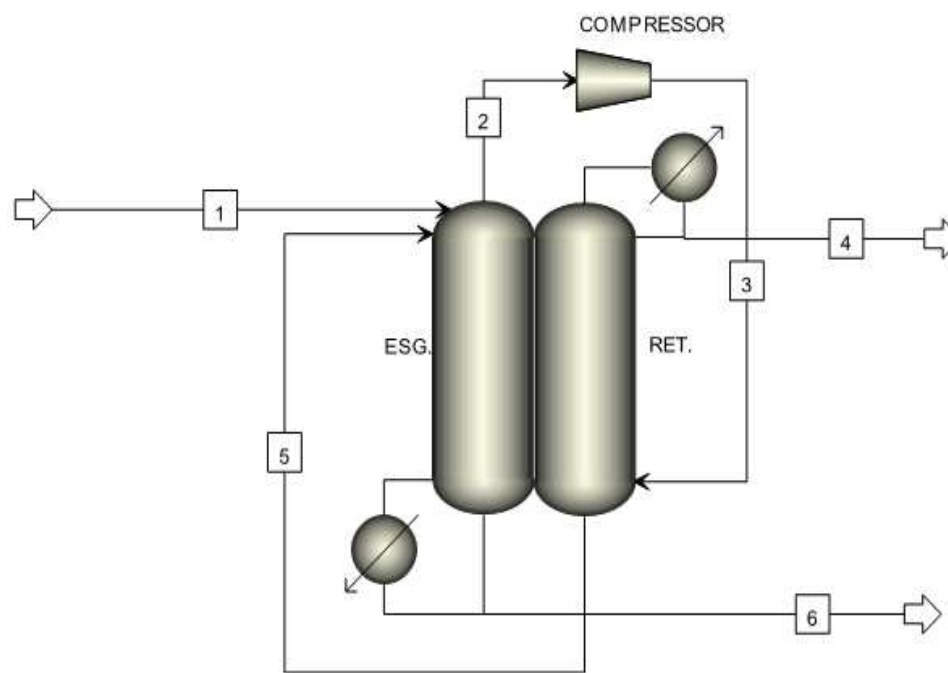


Figura 4.2. Figura representativa da configuração CDIIC no simulador. (1: alimentação; 2: vapor da seção de esgotamento; 3: vapor após compressão; 4: produto de topo CDIIC; 5: fundo retificação; 6: produto de fundo da CDIIC) (Fonte: TSUN-JEN HO, 2010).

Abaixo segue a Tabela 4.1 referente a condições que foram realizadas a simulação:

Tabela 4.1. Especificações da coluna para mistura etanol-água:

<i>Especificações da Coluna</i>		
ALIMENTAÇÃO:		etanol-água
Composição WT% Etanol		8
Fluxo de entrada	(l/s)	69,75
Pressão	(atm)	1
Pressão na Retificação	(atm)	Variável
Pressão no Esgotamento	(atm)	1
Estágios na Retificação	-	15
Estágios no Esgotamento	-	15
Pureza de produto de topo	WT% Etanol	92,6
Pureza no produto de fundo	WT% Etanol	100 PPM

Foi realizada a comparação entre as colunas CDIIC com painéis de troca de calor e sem painéis de troca de calor com relação à coluna usual. As composições de alimentação, topo e fundo foram as mesmas para se poder realizar a comparação.

Seguindo-se os princípios de viabilidade termodinâmica (Item 3.2 da metodologia) da CDIIC, primeiramente, é necessário obter uma temperatura na seção de retificação maior que a temperatura na seção de esgotamento. Um gráfico das diferentes temperaturas alcançadas na retificação variando-se a carga de pressão no compressor é mostrado na Figura 4.3.

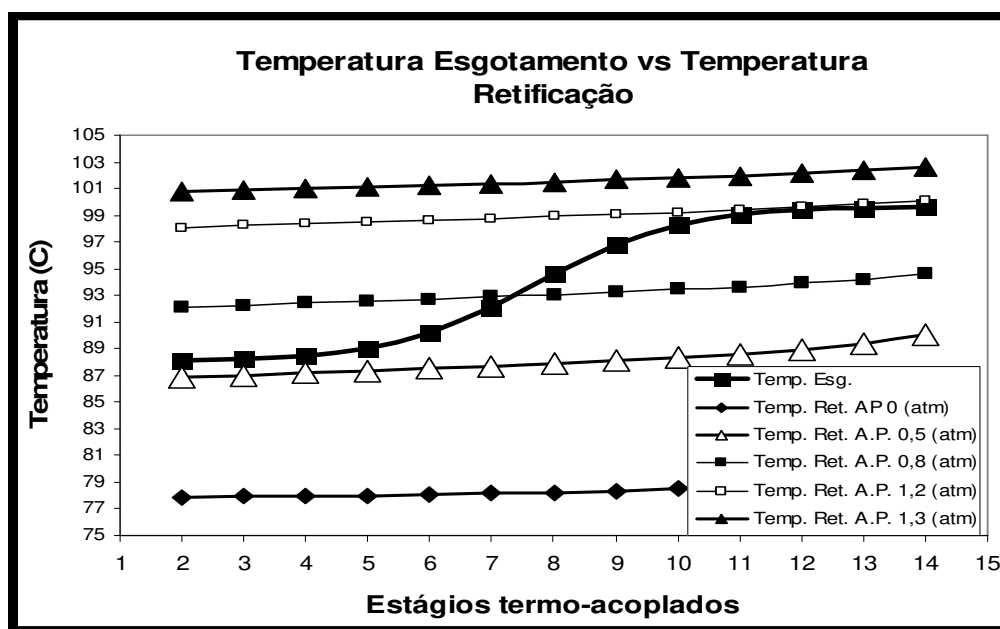


Figura 4.3. Diferentes temperaturas alcançadas na retificação da variando-se o aumento de pressão proporcionado pelo compressor.

É possível observar que nos estágios próximos ao topo, a diferença de temperatura é mais pronunciada. No fundo, ocorre um afunilamento das diferenças de temperatura entre as duas seções; isso ocorre porque, no fundo da seção de esgotamento, tem-se praticamente água pura, que tem uma temperatura de ebulição maior que qualquer respectiva mistura de água com o etanol. O aumento de pressão (A.P.) à qual a viabilidade termodinâmica (Item 3.2) foi alcançada para a coluna de 30 estágios corresponde a 1,2 atm. A fim de se ter melhores resultados, considerou-se um aumento de 1,3 atm para início das simulações.

Os resultados para estas condições não se estenderam mais do que uma determinada faixa de aumentos de pressões no compressor. Isso se deve ao fato de que os cálculos revelarem que, após determinado aumento de pressão, a energia necessária no refeedor foi suprida pela troca de calor, aproximando-se a situação à qual nenhuma energia é adicionada ao refeedor. A Figura 4.4 abaixo traz resultados referentes ao gasto totais de energia na CDIIC com e sem painéis, comparadas à coluna convencional (C.C.).

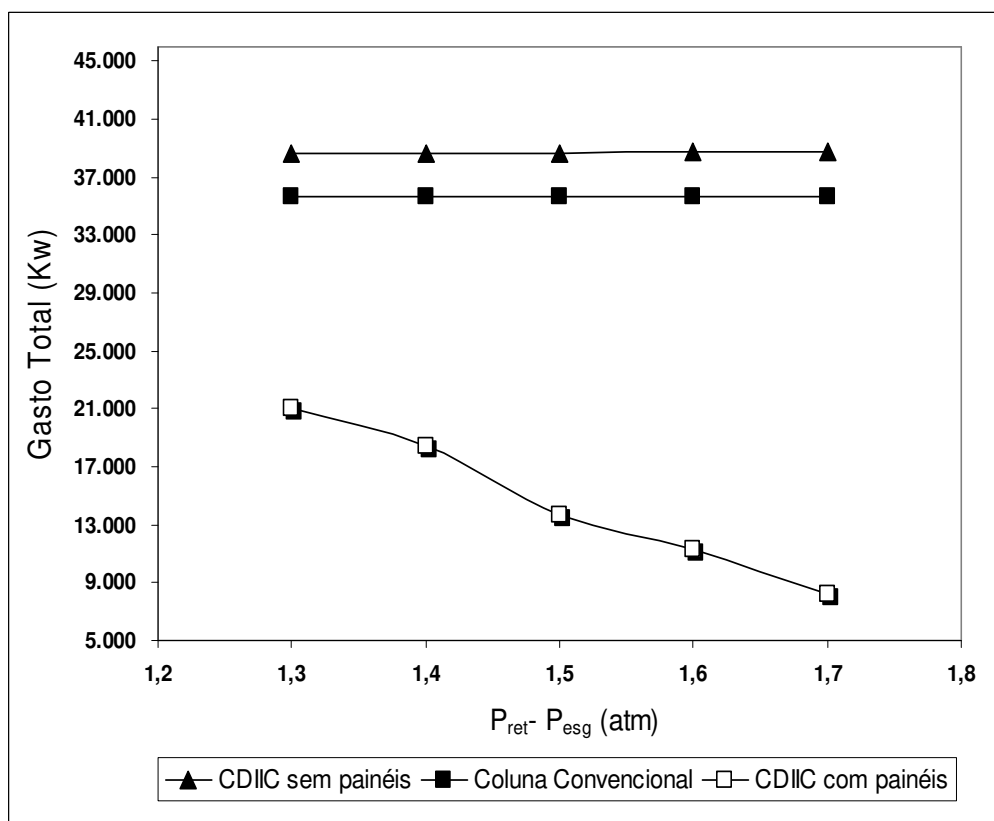


Figura 4.4. Gastos energéticos totais das CDIICs comparadas a coluna convencional (C.C.), levando-se em conta gastos do compressor.

Na Figura 4.4 observa-se que o gasto energético da CDIIC sem painéis de troca de calor é maior que o gasto energético na coluna convencional mesmo com o aumento da diferença de pressão entre as seções. Isso ocorre porque a área de troca térmica referente somente a estrutura da seção de esgotamento é muito baixa; dessa maneira os gastos na compressão do vapor superam os valores referentes às trocas de calor. Observou-se que conforme a carga de pressão foi aumentada, a energia diminui gradativamente até se chegar próximo ao estado da CDIIC onde não se tem a necessidade de um refeedor. A Tabela 4.2 mostra-se como é feita a discriminação para valores de gastos no compressor e no refeedor para a CDIIC com painéis de troca de calor de acordo com a Equação (67):

Tabela 4.2. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:

Pressão	Compressor	Q refeedor (CDIIC com painéis)	Gasto Total
atm	kW	kW	kW
1,3	1.267,38	17.266,60	21.068,73
1,4	1.360,36	14.380,21	18.461,31
1,5	1.472,68	9.252,66	13.670,71
1,6	1.603,43	6.501,59	11.311,87
1,7	1.762,42	2.907,95	8.195,21

Os dados da tabela 4.2 podem ser verificados na Figura 4.5.

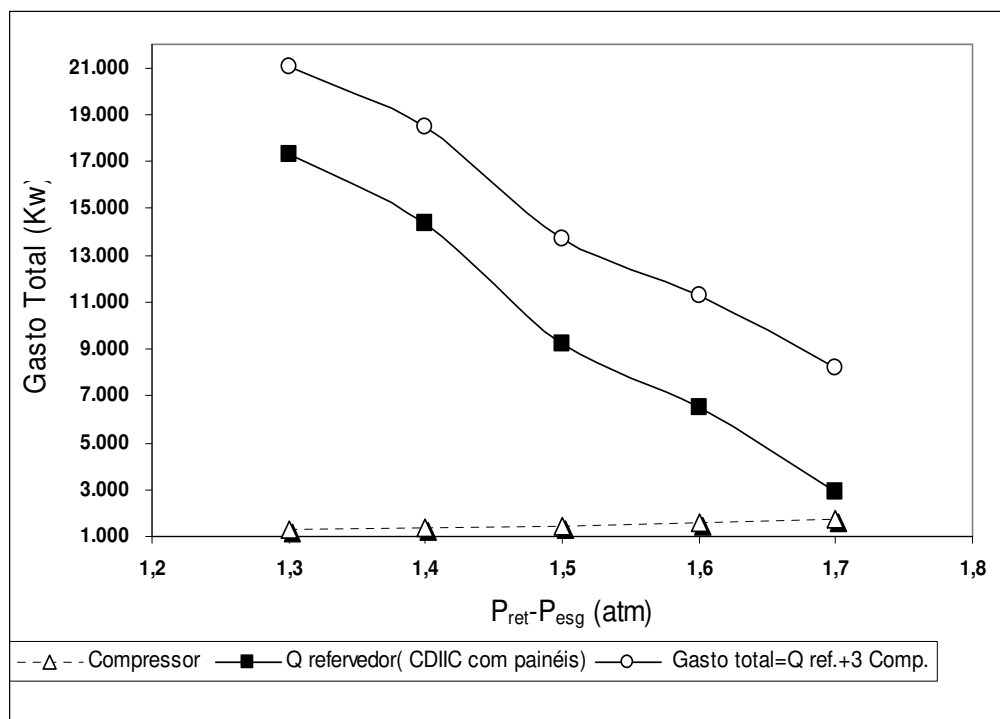


Figura 4.5. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor.

Valores bem abaixo daqueles encontrados em uma coluna convencional são alcançados para a CDIIC da mistura de estudo. Reduções de até 77% dos gastos com relação à coluna convencional são mostradas para a mistura etanol-água no presente estudo para diferença de pressão entre a seção de retificação e esgotamento de 1,7 atm. Apesar do alto valor, valores de 70 % de consumo energético com relação à coluna convencional são relatados por Iwakabe et. al (2006) em simulações referentes a misturas de

Benzeno, Tolueno e Xileno e misturas de 12 hidrocarbonetos. Jansens (2001), através de simulações, obteve resultados de 90% de economia com relação à coluna convencional para a separação de propileno-propano e 80% para benzeno-estireno. Horiuchi et al. (2006) reportou dados de economia de 76,7 % em uma CDIIC piloto para extração de ciclo-pentano de uma corrente de hidrocarbonetos.

Observa-se que o ponto ótimo, ou melhor, a situação a qual menos se gasta energia na CDIIC é determinado quando nenhuma energia é gasta no refeedor. Valores próximos 1,73 entre $P_{ret.} - P_{esg.}$ é aonde se obtém o menor gasto energético.

A seguir, nas Figuras 4.6-10, pode-se observar o comportamento de alguns parâmetros da CDIIC com relação às diferentes cargas de pressão aplicadas no compressor, em alguns casos, verifica-se o comportamento dessas variáveis com relação à coluna convencional. Os estágios, os quais, seguem no eixo das abscissas, estão enumerados de acordo com seu respectivo acoplamento na CDIIC, sendo 1 o primeiro estágio termo-acoplado aquele que se situa no topo da coluna. Nas legendas de cada gráfico a pressão que aparece na frente corresponde ao aumento pressão provido pelo compressor.

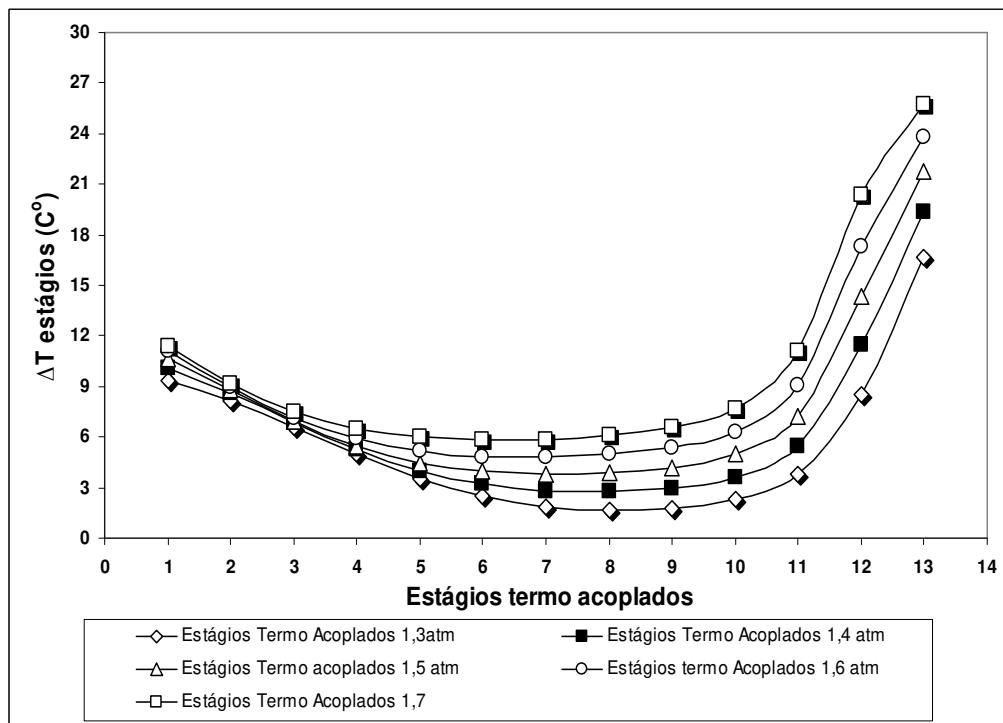


Figura 4.6. Variação de temperatura entre os estágios termo-acoplados na CDIIC.

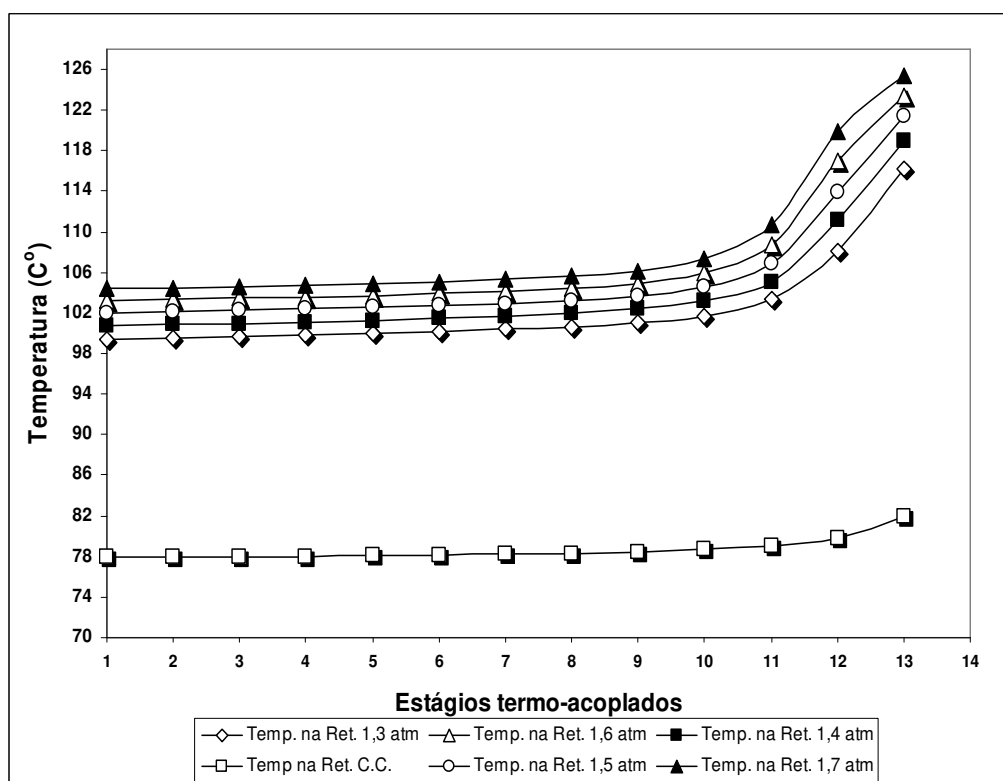


Figura 4.7. Temperatura na retificação da coluna convencional e de ambas as CDIIC (com e sem painéis) em diferentes aumentos de pressões.

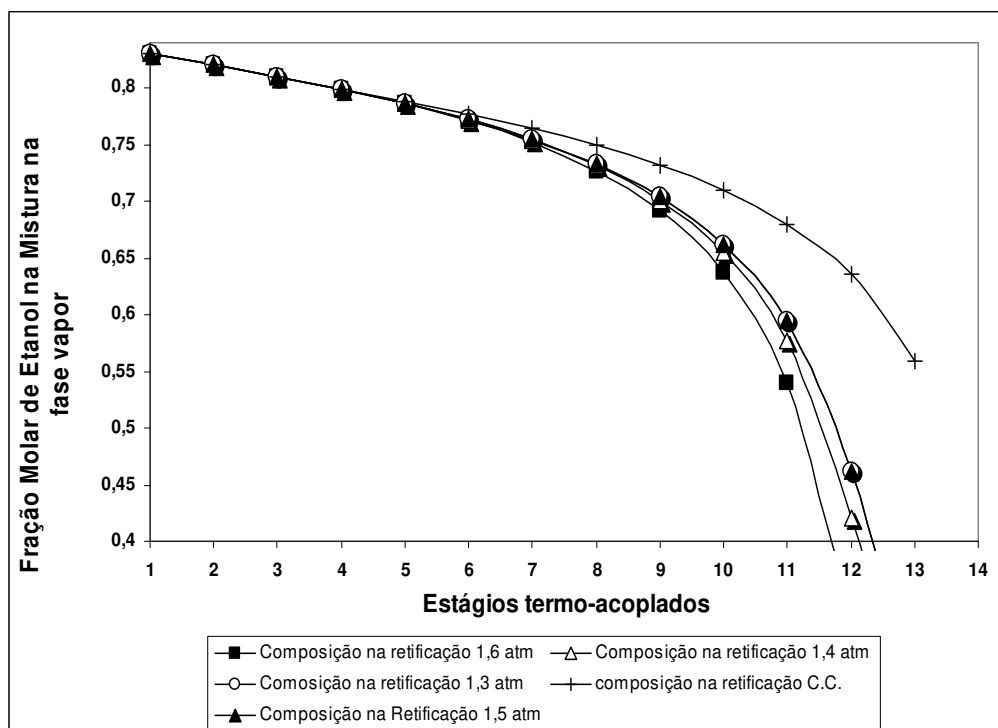


Figura 4.8. Composição molar do Etanol na fase vapor para diferentes pressões e a respectiva comparação com a coluna convencional.

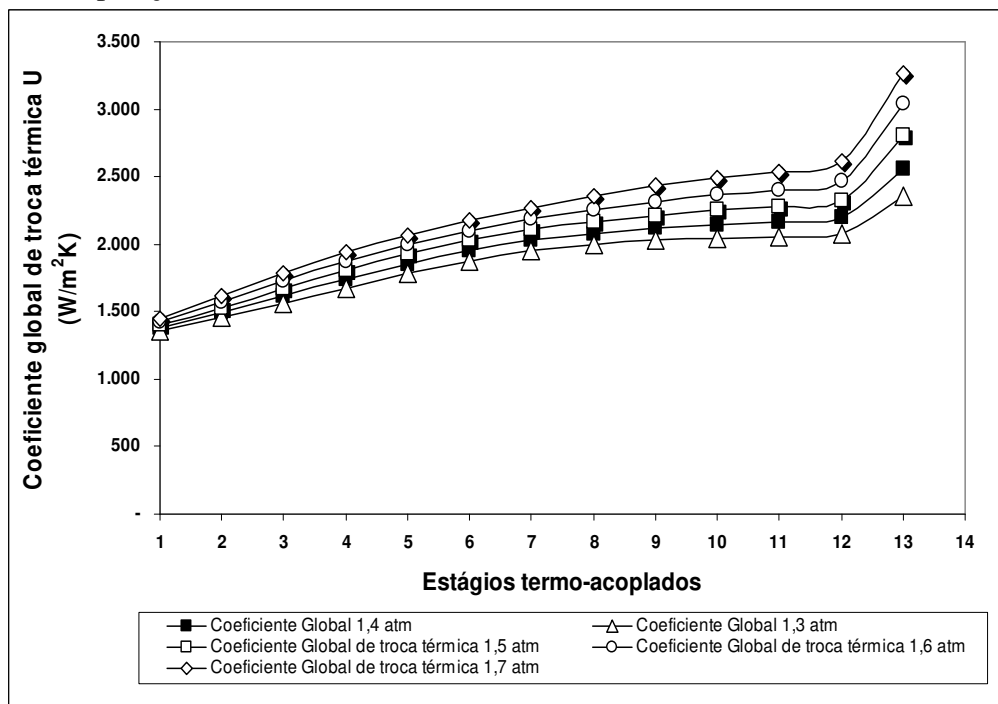


Figura 4.9. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados em diferentes aumentos de pressões.

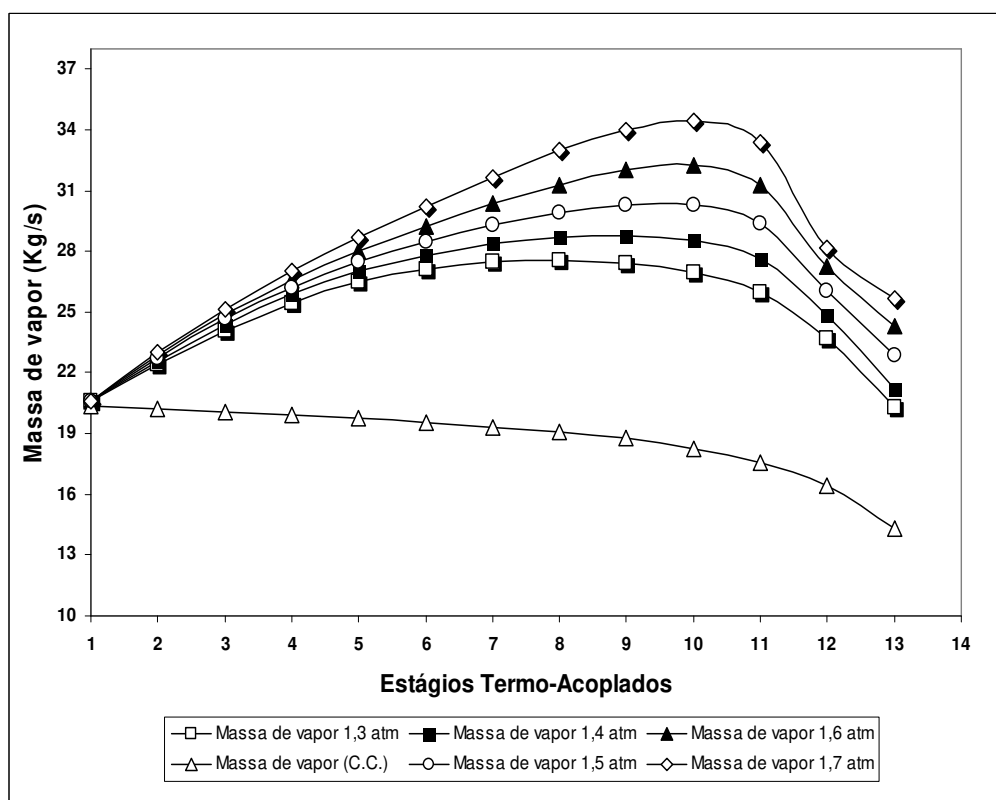


Figura 4.10. Variação da massa de vapor na retificação referente aos estágios termo-acoplados em diferentes aumentos de pressões.

Analisando-se os resultados das figuras 4.6, 4.7 e 4.10, a tendência é a de que, com o aumento da pressão do vapor saindo do esgotamento, a temperatura e a massa de vapor na seção de retificação aumentem, e isso se dá proporcionalmente à pressão.

Verifica-se que o perfil de temperatura na retificação muda em relação àquele que se tinha antes da análise da viabilidade termodinâmica (Item 3.2). Isso ocorre porque quando se procede à integração energética a temperatura no fundo da coluna de retificação aumenta para valores bem maiores que antes da integração. Esse padrão no perfil de temperatura após a integração pode ser verificado em todos os aumentos de pressão.

Com relação ao comportamento da CDIIC para mistura etanol-água, no que diz respeito ao perfil de diferença de temperatura, pode se observar na Figura 4.6 que a mesma apresenta um perfil variável com uma diferença mínima próxima ao centro dos estágios termo-acoplados. Esse estágio em particular é no qual se encontra o *pinch-point* (oitavo estágio termo-acoplado); possivelmente (de acordo com a metodologia *pinch*) nele, a não troca de energia pode favorecer a eficiência termodinâmica da coluna, e consequentemente, levar a uma diminuição ainda maior dos gastos na CDIIC.

Apesar de haver a possibilidade de não se trocar calor próximo ao *pinch* este procedimento não foi feito nessa dissertação. Muito decorre do fato da mistura de estudo do trabalho apresentar algumas inconformidades para a não realização da troca térmica nos estágios onde ocorre o *pinch*. A teoria *pinch* é utilizada de uma forma simples neste trabalho, somente com os conceitos de aplicação da viabilidade termodinâmica.

Em Análises I, foi fixado um valor percentual de vapor e de líquido em contato direto com os estágios; o valor fixado foi alto. Observa-se que o percentual adotado influi diretamente no valor do coeficiente global, isso porque os cálculos do coeficiente de película dependem do Número de Reynolds e este é diretamente influenciado de modo a aumentar com as vazões de líquido e vapor em contato com os painéis. Foram necessárias iterações para que os valores do coeficiente global de troca de calor e área de seção transversal da coluna convergissem, em média 5 a 6 iterações foram necessárias. É importante ressaltar que sempre que se utilizam correlações para o cálculo da troca de calor deve-se averiguar a faixa do número de Reynolds e de Prandtl que tais correlações abrangem.

O coeficiente global de troca térmica variou de 1,5-3,5 kW (Figura 4.8). Keaser and Pritchard (2005) realizaram estudos de transferência de calor na superfície de pratos perfurados para o estudo de colunas diabáticas. Diferentemente do presente trabalho, onde se têm superfícies verticais e filmes descendentes, no trabalho de Keaser e Pritchard, os autores trabalharam com aquecimento e resfriamento no prato (aquecimento horizontal) para uma mistura de metanol-água; a despeito de algumas diferenças, os valores do coeficiente global variaram entre 2,2-4 kW para o aquecimento.

Na maioria das vezes, o que se observa em trabalhos de simulações referentes à CDIIC é um valor fixo para o U. O valor de U pode ser tomado como fixo em determinados casos porque decorre de valores experimentais provenientes de experiências práticas com as misturas de hidrocarbonetos (benzeno e tolueno). Isso facilita as simulações e dessa forma, não são necessárias iterações para convergência de valores.

No caso deste trabalho não se dispõe de dados experimentais para o valor de U da mistura de interesse (etanol-água), portanto correlações foram utilizadas, podendo-se, dessa maneira, afirmar que uma abordagem teórica foi efetuada. Como já foi dito, foram utilizadas correlações para o cálculo dos coeficientes de troca convectiva do lado interno e

externo da superfície trocando calor, desprezando-se a resistência da troca térmica iminente do material que está sendo utilizado.

A resistência à troca de calor iminente ao material utilizado, ou melhor, a resistência à troca térmica devido à condução é desprezada em muitos cálculos de U de trocadores de calor. Hugill e Dorst (2005) que utilizaram correlações para calcular U na CDIIC *plate-fin* desprezaram o termo condutivo nos cálculos pelo fato de que à espessura dos painéis têm valores muito pequenos. O cálculo do termo condutivo foi negligenciado neste trabalho, porém uma abordagem utilizando este termo será realizada em trabalhos futuros pelo autor.

A diferença de pressão entre as seções ($P_{ret.} - P_{esg.}$) é a variável mais importante de *design* e operação da CDIIC; ela influencia diretamente na performance de tal coluna. Quanto mais próxima da concentração equimolar se encontrar a concentração da alimentação maior carga de re-compressão é requerida ao se efetuar a simulação da CDIIC (NAKAIWA et. al 2001). O cuidado na sua escolha não somente se limita a satisfazer a condição de viabilidade termodinâmica, mas também, influencia diretamente na convergência da CDIIC.

Dependendo das condições da coluna, uma razão de re-compressão pode levar a simulação a erros de convergência, verificando-se que alguns estágios secam durante a simulação, além de os cálculos se tornarem instáveis nessas regiões e não convergirem. Isso foi verificado no trabalho de Iwakabe (2006). Suphanit (2010) também relata problemas de convergência na CDIIC. Na tentativa de se trabalhar com diferenças de pressões ($P_{ret.} - P_{esg.}$) menores que 1,3 atm no trabalho, problemas de convergência apareceram. Isso foi um dos motivos para a faixa abrangida de valores de diferença de pressão ser relativamente pequena.

De fato, a simulação da CDIIC apresenta muitos problemas de convergência não somente com relação à diferença de pressão entre os estágios como também se verifica dificuldades em se convergir a coluna para diferentes vazões, concentrações e números de estágios. Por isso, valores alcançados em determinadas simulações são específicos de seu *design* peculiar.

A energia no condensador não sofreu modificação significativa com o aumento da diferença de pressão entre as seções, apesar de se observar que o valor diminui com o

aumento da pressão; o valor foi ficou constante em 18.450 KW. De Rijke (2007) se deparou com a mesma situação em um dos seus estudos com o binário metanol-água. Segundo este autor, o refluxo secundário na seção de retificação causada pela condensação interna contra a superfície de transferência de calor não é suficiente para alcançar a especificação do produto de topo. Dessa forma, o refluxo primário proporcionado pelo condensador deve ser suprido para se obter a pureza desejada.

Para a CDIIC com painéis de troca de calor o valor da área foi calculado e se alcançou valores na média de 140 m² por estágio (Tabela 4.3):

Tabela 4. 3. Valores da área de troca térmica por estágio para a CDIIC com painéis variando-se a pressão entre a retificação e o esgotamento:

<i>Área de troca de calor</i>	
$P_{ret.} - P_{esg.}$ (atm)	(m ²)
1,3	142,16
1,4	141,30
1,5	141,36
1,6	141,52
1,7	142,64

O valor da área é obtido da análise geométrica realizada por Gadalla et al. (2007); outros autores como De Rijke (2007) e Suphanit (2010) utilizaram a análise geométrica feita por Gadalla et al. (2007) em suas simulações. Valores para área da CDIIC da mistura propileno-propano alcançaram valores de 450 m²; isso mostra que apesar do valor elevado para área de troca térmica para a mistura etanol-água, este condiz com valores de simulações anteriormente reportadas.

4.2.2 Resultados da CDIIC com painéis de troca de calor para 30,40 e 50 estágios

A fim de se estudar outras situações para a CDIIC com painéis de troca de calor foi aumentado o número de estágios da coluna e assim verificou-se o comportamento dos gastos energéticos devido a um maior número de estágios termo-acoplados. Aqui o mesmo número de estágios teóricos foi mantido nas seções de retificação e esgotamento.

Utilizando-se a metodologia mostrada em 4.4 não se consegue obter convergência nas simulações da CDIIC com mais estágios. Isso ocorre porque a faixa de diferenças de pressão, à qual se consegue que a temperatura na retificação seja maior que no esgotamento

(para um maior número de estágios) corresponde a um valor de troca de energia maior que a energia necessária no refeedor. Tentativas com outras vazões foram efetuadas, porém sem sucesso. O fato é que com a utilização do cálculo da área como foi descrito por Gadalla et al. (2007), chega-se a valores de área que transmitem altas trocas de calor e aumentando-se a vazão de entrada na coluna a área aumenta proporcionalmente. Para tentar contornar essa situação um valor de área foi fixado, este bem menor do que o encontrado pela análise geométrica. Com uma área menor, o comportamento da CDIIC com diferentes números de estágios pode ser verificado. Fixou-se a área em 40 m^2 , que é um valor baixo se comparado com a análise geométrica, no entanto, este, viabilizou as comparações. A vazão foi modificada para 70 l/s o que aumentou também a produção de AHEC alcançando valores de aproximadamente 710.000 l/dia, o aumento de pressão foi fixado 1,4 atm para 30,40 e 50 estágios tal como segue na Tabela 4.4. O valor fixo de 1,4 atm de aumento de pressão foi estipulado arbitrariamente somente para fins de comparação.

Tabela 4. 4. Especificações da coluna para mistura etanol-água; variação do número de estágios:

<i>Especificações da CDIIC com painéis (30-50 estágios)</i>		
ALIMENTAÇÃO:		etanol-água
Composição	WT% Etanol	8
Fluxo de entrada	(l/s)	70
Pressão	(atm)	1
Pressão na Retificação	(atm)	2,4
Pressão no Esgotamento	(atm)	1
Estágios na Retificação	-	15
Estágios no Esgotamento	-	15
Pureza de produto de topo	WT% Etanol	92,6
Pureza no produto de fundo	WT% Etanol	100 PPM
Área fixa de troca de calor	(m^2)	40

Para um aumento de pressão de 1,4 atm no vapor de topo saindo da seção de esgotamento (ou $P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$) pode-se verificar os gastos energéticos para CDIIC com diferentes números de estágios como seguem na Tabela 4.5 e na figura 3.11.

Tabela 4. 5. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração diferentes números de estágios ($P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$):

Estágios	Compressor	Q refeedor (CDIIC com painéis)	Gasto Total (Q ref+ 3Comp.)
-	kW	kW	kW
30	1.402,23	29.844,07	34.050,76
40	1.267,68	16.506,21	20.309,25
50	1.260,11	8.745,67	12.526,00

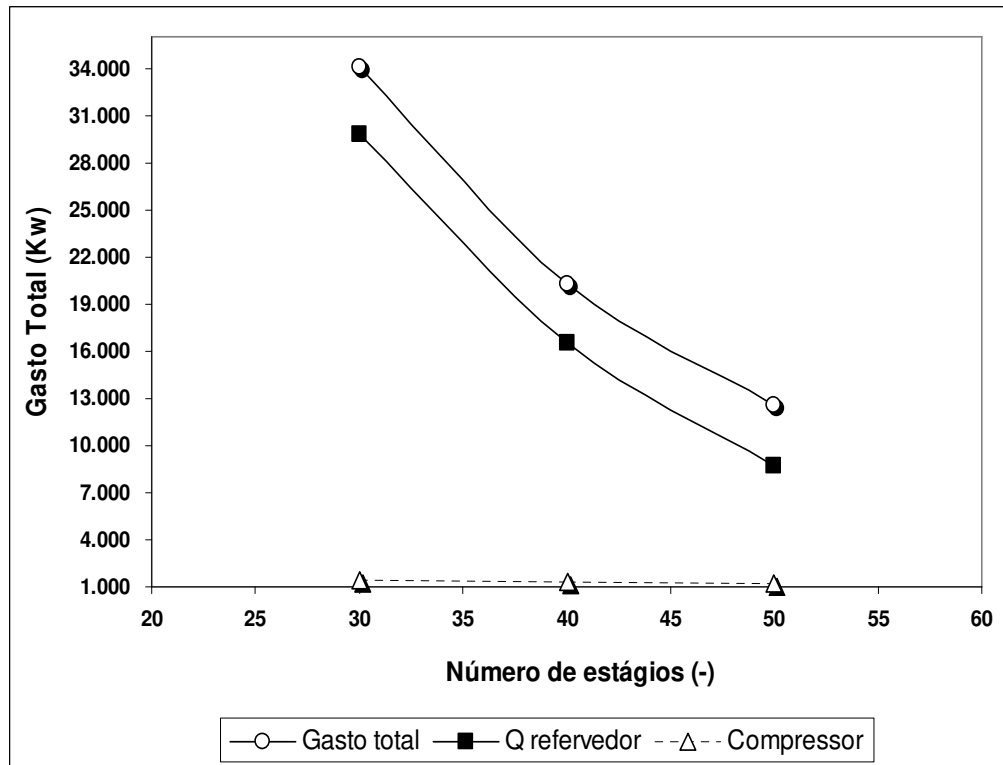


Figura 4. 11. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor, com área fixa de 40 m^2 e diferença de pressão entre as seções de $1,4 \text{ atm}$.

Fica evidente que com um maior número de estágios a troca térmica entre as seções da CDIIC aumenta consideravelmente. Na proporção que o número de estágios de troca de calor foi ampliado, a diferença de pressão necessária entre as duas seções torna-se menor. Em outras palavras, os custos operacionais são reduzidos com uma despesa fixa de investimento. Quando o número total de estágios alcança um valor alto, a direção da transferência de calor da seção de retificação para a seção de esgotamento se torna mais

difícil de ser mantida, especialmente quando distúrbios externos ocorrem (NAKAIWA et al., 2001).

Nas figuras 4.12-14 pode-se observar o comportamento de alguns parâmetros da CDIIC com relação a diferentes estágios a uma carga de re-compressão constante. Os estágios que seguem no eixo das abscissas estão enumerados de acordo com seu respectivo acoplamento na CDIIC, sendo 1 o primeiro estágio termo-acoplado aquele que se situa no topo das seções de retificação/esgotamento.

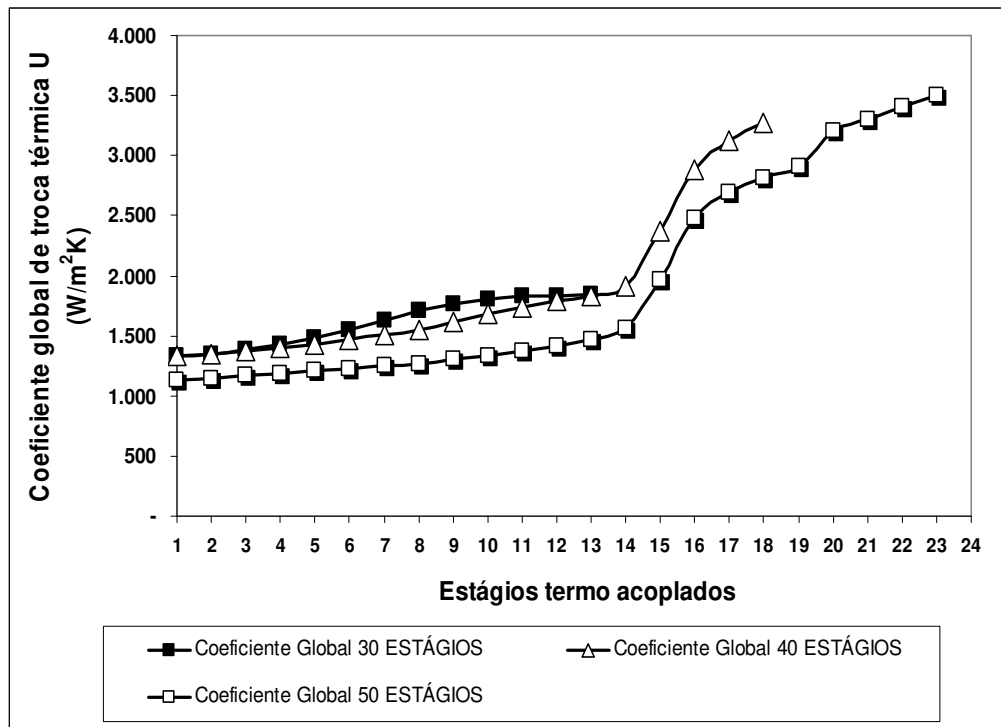


Figura 4.12. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados para CDIIC com painéis para diferentes números de estágios, com área fixa de 40 m² e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.

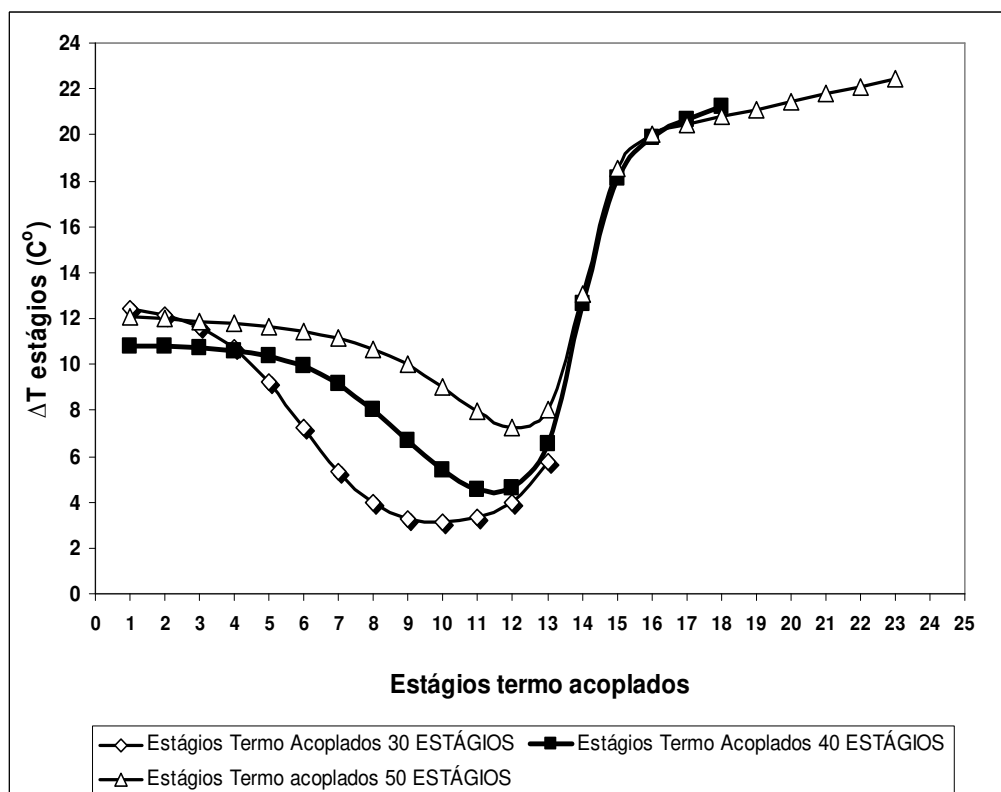


Figura 4.13. Variação de temperatura entre os estágios termo-acoplados para CDIIC com diferentes números de estágios, com área fixa de 40 m^2 e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.

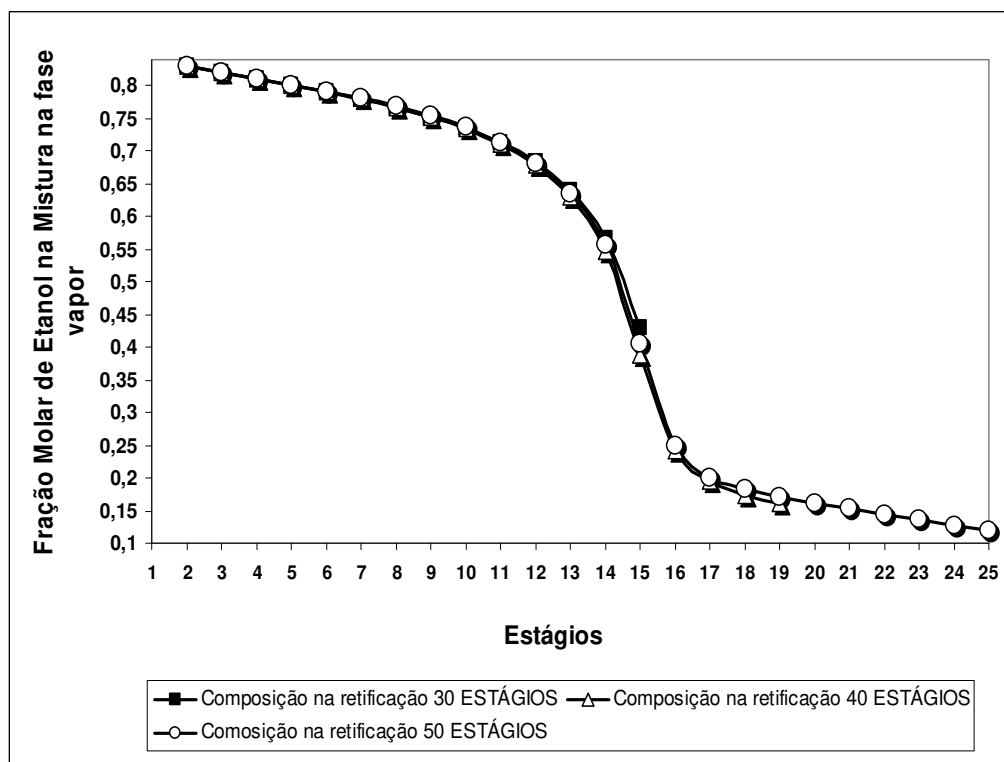


Figura 4.14. Composição molar do Etanol na fase vapor para CDIIC com diferentes números de estágios, com área fixa de 40 m² e diferença de pressão entre as seções de 1,4 atm.

Na Figura 4.12 foi observado que o coeficiente global alcança valores próximos a 3500 W/m² K nos estágios da parte inferior da CDIIC com 50 estágios. O coeficiente global de troca de calor (U) obtido é resultado das mesmas correlações utilizadas em 4.2.1. Nos respectivos estágios termo-acoplados de 1-14 a coluna com 30 estágios apresenta maiores valores de U. Muito do que diz respeito a esses valores (nas diferentes colunas) se deve à mudança nos valores de algumas variáveis dependentes da temperatura, com o aumento de número de estágios, as temperaturas nas quais se calculam os coeficientes globais correspondem a temperaturas maiores.

O perfil de diferenças de temperatura na figura 4.13 tem estrangulamento de diferenças de temperatura em estágios diferentes. Na CDIIC com 40 e 50 estágios esse ponto corresponde ao décimo segundo estágio termo-acoplado, enquanto na CDIIC com 30 estágios o ponto de estrangulamento se encontra no décimo estágio. A CDIIC com 30 estágios apresenta valores mais baixos de diferença de temperatura, consequentemente, a troca nominal também é menor.

Como abordado anteriormente, utilizando-se o cálculo de área descrito por Gadalla et al. (2007), são obtidos altos valores de área de troca de calor, isso impossibilita a integração energética com convergência no simulador. Tentativas de se aumentar a vazão de entrada com intuito de aumentar a energia requerida no refeedor foram efetuadas, porém o diâmetro de inundação necessário para tal vazão aumenta e, como consequência, o valor da área alcançado pela análise geométrica também aumenta. Por isso, para analisar a CDIIC com maior número de estágios, foi necessária a diminuição da área de troca de calor.

Outro ponto a ser destacado é a questão de que no presente estudo não se leva em consideração o custo para a produção da CDIIC. Uma coluna com mais estágios apresentará maiores custos de projeto e implementação e aqui somente a questão energética é discutida.

Observou-se na Figura 4.14 que a composição na retificação coincidiu para os diferentes números de estágios (sobreposição das curvas), isso é evidente uma vez que para a comparação de resultados as especificações da composição de topo e fundo foram mantidas constantes. A vantagem em se trabalhar com mais estágios (nesse caso) se verifica em uma maior vazão de topo de álcool hidratado (AEHC). Abaixo segue uma tabela de produção diária de etanol hidratado para diferentes números de estágios:

Tabela 4.6. Diferença de produção diária para diferentes colunas para uma mesma vazão de entrada e especificação do produto.

<i>Estágios</i>	<i>Produção de etanol (AEHC) diária</i>
-	L/dia
30	707.412,96
40	708.720,48
50	710.537,76

4.2.3 CDIIC com painéis de troca de calor; Troca de calor constante

Outra análise pertinente corresponde a se fixar o valor de troca térmica entre os estágios. O valor fixado é um valor constante, sendo a soma destes valores necessária para diminuir a energia no refeedor a zero. Posteriormente, encontra-se a área necessária para cada estágio tomando como base o coeficiente global de troca de calor (U) provido pelas correlações utilizadas em 4.2.1. As condições da CDIIC nesta etapa permanecem iguais às apresentadas na Tabela 4.5 (alimentação de 70 litros/segundo).

Investigou-se a quantidade de energia necessária a ser trocada por estágio para um aumento de pressão de 1,4 atm no vapor saindo do compressor. Novamente aqui, um valor fixo na diferença de pressão entre a seção de esgotamento e retificação é utilizado para efeito de comparação.

Tabela 4.7. Quantidade de energia requerida por estágio para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração diferentes números de estágios entre as colunas ($P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$):

Estágios CDIIC	Valor de Troca Térmica por Estágio	Energia Total Requerida
-	kW	kW
30,00	3.022,42	39.291,46
40,00	1.955,94	35.206,99
50,00	1.477,15	33.974,45
60,00	1.190,88	33.344,61

Tabela 4.8. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração diferentes números de estágios entre as colunas ($P_{ret.} - P_{esg.} = 1,4 \text{ atm}$):

Estágios CDIIC	Compressor	Q reboiler (CDIIC com painéis)	Gasto Total (Q reb.+ 3Comp.)
-	kW	kW	kW
30	1.893,90	0	5.681,70
40	1.467,66	0	4.402,99
50	1.329,68	0	3.989,04
60	1.269,48	0	3.808,45

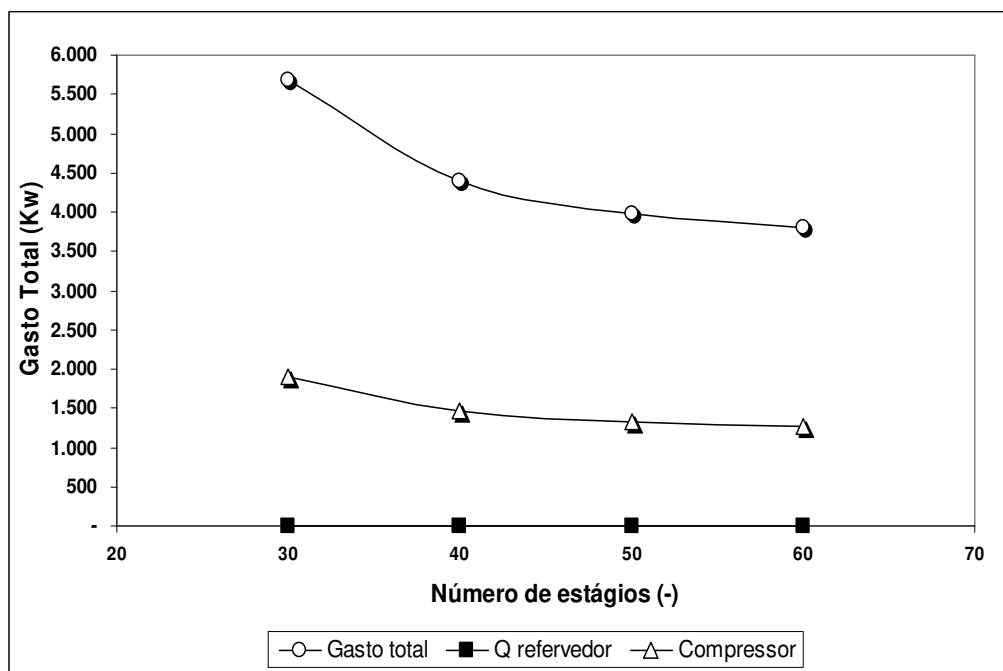


Figura 4.15. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor para colunas com diferentes números de estágios e troca térmica constante.

Na Tabela 4.7 observa-se que um valor menor de energia é requerido para uma coluna com maior número de estágios (independente da potencial troca de calor entre os estágios termo acoplados). Com maior número de estágios termo-acoplados, colunas maiores necessitam de menores valores de troca térmica nominal por estágio. Uma menor energia para a re-compressão do vapor também se faz necessária para colunas com maior número de estágios, como se verifica na Tabela 4.7.

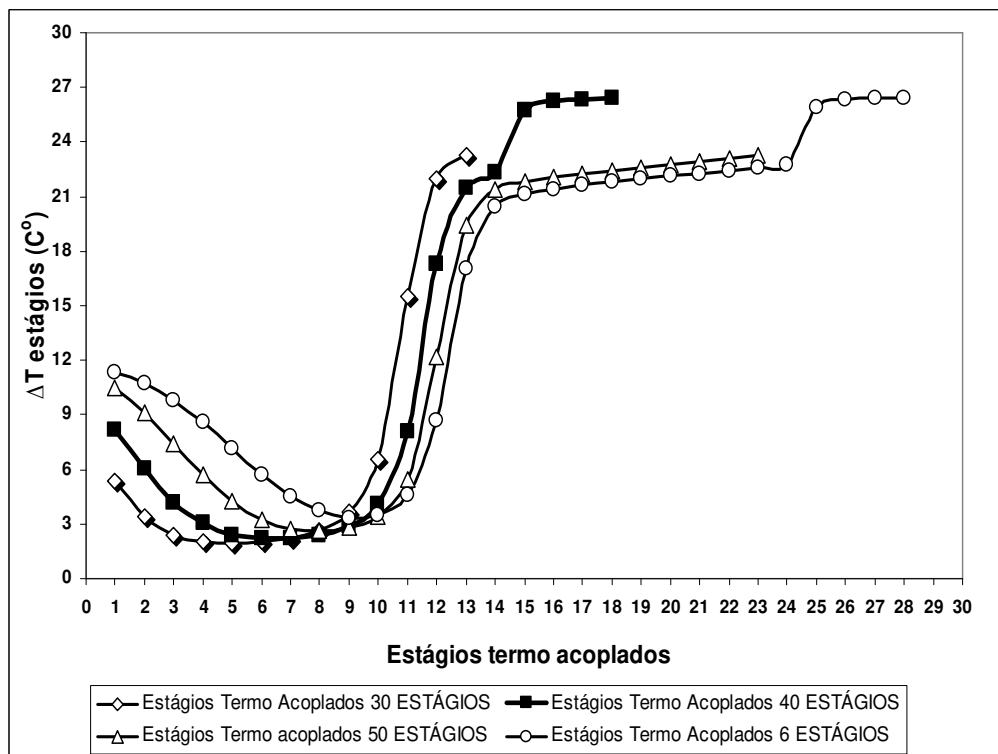


Figura 4.16. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados para colunas com diferentes números de estágios e troca térmica constante entre os estágios.

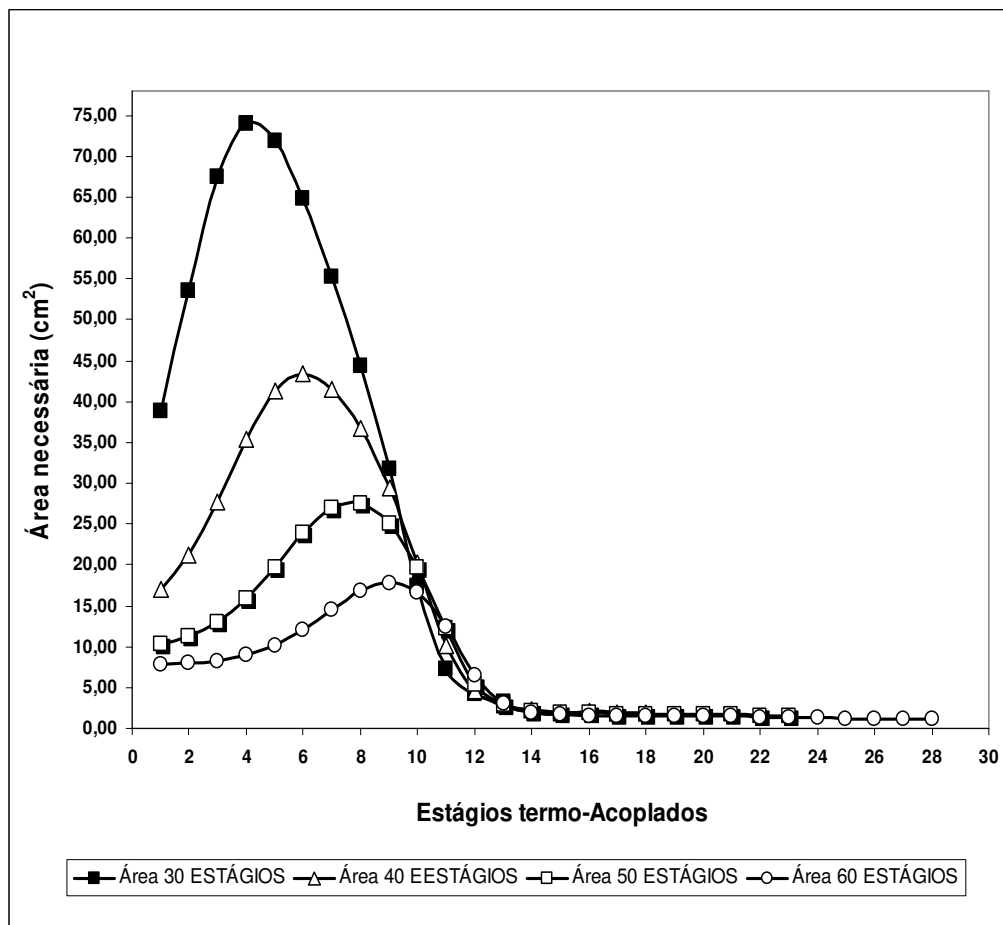


Figura 4.17. Variação da área de troca de Térmica necessária para uma troca térmica constante entre os estágios.

Na Figura 4.16 as colunas têm estrangulamento de diferenças de temperatura em estágios diferentes. As colunas com 40 e 60 estágios apresentam um degrau na diferença de temperatura nos seus quatro últimos estágios.

Com o coeficiente global de troca de calor (calculado como em 4.2.1), foi possível verificar que a área necessária para prover a respectiva troca de calor constante por estágio foi baixa (na ordem de centímetros). Os maiores valores de área correspondem aos respectivos valores de estrangulamento de diferença de temperatura (para cada coluna).

A situação onde ocorre troca de calor constante entre os estágios corresponde a uma situação não usual. Na prática somente se conseguiria fazer com que a CDIIC trocasse um valor constante de calor por estágio com uma área variável por estágio. A CDIIC acoplada com painéis de troca de calor e com troca térmica constante entre os estágios transmite uma

situação desvantajosa. De acordo com De Rijke (2007) as vantagens de se utilizar uma área constante para todos os estágios são duas: o gradiente de diferença de temperatura é explorado de uma maneira melhor e a área total necessária é menor.

Além de essa metodologia de integração energética se restringir a algumas ocasiões específicas (tais como nenhum gasto de utilidades no refeedor), ela é um pouco inconsistente uma vez que existem estágios que potencialmente podem trocar uma quantidade maior de calor que outros.

Gadalla et al. (2004) sugerem que ambas, troca de calor e configuração do equipamento, podem ser melhoradas (em termos energéticos) se uma área constante de transferência por estágio for utilizada, resultando em um perfil de troca nominal de calor que segue os perfis dos gradientes de temperatura.

4.2.4 Quantidade de líquido escoando e quantidade de vapor condensando nos painéis

O percentual adotado para a quantidade de líquido escoando e vapor condensando nos painéis foi alto (em torno de 10%). Analisando as condições de evaporação e condensação descritas por De Rijke (2007), pode-se inferir que a quantidade que vapor que se condensa e a quantidade de líquido que escoar descendentemente pelos painéis de cada estágio são ambas pequenas.

Este trabalho traduz um dos primeiros estudos feitos da CDIIC para a mistura etanol-água; dessa maneira, a quantidade fixada foi considerada plausível à priori. Abaixo, na Figura 4.18, é mostrado como os valores de coeficiente global variam para os estágios termo-acoplados aumentando-se o percentual de condensação e escoamento de líquido.

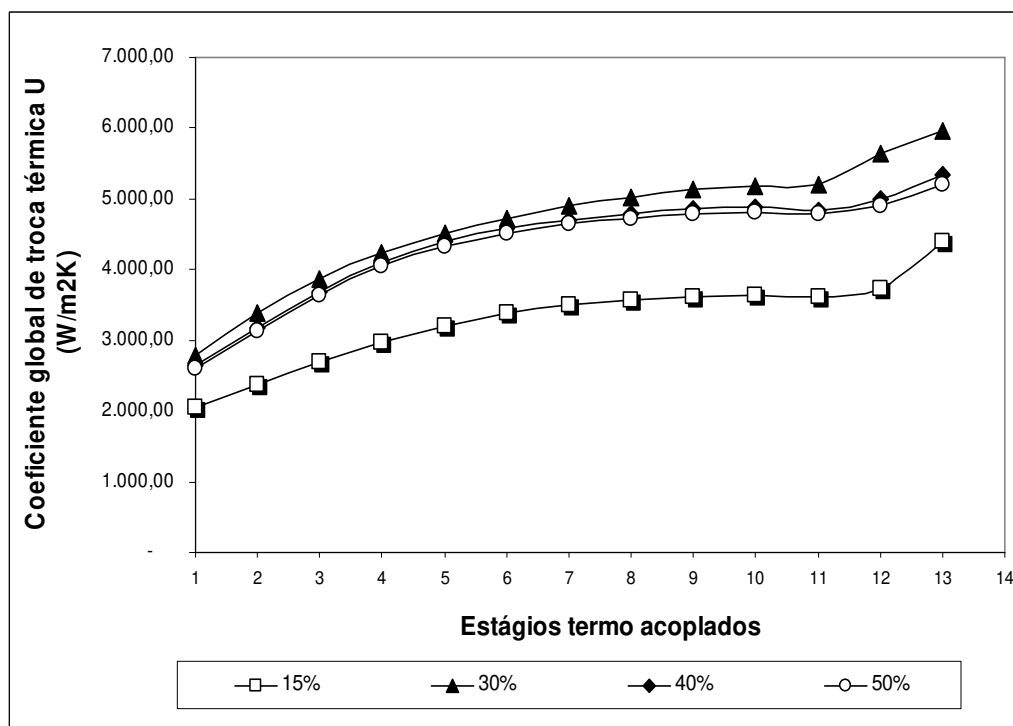


Figura 4.18. Valores de coeficiente global para os estágios termo-acoplados da CDIIC (30 estágios; $P_{\text{ret}} - P_{\text{esg}} = 1,4 \text{ atm}$) variando-se igualmente o percentual de líquido escoando e de vapor condensando pelos painéis. O percentual é tomado referente ao total de fluido em cada estágio (da seção correspondente de retificação/esgotamento).

A Figura 4.18 mostra como varia o coeficiente global para um aumento do percentual da quantidade de líquido escoando pelos painéis e para um aumento da condensação de vapor nos mesmos. Ficou evidente que com maiores percentagens adotadas, o valor de U (coeficiente global) aumentou consideravelmente. Com uma porcentagem de 15%, os valores de troca de calor da coluna ultrapassam a energia requerida no refeedor (referentes às condições descritas). A partir de uma porcentagem de 30% observou-se um decréscimo no valor do coeficiente global, isso ocorre devido aos valores do coeficiente de película externo diminuírem para altos valores de Reynolds (equação de Alhusseini).

Juntamente com o procedimento de simulação da CDIIC, uma alta importância é dada ao cálculo do coeficiente global no presente estudo, isto porque, as simplificações feitas aqui refletem diretamente nos resultados de recuperação energética da coluna.

É importante ressaltar que o valor do coeficiente global de troca de calor é sempre estimado para se efetuar os cálculos de recuperação energética na CDIIC. Por apresentar

uma abordagem mais teórica, optou-se aqui por trabalhar com correlações, o que resultou em simplificações na quantidade de vapor condensando e líquido escoando.

4.2.5 Eficiência Global (E_{OC}) da CDIIC

Calculou-se a eficiência global da CDIIC para comparação com dados futuros. O modelo de foi utilizado para o cálculo da eficiência global da CDIIC com painéis de troca de calor. Valores de 55% de eficiência foram encontrados em todas as situações apresentadas para a CDIIC.

Tabela 4.9. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis e 30 estágios conforme foi variada a pressão entre a seção de retificação e esgotamento:

<i>Eficiência de Estágios - O'CONNELL</i>		
$P_{ret.} - P_{esg.}$ (atm)	ESGOTAMENTO	RETIFICAÇÃO
1,3	0,55	0,5503
1,4	0,5507	0,5532
1,5	0,5515	0,556
1,6	0,5521	0,5587
1,7	0,5527	0,5614

Tabela 4.10. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis conforme foi variado o número de estágios:

<i>Eficiência de Estágios - O'CONNELL</i>		
Nº Estágios (-)	ESGOTAMENTO	RETIFICAÇÃO
30	0,5507	0,5532
40	0,5433	0,5471
50	0,541	0,5483

Tabela 4.11. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis e com troca térmica constante:

<i>Eficiência de Estágios - O'CONNELL</i>		
Nº Estágios (-)	ESGOTAMENTO	RETIFICAÇÃO
30	0,554	0,5571
40	0,5524	0,5546
50	0,5507	0,5533
60	0,5478	0,5518

Qualquer modelo de eficiência de prato será dificilmente dito correto ou dito eficaz neste trabalho porque não se dispõem de dados experimentais da coluna de destilação com

integração interna de calor para a mistura de interesse. Não se pode afirmar qual valor de eficiência é melhor com relação a outro. Assim, correlações não tão precisas, ou melhor, equações que tem um grau de suposição baixo tal como se vê em correlações empíricas, são melhores utilizadas aqui.

O grau de suposição em correlações empíricas pode ser considerado baixo, pois ao se trabalhar com eficiências mais fundamentadas teoricamente, por exemplo, deve-se dispor de muitos dados de projeto da coluna. No presente estudo, desconhecem-se tais dados e estimar tais valores acarretaria em um grau de confiabilidade ainda menor aos resultados.

De Rijke (2007), em seu estudo com hidrocarbonetos, afirma que na CDIIC com painéis de troca de calor ocorre um aumento da eficiência de separação em função dos painéis, este em aproximadamente 10%. A principal razão para esse aumento é devido aos painéis diminuírem a mistura retrógrada (*back mixing*) de vapor no prato, aumentando o gradiente de transferência de massa.

Justificativas para não utilizar o modelo de Garcia e Fair (2000):

O modelo de Garcia e Fair (2000) para predição de eficiência de pratos é complexo, leva em consideração muitos parâmetros da coluna e muitas correlações tem um embasamento teórico altamente elevado (no que diz respeito ao comportamento hidrodinâmico no prato e a transferência de massa em vários regimes).

O principal objetivo do projeto é comparar gastos energéticos entre a nova configuração e a coluna convencional.

Para o uso de correlações com um embasamento teórico elevado demanda-se muito tempo e dedicação para o seu cálculo correto. Mesmo que no atual projeto se dispusesse dos parâmetros ou algumas aproximações pudessem ser levadas em consideração para o cálculo dessa eficiência, o tempo gasto para se obter valores condizentes, foge do escopo do tempo de uma dissertação de mestrado (visto outros objetivos principais neste trabalho).

O fato de existir correlações mais simples e empíricas, e estas puderem ser utilizadas, facilitaram o propósito de calcular a eficiência global da coluna e diminuem o tempo de execução dessa tarefa.

Kister (1992) em seu livro diz não acreditar em nenhuma correlação teórica para se obter a eficiência de estágio a menos que provem que a correlação já superou o problema da super-estimação da eficiência.

4.3 Análise II

Nessa seção dos resultados um valor fixo do número de Reynolds foi utilizado em determinadas correlações para o cálculo do coeficiente de película. As correlações de Nusselt, equação (23) para a condensação do vapor em forma de um filme em regime laminar-ondulatório e a correlação de Chun e Seban equação (9) para evaporação do filme em regime laminar foram utilizadas; ambos os valores de Reynolds foram tomados como valores próximos ao regime de transição. Mais especificamente $Re = 300$ para o lado interno, enquanto que o lado externo variou de acordo com a equação (6).

De Rijke (2007) após observações da coluna experimental constatou que o regime de escoamento do vapor condensando se apresentava laminar/laminar-ondulatório para diferentes vazões. A correlação (23), utilizada nessa seção, foi utilizada no trabalho de De Rijke para valores experimentais de coeficiente de película interno. Ele também recomenda a utilização da correlação de Chun e Seban para evaporação de filmes aquosos. Com intuito de simular situações previstas por De Rijke foram utilizadas tais correlações ((23) e (9)) em regimes de escoamento pré-definidos (número de Reynolds Fixo).

A finalidade principal de Análises II é gerar uma nova fonte de resultados para os gastos energéticos da coluna. Análises a respeito de CDIICs com maiores números de estágios e CDIICs com troca térmica constante não foram realizadas.

A Figura 4.19 traz resultados referentes aos gastos totais de energia na CDIIC com e sem painéis, comparadas à coluna convencional (C.C.) utilizando as correlações (23) e (9) para o cálculo do coeficiente Global de troca térmica.

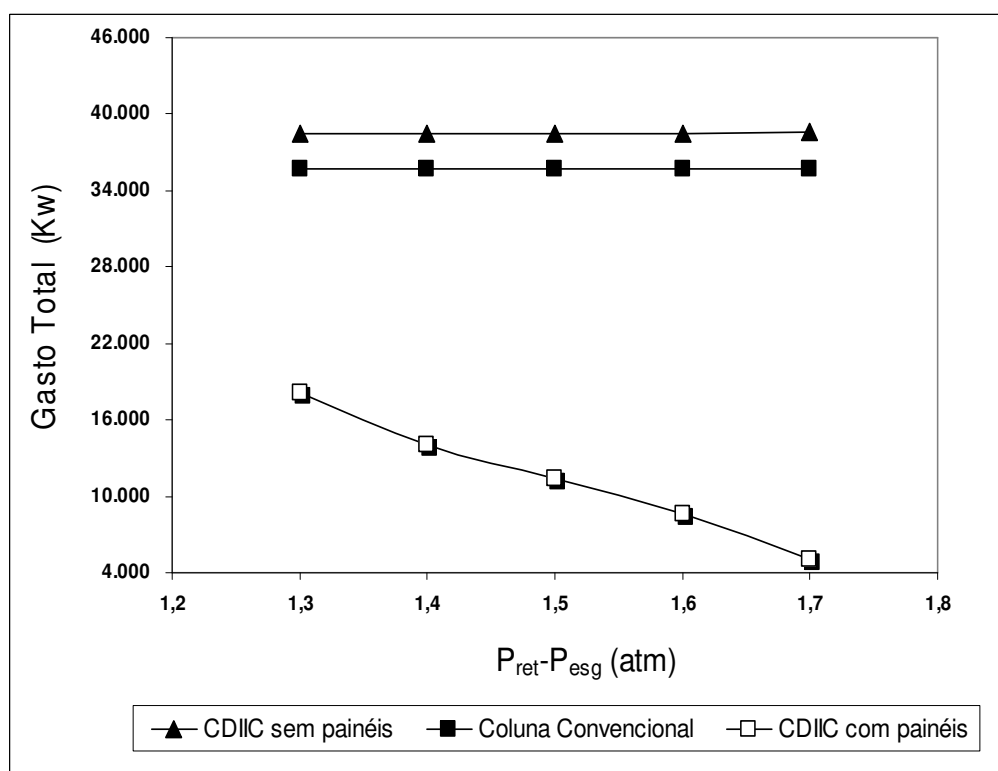


Figura 4.19. Gastos energéticos totais das CDIICs comparada a coluna convencional (C.C.), levando-se em conta gastos do compressor.

No gráfico observa-se que o gasto energético da CDIIC sem painéis de troca de calor é maior que o gasto energético na coluna convencional mesmo com o aumento da carga de pressão. Observou-se que, conforme a diferença de pressão entre as seções foi aumentada, a energia diminui gradativamente até se chegar a um estado (na CDIIC) onde não se tem a necessidade de um refeedor. Na tabela 4.12 é feita a discriminação para valores de gastos no compressor e no refeedor da CDIIC com painéis de troca de calor de acordo com a equação (67):

Tabela 4.12. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:

$P_{ret.} - P_{esg.}$	Compressor	Q refeedor (CDIIC com painéis)	Gasto Total
atm	kW	kW	kW
1,3	1.279,88	14.313,98	18.153,63
1,4	1.384,65	9.872,64	14.026,59
1,5	1.504,55	6.938,21	11.451,86
1,6	1.650,44	3.648,29	8.599,61
1,7	1.820,44	(390,04)	5.071,28

Os dados da tabela 4.12 podem ser verificados na Figura 4.20.

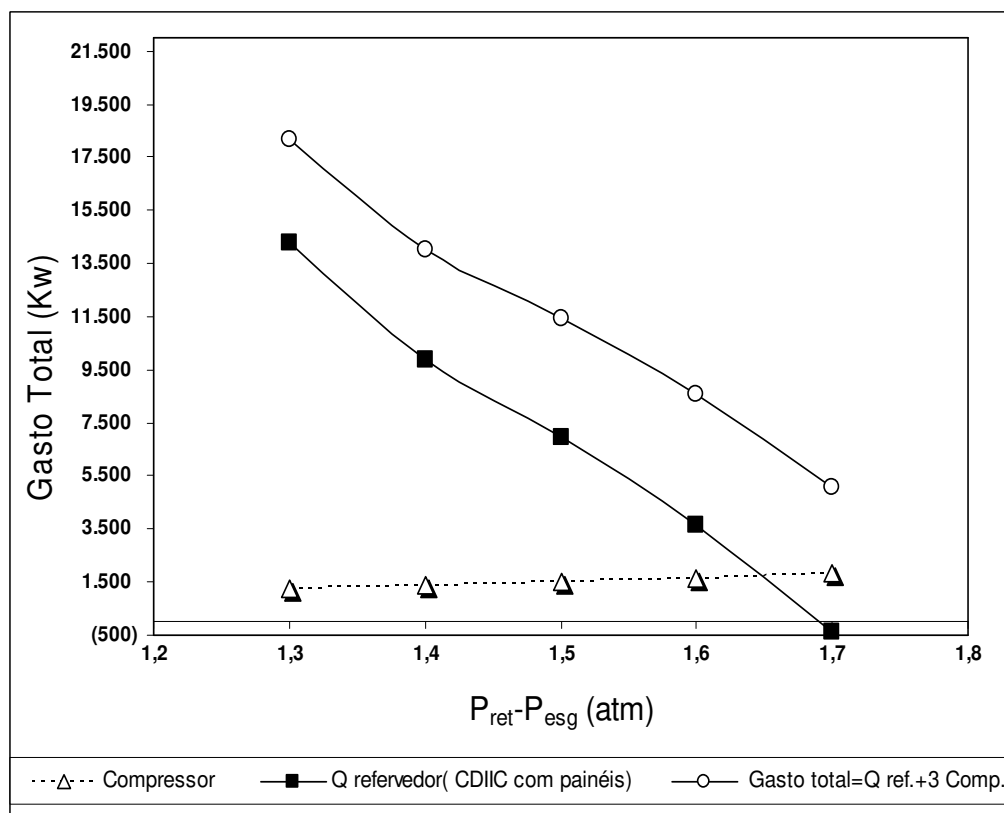


Figura 4.20. Discriminação de gastos energéticos da CDIIC provida de painéis de troca de calor com área fixa de troca térmica.

Valores bem abaixo daqueles encontrados em uma coluna convencional são alcançados para a CDIIC referente à mistura de estudo. Observa-se que o ponto ótimo, ou melhor, a situação a qual menos se gasta energia na CDIIC se encontra quando nenhuma energia é gasta no refeedor. Diferenças de pressão entre as seções ($P_{ret.} - P_{esg.}$) próximas a 1,70 é aonde se obtém o menor gasto energético. Por extrapolação linear, chegou-se ao valor de energia zero gasta no refeedor a uma diferença de pressão de 1,693 bar entre as duas seções, o que resultou em uma economia energética com relação a coluna convencional para a CDIIC com painéis de troca de calor de 85%.

Para efeitos de comparação com a situação apresentada em Análises I, a diferença de pressão entre as duas seções foi efetuada até valores de 1,7 atm; observa-se que o último ponto apresenta um valor negativo que não tem veracidade.

Na Figura 4.21 segue o gráfico de comparação entre os resultados da CDIIC com painéis (coluna 30 estágios teóricos) para Análises I e II, juntamente nele seguem resultados para um valor fixo de coeficiente global de troca de calor fixo (valor fixo por toda a coluna). Esses valores foi adotado com base em intervalos de coeficientes globais presentes na literatura para evaporadores de soluções aquosas que variam em intervalos de 1500-6000 KW.

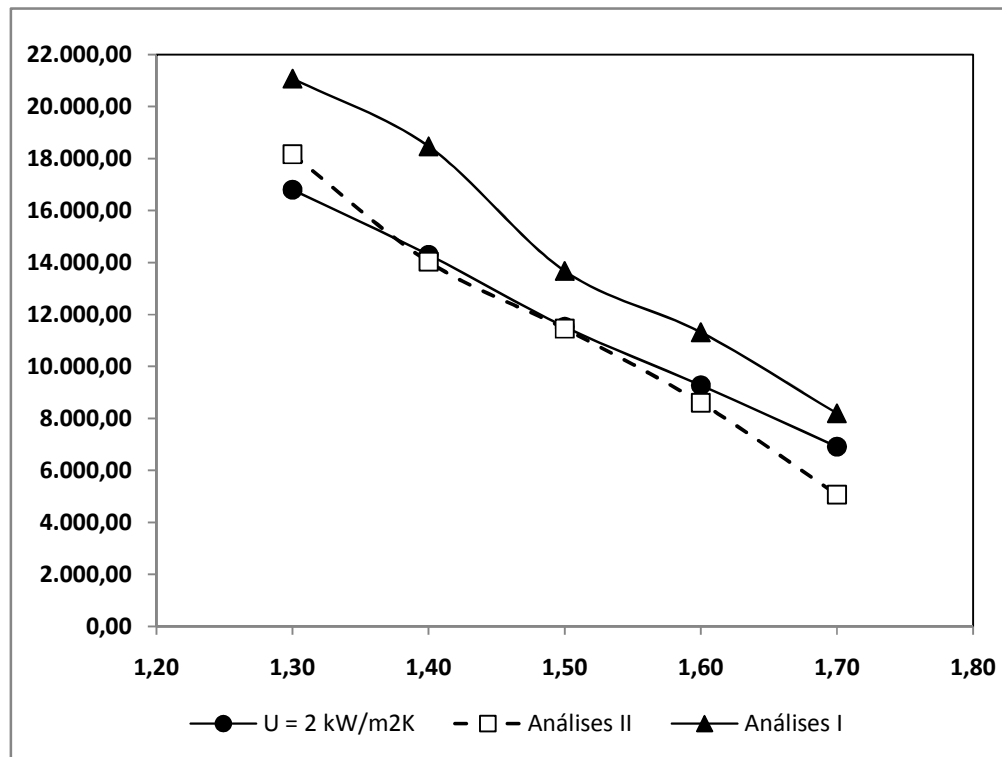


Figura 4.21. Comparação entre os resultados de gastos energéticos para a CDIIC com 30 estágios acoplada com painéis de troca de calor variando-se a pressão entre as seções de esgotamento e retificação. Os resultados correspondem a Análises I e II e coeficiente global constante de 2 kW/m² K.

Os valor do coeficiente global ficou fixo em 2 Kw/m²K. As simulações foram conduzidas de maneira análoga à metodologia no item 3.4. O fato de o coeficiente global (U) permanecer constante não retira a necessidade de iterações da simulação. Observou-se que os valores de gastos energéticos totais da CDIIC, para o valor constante do coeficiente global estipulado, permaneceram entre os valores simulados em Análises I e II.

No que diz respeito aos resultados encontrados em Análises II seguem a seguir nas figuras 4.22-23 o comportamento de alguns parâmetros da CDIIC com relação às diferentes

diferenças de pressões entre as duas seções da coluna; em alguns casos verifica-se o comportamento dessas variáveis com relação à coluna convencional.

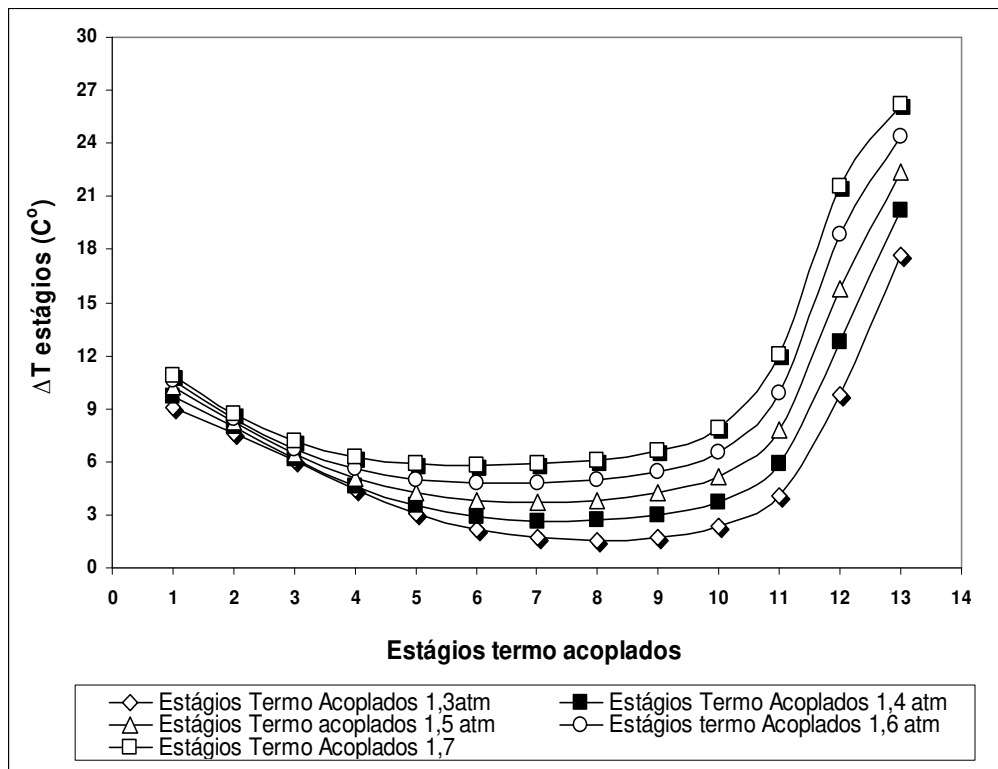


Figura 4.22. Variação de temperatura entre os estágios termo-acoplados na CDIIC.

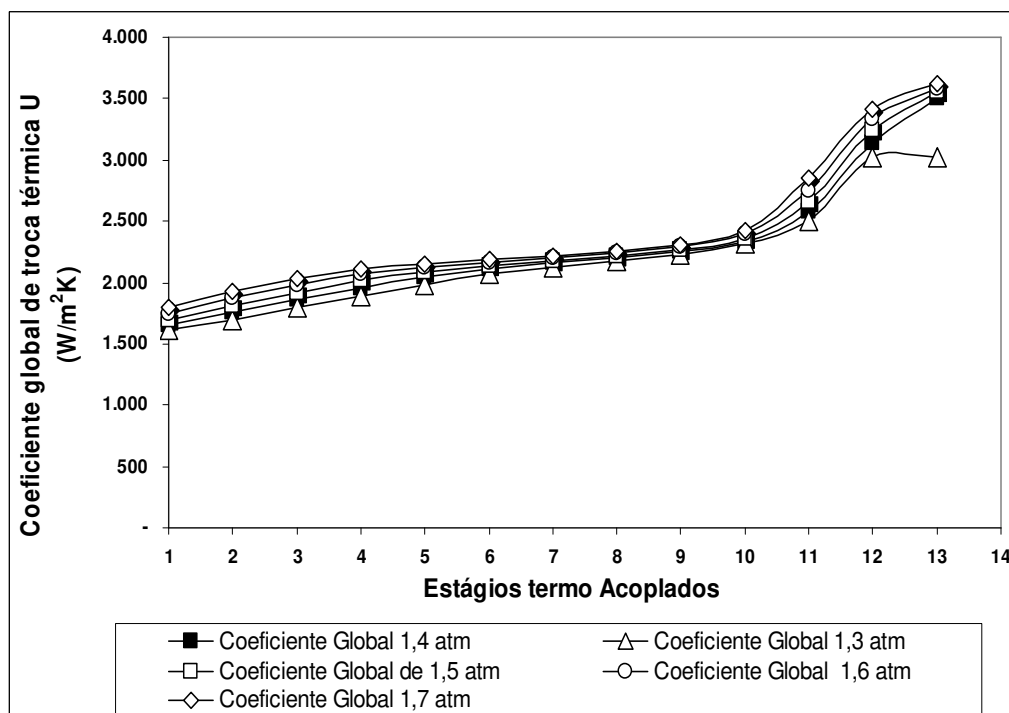


Figura 4.23. Variação do Coeficiente Global de Troca Térmica entre os estágios termo-acoplados em diferentes cargas de pressões.

Em Análises I, foi fixado um valor percentual de vapor e líquido em contato direto com os estágios. Nesta seção os valores de Reynolds foram fixados. Houve uma pequena mudança verificada nos valores de troca térmica durante as iterações, mas ainda sim, os resultados dos perfis variaram no decorrer de 3 a 4 iterações.

O coeficiente global de troca térmica permaneceu na faixa de 1,5-3,5 kW (Figura 4.23). Decorrente de se fixar o número de Reynolds, os valores do coeficiente global variaram muito pouco com o aumento da diferença de pressão entre as duas seções da coluna. Isso pode ser verificado quando se observa que as curvas quase coincidem no gráfico (Figura 4.23). A dependência do número de Reynolds nas correlações para o cálculo dos coeficientes de película apresenta-se como um dos principais fatores para a pequena variação do coeficiente global.

Observa-se na Figura 4.22 um perfil variável de diferença de temperatura, com uma diferença mínima próxima ao centro dos estágios termo-acoplados. Esse estágio em particular é o qual se encontra o *pinch-point* (oitavo estágio termo-acoplado). Comparado a Figura 4.22 com a Figura 4.6, observa-se que mesmo com valores diferentes de troca nominal entre os estágios os perfis de diferença de temperaturas continuaram coincidentes.

Ainda que utilizadas diferentes correlações, e essas modificarem o coeficiente global de troca de calor, a diferença não é significativa ao ponto de modificar o perfil de temperatura.

Os resultados das variáveis que tem influencia direta na troca de calor nesta seção do trabalho apresentaram mudanças com relação a Análises I. Apesar de se utilizarem outras correlações e fixar-se o número de Reynolds, a faixa da abrangência dos valores do coeficiente global permaneceu parecida. Do gráfico 4.21 constata-se que os gastos energéticos foram menores quando utilizadas as correlações dessa seção; comparativamente à Análise I. Valores maiores nos coeficientes globais de troca de calor são a principal causa da ocorrência desse fato.

Quanto aos valores de área, estes ficaram próximos à 140 m² tal como em Análise I.

4.3.1 Eficiência Global (E_{OC}) da CDIIC

Como já discutido anteriormente, a utilização de correlações empíricas tem maior aplicabilidade para a CDIIC. O modelo de foi utilizado para o cálculo da eficiência global da CDIIC com painéis de troca de calor, valores de 55% de eficiência foram encontrados em grande parte dos aumentos de pressão da CDIIC.

Tabela 4.13. Valores de eficiência referentes à CDIIC com painéis de 30 estágios conforme foi variada a pressão entre a seção de retificação e esgotamento:

<i>Eficiência de estágios - O'CONNELL</i>		
$P_{ret.} - P_{esg.}$ (atm)	ESGOTAMENTO	RETIFICAÇÃO
1,3	0,5504	0,5507
1,4	0,5512	0,5537
1,5	0,5518	0,5564
1,6	0,5525	0,5592
1,7	0,553	0,5618

4.4 Análise III

Nessa seção dos resultados, um novo estudo de caso foi realizado. Na tentativa de se estudar situações de onde se encontram CDIICs de topo e de fundo (seção 3.1.1), utilizou-se uma nova concentração na corrente de alimentação da coluna no intuito de se produzir etanol comercial (AEHC).

Como abordado em 3.1.1, à alimentação indica quantos estágios teóricos cada seção irá apresentar na CDIIC; nos estudos de caso anteriores (4.1; 4.2), para as concentrações de topo e fundo pré-especificadas, a alimentação ocorria no centro, caracterizando umas das situações a qual se tem a CDIIC ideal.

Partindo-se da prerrogativa de que quanto maior o número de estágios trocando calor na CDIIC menor o gasto energético, o intuito dessa seção é o de resultados para uma comparação entre CDIIC_total, CDIIC_topo e CDIIC_fundo para uma mesma concentração de topo e de fundo de etanol. Para uma situação, a qual, a alimentação se apresenta mais concentrada em etanol (50% em etanol em massa), a fim de se produzir etanol hidratado (AEHC), a alimentação costuma se apresentar mais próxima ao fundo da coluna. Uma análise de sensibilidade foi realizada para uma coluna com 40 estágios; dessa maneira, se procede à simulação como na Tabela 4.14.

Tabela 4.14. Especificações da coluna para mistura etanol-água:

<i>Especificações da Coluna</i>		
ALIMENTAÇÃO:		etanol-água
Composição WT% Etanol		50
Fluxo de entrada	(l/s)	69,75
Pressão	(atm)	1
Pressão na Retificação	(atm)	variável
Pressão no Esgotamento	(atm)	1
Estágios na Retificação	-	32
Estágios no Esgotamento	-	8
Pureza de produto de topo	WT% Etanol	92,6
Pureza no produto de fundo	WT% Etanol	100 PPM

As correlações que foram utilizadas em Análises III são as mesmas apresentadas no Item 4.1 (para um percentual fixo de vapor e líquido condensando e evaporando, respectivamente). Novamente aqui, a análise geométrica feita por GADALLA et al. (2007) para cálculos de área da coluna, apresentou valores que tornaram inviável proceder com as simulações da CDIIC. Mais uma vez, os valores de troca térmica ultrapassaram a energia necessária no refeedor. O que foi feito para ser possível efetuar entre as comparações entre as CDIICs foi utilizar um valor fixo de área de troca térmica por estágio. O valor utilizado foi de 140 m² (o mesmo encontrado em 4.1) para efeitos de comparação.

Variaram-se as diferenças de pressão entre as duas seções da CDIIC para três diferentes valores. Sendo que, para uma diferença de pressão entre as seções da CDIIC em 0,7 atm, a viabilidade termodinâmica (Item 3.2) foi alcançada. Os resultados para a CDIIC com painéis de troca de calor para CDIIC_total, CDIIC_fundo e CDIIC_topo seguem na figura 4.24 e na Tabela 4.15 respectivamente.

Quando se efetua a simulação a CDIIC_topo e CDIIC_fundo ocorre diferenciação destas somente na integração energética. Na CDIIC_topo, a seção de esgotamento troca calor com os estágios do topo da coluna e o contrário acontece com a CDIIC_fundo. Como, de acordo com a alimentação observada por análises de sensibilidade, a seção de esgotamento possui menos estágios que a seção de retificação, um grande número de estágios da retificação ficam sem contato térmico (sem trocar calor). Dessa maneira, deve-se escolher em trocar calor no topo ou no fundo da seção de retificação. Na CDIIC_total isso não ocorre nela um número igual de estágios trocam calor nas duas seções.

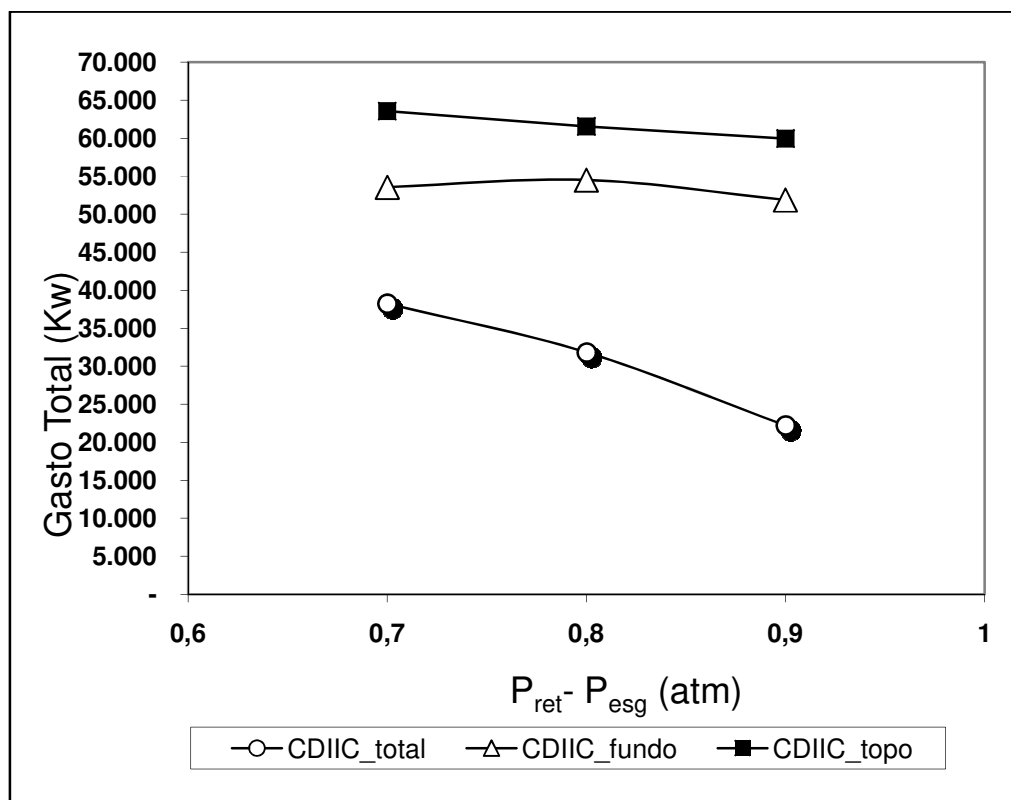


Figura 4.24. Comparação dos gastos energéticos totais das CDIICs com painéis de troca de calor, levando-se em conta gastos do compressor.

Tabela 4.15. Gastos energéticos para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:

$P_{ret.} - P_{esg.}$	CDIIC_total	CDIIC_fundo	CDIIC_topo
atm	kW	kW	kW
0,7	38.232,65	53.557,26	63.551,78
0,8	31.826,28	54.494,93	61.544,41
0,9	22.216,37	51.879,05	59.962,18

Com os valores obtidos na tabela fica evidente que a CDIIC_total é a coluna, que menos gasta energia para as respectivas diferenças de pressão entre as seções de retificação e esgotamento. Posteriormente, observa-se que na CDIIC_fundo gasta-se uma quantidade menor de energia no refeedor que na CDIIC_topo. Esse fato ocorre principalmente porque as diferenças de temperatura observadas termo-acoplando-se os estágios da seção esgotamento com o fundo da seção de retificação são maiores que as respectivas diferenças de temperatura observadas termo-acoplando-se os estágios da seção de esgotamento com o topo da seção de retificação.

O valor da energia no condensador mudou de acordo com a configuração CDIIC utilizada nesta seção. As diferenças não foram tão significativas para mesmas razões de refluxo utilizadas como pode ser observado na Tabela 4.16.

Tabela 4.16. Gastos energéticos do condensador para a CDIIC com painéis de troca de calor levando-se em consideração a diferença de pressão entre as duas seções:

$P_{ret.} - P_{esg.}$	CDIIC_total	CDIIC_fundo	CDIIC_topo
atm	kW	kW	kW
0,7	-84946	-84746	-81880
0,8	-84605	-84468	-81567
0,9	-84280	-84230	-81275

Para convergência dos resultados, uma maior razão de refluxo foi necessária na CDIIC_Total e CDIIC_fundo o que resultou nos valores mais elevados de gastos energéticos no condensador destas comparadas a CDIIC_topo.

Os valores de área foram aproximados para um valor fixo de área de troca térmica promovida pelas placas para as diferentes CDIICs. Isso foi feito a fim de se possibilitar a

comparação das diferentes configurações da CDIIC no que diz respeito ao número de estágios pertencente a cada seção da coluna.

Os valores de área alcançados através da análise geométrica foram em torno de 280 m², por serem valores elevados, e para fim de comparação, um valor fixo de área foi utilizado. Apesar de esse procedimento poder prejudicar os resultados (no sentido de uma das configurações apresentar maior área dentre outra e, por consequência, trocar mais calor) esse fato não teve influencia aqui. Isso porque a maior área observada corresponde, justamente, a coluna com resultados mais satisfatórios. Dessa maneira, mesmo que a área obtida pela análise geométrica fosse utilizada, ainda assim a CDIIC_total teria vantagem por ter uma área maior de troca de calor.

5. CONCLUSÕES

Abaixo seguem as conclusões correspondentes a cada Análise realizada.

5.1 Conclusões Análises I

A comparação dos resultados da CDIIC foi feita com relação a resultados de estágios teóricos (condição de equilíbrio no prato). A coluna convencional teórica foi comparada com valores da CDIIC teórica com e sem painéis de troca e calor. A área dos painéis ficou próxima de 140 m^2 para a CDIIC com 30 estágios. Observou-se que foi necessário aplicar uma diferença de pressão entre as duas seções de 1,3 atm para tornar a CDIIC viável termodinamicamente. A troca de calor encontrada foi alta, dessa forma, uma pequena faixa de valores de aumento de pressão foi varrida. O critério de parada foi a energia nula no refeedor, a partir daí valores negativos são encontrados.

A CDIIC sem painéis de troca de calor é inviável para a mistura etanol-água, o aumento de pressão somente aumentou o gasto energético. O contrário ocorre com a CDIIC com painéis de troca de calor, onde gradativamente o valor da energia diminuiu no refeedor. Dessa forma, um maior enfoque em resultados da CDIIC com painéis de troca de calor foi realizado em todos os resultados da dissertação.

Com relação ao perfil de temperatura observou-se que a mistura apresenta um perfil variável com o estrangulamento de diferença de temperatura próximo ao centro dos estágios termo acoplados.

Problemas de convergência se apresentam em determinadas cargas de pressões, impossibilitando um maior número de pontos para análise. Valores de gastos energéticos bem abaixo dos que são encontrados em uma destilação convencional são alcançados com a CDIIC para a mistura de estudo. Valores de 77% de diminuição dos gastos energéticos foram encontrados para as condições de separação da mistura etanol-água, levando-se em conta os valores simulados.

Comparando-se os resultados para CDIICs com maiores números de estágios se verificou claramente que com um maior número de estágios os gastos energéticos requeridos são menores, contudo um maior gasto de projeto se faz necessário. Como não foi feita essa equivalência (gastos de projeto com relação aos gastos energéticos além dos possíveis problemas operacionais), muito não se pode afirmar com relação a colunas com

maiores números de estágios (em termos de maior viabilidade) aquém do que já foi abordado.

Observando a CDIIC com painéis de troca de calor, com uma troca térmica nominal constante e variando-se o número de estágios, verificou-se que conforme o número de estágios aumentou a energia requerida por estágio diminuiu e, por consequência, a área requerida por estágio também diminuiu.

O trabalho encontra-se o mais próximo possível das condições apresentadas na literatura até então. Isso se verifica quando pouca aproximação para os cálculos dos fenômenos envolvendo a troca térmica da coluna é realizada. Além de o trabalho tratar de uma das primeiras introduções do conceito da coluna de destilação com integração interna de calor no Brasil, a sua aplicação para a mistura etanol-água nas faixas de concentrações das usinas sucro-alcooleiras reflete em uma maior aplicabilidade ao mesmo.

5.2 Conclusões Análises II

Na tese apresentada por De Rijke (2007) foi observado que o filme de condensado que se formava pelos painéis permanecia laminar/laminar-ondulatório. O intuito dessa seção era de se utilizar as correlações e regimes de escoamento de filmes líquidos verificados no trabalho de De Rijke (2007) e comparar os valores de gastos energéticos com os valores de gastos observados em Análises I.

Obviamente, a comparação desses resultados diz respeito ao conjunto de resultados obtidos, ou seja, não se está comparando aqui se um conjunto de determinadas correlações apresentaria um maior valor de coeficiente Global com uma maior ou menor quantidade de fluido escoando pelos painéis (uma vez que a quantidade influencia diretamente no valor do coeficiente de película). O intuito principal foi o de verificar o quanto as mudanças das condições de escoamento de filmes, e das correlações para o cálculo do coeficiente global (U) influenciou nos resultados finais de gastos energéticos na coluna. Observou-se que essas mudanças mudaram significativamente os resultados finais de gastos energéticos assim como foi observado na Figura 4.21.

Em respeito ao comportamento das variáveis da coluna e a convergência dos resultados, estes se apresentaram iguais às conclusões obtidas em Análise I. Elas foram poupadas no intuito de se evitar repetições.

Comparativamente, valores maiores de coeficiente global de troca de calor foram encontrados nessa seção dos resultados, o que, ocasionou, em uma maior troca nominal e conseqüente diminuição da energia gasta. Utilizou-se um valor constante de coeficiente global e se compararam os gastos energéticos deste com relação aos outros resultados de Análises I e II para a CDIIC com 30 estágios e com painéis de troca de calor. Em geral, os gastos energéticos com coeficiente global constante se apresentaram entre os gastos obtidos em Análises I e II, o que leva a conclusão de que o valor constante escolhido gerou resultados parecidos aos quais se tem um embasamento teórico (Análises I e II).

5.3 Conclusões Análise III

Com o intuito de comparação de gastos energéticos entre os acoplamentos térmicos possíveis na CDIIC, de acordo com a separação das seções promovida pelo estágio de alimentação, procederam-se simulações com uma concentração de entrada elevada (50% em massa). A comparação foi efetuada para uma coluna com 40 estágios teóricos.

Resultados mostraram que a CDIIC_total apresenta uma maior recuperação de energia, ou seja, gasta-se menos energia para promover a produção de álcool hidratado (AEHC) em uma CDIIC com seções (retificação e esgotamento) de mesmo tamanho dentre as demais configurações possíveis (CDIIC_topo, CDIIC_fundo). Isso mostra definitivamente que a promoção de uma maior área de troca de calor é primordial na obtenção de resultados satisfatórios para a CDIIC.

5.4 Conclusões gerais e trabalhos futuros:

Em geral projetos em colunas de destilação com integração interna de calor são muito complexos, por não se ter tal coluna no simulador uma aproximação genérica da coluna é realizada. A simulação da CDIIC demanda muito tempo para sua realização, pois a simulação de tal coluna torna-se um processo iterativo, esse fato levou a utilização de outro software tal como o Excel[®] para se proceder a simulação.

O método para a simulação utilizando correlações para o cálculo de coeficientes de película é inovador uma vez que as simulações na literatura utilizam valores constantes para os coeficientes globais de troca de calor (provenientes de aproximações de valores experimentais para hidrocarbonetos como um valor fixo em toda coluna). Isso prove ao presente estudo uma maior contribuição científica. A despeito da inovação existe um

respaldo de grandes autores na formulação da metodologia utilizada tais como Olujic et al. (2008), Gadalla (2009), Suphanit (2010) e Hugill (2005).

De maneira geral o projeto apresentou também inovações no que diz respeito à mistura binária estudada na CDIIC. Valores satisfatórios foram encontrados para a mistura, somando-se ao estudo de caso que trata da situação real da destilação da mistura etanol-água até ao produto final (AEHC).

É claro que muito ainda deve ser explorado no âmbito deste estudo. Seguem abaixo algumas proposições para trabalhos futuros bem como a justificativa de cada uma delas:

- **Introdução de rotinas em Fortran no simulador:** Os cálculos iterativos se fazem necessários para qualquer simulação da CDIIC, uma vez que, procedendo-se uma troca de calor entre os estágios o perfil de vapor e líquido dentro da coluna muda. A utilização do software Excel[®] em conjunto com o Aspen Plus[®] resolveu o problema da necessidade de iterações, porém demandou muito tempo para sua realização. Assim, a introdução de uma rotina cálculo no simulador tornaria o trabalho mais rápido possibilitando um número maior de ensaios de simulação em um menor espaço de tempo.
- **Planejamento experimental:** No presente estudo somente se utilizou a diferença de pressão entre a retificação e o esgotamento como variável do processo, foram fixadas as concentrações de topo e de fundo para comparação entre as colunas **convencional** e CDIIC. A investigação de outras variáveis, tal como um maior enriquecimento do produto de topo na CDIIC, podem ser corretamente realizadas em conjunto com o aumento da pressão no compressor com um planejamento de experimentos adequado.
- **Aquisição de uma Coluna piloto pela Universidade:** No trabalhou-se de forma teórica com o cálculo de algumas variáveis como o coeficiente global de troca de calor (através de correlações) e cálculo da área. Alguns parâmetros foram simplificados devido à inabilidade de tratar de alguns assuntos que pertencem à esfera experimental tais como: quantidade de líquido e vapor em contato com os painéis e uma modelagem matemática mais rigorosa da coluna. Com uma coluna

experimental tais problemas poderiam ser sanados e muitos outros estudos em torno da coluna poderiam ser realizados.

- **Análise Econômica:** Uma análise de custos e de retorno de investimentos para produção da CDIIC em escala industrial no país se faz necessária para se conhecer o quanto pode ser salvo em dinheiro no investimento de tal coluna e não somente em questão de gastos energéticos.

6. REFERÊNCIAS:

ABRAMS, D. S.; PRAUSNITZ, J. M. Statistical thermodynamics of liquid mixtures: A new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible substances. *AIChE Journal*, v. 21, p. 116-128, 1975.

ALHUSSEINI, A. A. **Heat and mass transfer in falling film evaporation of viscous liquids**, 1994. 192 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química), Lehigh University, Bethlehem, 1995.

ALHUSSEINI, A. A.; TUZLA, K.; CHEN, C. J. Falling Film Evaporation of Single Component Liquids. *Int. J. of Heat and Mass Trans*, v. 41, p. 1623-1632, 1997.

AL-SIBAI, F. **Experimentelle Untersuchung der Strömungscharakteristik und des Wärmeübergangs bei welligen Rieselfilmen**. 2005. 99 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química), Aachen University, Aachen, 2004.

ASO, K.; TAKAMATSU, T.; NAKAIWA, M. Heat Integrated Distillation Column, U.S. Patent 5.873.047, 1998.

ASPEN PLUS[®], version 13, Manual Técnico, 2004.

BARROS, A. A. C. **Desenvolvimento de estágio de não equilíbrio e proposição de correlação de eficiência para o processo de destilação convencional e extrativa**. 1997. 226 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1997.

BEJAN, A. *Heat Transfer*. New York: Wiley Inc., 1993. p. 403-412.

BROWN, D. **Simulations of equal thermodynamic distance distillation columns for regular solutions**. San Diego State University, San Diego, 1998. Tese (Doutorado).

CAMBELL, J. C.; WIGAL, K. R.; VAN BRUNT, V.; KLINE, R. S. Comparison of Energy Usage for the Vacuum Separation of Acetic Acid/Acetic Anhydride Using an

Internally Heat Integrated Distillation Column (HIDiC). *Separation Science and Technology*, v. 43, p. 2269 - 2297, 2008.

CHEN, S. L.; GERNER, F. M.; TIEN, C. L. General film condensation. *Experimental Heat Transfer*, v.1, p. 93-107, 1987.

CHUN, K. R.; SEBAN, R. A. Heat transfer to evaporating liquid films. *Journal of Heat Transfer*, v. 93, p. 391-396, 1971.

CHUN, M. H.; KIM, K. T. Assessment of the new and existing correlations for laminar and turbulent film condensations on a vertical surface. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, v. 17, p. 431-434, 1990.

DAWOUND, D.; ARISTOV, Y.; GLAZNEV, I.; ELYAS, A. A new methodology of studying the dynamics of water adsorption/desorption under real operating conditions of adsorption heat pumps: experiment. *Int J Heat Mass Transfer*. v. 51, p. 4966-4972, 2007.

DE GRAAUW, J.; STEENBAKKER, M. J., DE RIJKE, A., OLUJIC, Z. and JANSSENS, P. J. *Distillation column with heat integration*, Patent Application EP1476235, 2004.

DE KOEIJER, G.; KJELSTRUP, S. Minimizing entropy production rate in binary tray Diabatic distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.* v.41, p. 5826-5834, 2002.

DE RIJKE, A. **Development of a concentric internally heat integrated distillation column**. 2007. 191 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Universidade Tecnológica de Delft, Holanda, 2007.

DIAS, M. O. S. **Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço visando à integração do processo e maximização da produção de energia e excedentes do bagaço**. 237 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.

DOMINGUES, T. L. **Avaliação da eficiência de pratos valvulados com downcomer e pratos dualflow em colunas de destilação industriais**. 170 p. Dissertação (Mestrado em

Engenharia Química)- Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2005.

DUARTE, L. J.; D'ALMEIDA, N. F. S. Análise da Região de Operação dos Pratos Perfurados e Valvulados em Colunas de Destilação. **4º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás**, 2007.

ENGELIEN, K.; SKOGESTAD, S. Selecting appropriate control variables for a heat integrated distillation system with prefractionator. *Comput Chem Eng.*, v. 28, p. 683–691, 2004.

FAIR, J. R. How to Predict Sieve Tray Entrainment and Flooding, *Petro/Chem. Eng.*, v. 33(10), p. 45, 1961.

FITZMORRIS, R., E.; MAH, R. S. H. Improving Distillation Column Design using Thermodynamic Availability Analysis. *J. AIChE*, v. 26, p. 265-273, 1980.

FLOWER, J. R.; JACKSON, M. A. Energy Requirements in the Separation of Mixtures by Distillation. *Trans Inst Chem. Eng.*, v.42, p. 249-258, 1964.

FRESHWATER, D. The Heat Pump in Multicomponent Distillation. *Brit. Chem. Eng.*, v. 6, p. 388-391, 1961.

GADALLA, M.; DE RIJKE, A.; OLUJIC, Z.; JANSSENS, P., J. A Thermo-Hydraulic Approach to Conceptual Design of an Internally Heat Integrated Distillation Column (HIDiC), *18º European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, 2004.

GADALLA, M.; OLUJIC, Z.; DE RIJKE, A.; JANSSENS, P. J. A Pinch Analysis based approach to the design of internally heat integrated tray distillation columns, *TransIChemE*, Part A, *Chem. Eng. Res. Des.*, v. 83 (A8), p. 987-993, 2005.

GADALLA, M.; OLUJIC, Z.; DE RIJKE, A.; JANSSENS, P. J. A Reducing CO₂ emissions of internally heat-integrated distillation columns for separation of close boiling mixtures, *Energy*, v. 31, p. 2409-2417, 2006.

GADALLA, M.; JIMENEZ, L.; OLUJIC, Z.; JANSSENS, P. J. A thermo-hydraulic approach to conceptual design of an internally heat-integrated distillation column (i-HIDiC). *Comp. Chem. Eng.*, v. 31, p. 1346-1354, 2007.

GADALLA, M. Internal heat integrated distillation columns (i-hidics)–New systematic design methodology. *Chem. Eng. Res. Des.*, v.87, p. 1658-1666, 2009.

GARCIA, J. A. **Fundamental Model for the prediction of Distillation on Sieve Tray Efficiency: Hydrocarbon and Aqueous SYSTEM.** Tese (Doutorado em Engenharia Química)- Universidade do Texas, United States, Austin, 1991.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. A Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency. 1. Database Development. *Ind. Eng. Chem. Res.* v. 39, p. 1809-1817, 2000.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. A Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency. 2. Model Development and Validation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, p. 1818-1825, 2000.

GLENCHUR, T. and GOVIND, R. Study on a continuous Heat Integrated Distillation Column. *Separation Science and Technology*, v. **22**(12), p. 2323-2338, 1987.

GPROMS APPLICATIONS. Disponível em : <http://www.psenterprise.com/gproms/applications/separation/hidic.html>). Acessado em 19/10/2010.

GUTIÉRREZN, A.; RUIZ, J.; HERNÁNDEZ, J. Assessment of the Implementation of Heat-Integrated Distillation Columns for Separation of Ternary Mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 50, p.2176-2181, 2011.

HASELDEN, G., G. *Distillation Processes and Apparatus*, U.S. Patent 4,025,398, 1977.

HOLLAND, C. D.; LIAPIS, A. I.; *Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems*. New York: McGraw-Hill Inc., 1983. 1–34 p.

HOURICHI, K.; YANAGIMOTO, K.; KATAOKA, K.; NAKAIWA, M. Energy-saving characteristics of Heat Integrated Distillation Column technology applied to multi-component petroleum distillation, *IchemE. Symposium Series*, v. 152, p. 172-180, 2006.

HUGILL, J. A., and VAN DORST, E. M. Design of a Heat Integrated Distillation Column based on a Plate Fin Heat Exchanger, Sustainable (Bio)Chemical Process Technology, *6th International Conference on Process Intensification*, 2005.

HUMPHREY, J. L., SEIBERT, A. F., KOORT, R. A., Separation technologies advances and priorities, Final Report for US Department of Energy, Office of Industrial Technologist, Washington DC, DE91-010 1991.

HUMPHREY, J. L.; SIEBERT, A. F. Separation technologies: An opportunity for energy savings. *Chem Eng. Prog.*, v. 88, p.32-41, 1992.

IWAKABE, K.; NAKAIWA, M.; HUNAG, K.; NAKANISHI, T.; ROSJORDE, A.; OHMORI, T. Energy saving in multicomponent separation using an internally heat-integrated distillation column (HIDiC). *Appl. Therm. Eng.*, v. 26, p. 1362-1370, 2006.

JANA, K. A. Heat integrated distillation operation. *Applied Energy*. v. 87, p.1477-1494, 2010.

JANSENS, P. D. (Coord.); OLUJIC, Z. Development of a Heat Integrated Distillation Column (HIDiC). *E.E.T. PROJECT EETK01025 Final Report*, 2006. 28 p.

JUNQUEIRA, T. L. **Simulação de colunas de destilação convencional, extrativa e azeotrópica no processo de produção de bioetanol através da modelagem de não equilíbrio e da modelagem de estágios de equilíbrio com eficiência.** 196 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas. Campinas, 2010.

KANO, M.; FUKUSHIMA, T.; MAKITA, H.; HASEBE, S. Multiple steady-states in a heat integrated distillation column (HIDiC). *J. Chem Eng Jpn*, v.40, p. 824–831, 2007.

KAPITZA, P. L. ; KAPTIZA, S. P. *Wave flow in thin layers of a viscous fluid. In: ter HaarD, editor. Collected Papers of P.L. Kapitza.* New York: The Macmillan Company, 1964. 662 p.

KARABELAS, A. J.; PARAS, S. V.; DROSOS, E. I. P. Characteristics of developing free falling films at intermediate Reynolds and high Kapitza numbers. *International Journal of multiphase Flow*, v. 20(6-7), p.853-876, 2003.

KEASER M. and PRITCHARD, C. L. Heat Transfer at the surface of sieve Trays. *Trans IChemE*, part A8 v. 83, p.1038-1043, 2005.

KING, C., J. *Separation Processes*. New York: McGraw-Hill Inc.,1980. 140-145 p.

KISTER, H. Z. *Distillation Design*. New York: McGraw-Hill Inc., 1992. 710 p.

KRISHNAMURTHY, R.; TAYLOR, R. A Nonequilibrium Stage Model of Multicomponent Separation Process – Part I: Model Description and Method of Solution. *AIChE Journal*, v. 31, p. 449-456, 1985.

KRUPICZKA, R.; ROTKEGEL, A.; ZIOBROSWKI, Z. Heat transfer to evaporating liquid films within a vertical tube. *Chm.l Eng. and Process.*, v. 41, p. 23-28, 2002.

KUTATELADZE, S.S. *Fundamentals of Heat-Transfer*. London: Academic Press and Arnold (Publishers) Ltd., 1963. 303-308 p.

LANG, L. Dynamic Behaviour and Operational Aspects of Heat-Integrated Distillation Processes. *Chem. Eng. Technol.*, v. 19, p. 498-506, 1996.

LE GOFF, P.; CACHOT, T.; RIVERO R. Exergy analysis of distillation processes. *ChemEng Technol*, v. 19, p.478–85, 1996.

LEE, L. S. **Estimation of theoretical stages of Heat Integrated Distillation column (HIDiC)**. 2007. 74 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) (Chemical and Materials Engineering), 2007.

LEWIS, W. K. Rectification of Binary mistures *Jr. Ind. Eng. Chem.*, v.28, p. 399, 1936.

LINNHOFF, B. Pinch Analysis: A State of the Art Review. *Trans. I Chem E.*, v. 71, p.503-515, 1993.

LIU, X. G.; QIAN, J. X.; Modeling, Control, and Optimization of Ideal Internal Thermally Coupled Distillation Columns. *Chem Eng Technol*, v. 23 (3), p. 235-241, 2000.

LOCKETT, M. J. *Distillation Tray Fundamentals*. Cambridge: Cambridge University Press, 1986. 226 p.

MACFARLAND, S. A.; SIGMUND, P. M.; VAN WILKE, M. Predict Distillation Efficiency. *Hydro. Proc.*, v. 51, p.111-114, 1972.

MAH, R.S.; NICHOLAS, J. J.; WODNIK, R. B.; Distillation with Secondary Reflux and Vaporization, a comparative evaluation, *AIChE Journal*, v.23, p. 651-658, 1977.

MEIRELLES, A. J. A. Expansão da produção de bioetanol e melhoria tecnológica da destilação alcoólica. In: FAPESP. Workshop do Projeto Diretrizes de Políticas Públicas para a Agroindústria Canavieira do Estado de São Paulo: Produção de etanol. Lorena, 2006. Disponível em <http://www.apta.sp.gov.br/cana/> . Acesso em dezembro de 2006.

NAITO, K.; NAKAIWA, M.; HUANG, K.; ENDO, A.; ASO, T.; NAKANISHI, T.; NAKAMURA, T.; NODA, H.; TAKAMATSU T. Operation of a bench-scale HIDiC: an experimental study. *Comp. and Chem. Eng.*, v. 24, p. 495-99, 2000.

NAKAIWA, M.; HUANG, K.; NAITO, K.; ENDO, A.; AKIYA, T.; NAKANE, T.; TAKAMATSU, T. Parameter analysis and optimization of ideal heat integrated distillation columns, *Comp. and Chem. Eng.*, v. **25**, p. 737-744, 2001.

NAKAIWA, M.; HUANG, K.; ENDO, A.; OHMORI T.; AKIYA, T.; TAKAMATSU T. Internally heat-integrated distillation columns: A review. *Trans IChemE*, v. 81: part A, p.162-175, 2003.

NAKAIWA, M.; HUANG, K.; NAITO, K.; ENDO, A.; OWA, M.; AKIYA, T.; NAKANE, T.; TAKAMATSU, T. A new configuration of ideal heat integrated distillation columns (HIDiC). *Comp. and Chem. Eng.*, v. 24, p. 239-245, 2000.

NAKAIWA, M.; HUANG, K.; OWA, M.; AKIYA, T.; NAKANE, T.; SATO, M.; TAKAMATSU, T. Energy savings in heat-integrated distillation columns. *Energy*, v. 22, p. 621–625, 1997.

NAKANISHI, T.; ADACHI, N.; NISHIDA, N.; IWAKABE, K.; HOURICHI, K.; NAKAIWA, M. Basic design of a double-pipe unit type internally heat integrated distillation column (HIDiC). The 2008 Annual Meeting Philadelphia, Pennsylvania, Estados Unidos. Disponível em: <http://www.nt.ntnu.no/users/skoge/prost/proceedings/aiche2008/data/S5389.HM>. Acesso em janeiro de 2011.

NUSSELT, W. Die Kondensation des Wasserdampfes. *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure*, v. 60 (27), p.541–546, 1916.

OLUJIC, Z.; SUN, L.; GADALLA, M.; RIJKE, A.; JANSENS, P. J. Enhancing Thermodynamic Efficiency of Energy Intensive Distillation Columns via Internal Heat Integration. *Chem. Biochem. Eng. Q.*, v. 22, p. 383–392, 2008.

PADILLA, A.; RODRIGUEZ, G. Application of absorption heat pumps to multi-effect distillation: a case study of solar desalination. *Desalination*, v. 212, p. 294–302, 2007.

PERRY, R.; CHILTON, C. H. *Manual de Engenharia Química*. Rio de Janeiro, Ed. Guanabara Dois, UFRJ, 5^a ed 1980.

PRADO, M. the bubble-to-spray transition on sieve trays: mechanisms of the phase inversion. Austin: The University of Texas at Austin, 1986. Tese (Doutorado em Engenharia Química), The University of Texas as Austin, 1986.

PRADO, M.; FAIR, J. R. Fundamental Model for the Prediction of Sieve Tray Efficiency. *Ind. Eng. Chem.*, v. 29, p.1031-42, 1990.

RIVERO, R. **L'analyse d'exergie: Application a la distillation et aux pompes a chaleur a absorption.** 680 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química)- Instituto National Polytechnique de Lorraine, Nancy, France, 1993.

SALAMON, P., NULTON, J. The geometry of separation processes: a horse–carrot theorem for steady flow systems. *Europhys Lett*, v. 42, p. 571–576, 1998.

SANDALL, O. C.; HANNA, O. T., IBANEX, G. R. Heating and evaporation of turbulent falling liquid film. *AIChE Journal*, v. 34, p. 502-505, 1988.

SCHALLER, M. **Numerically optimized diabatic distillation columns**. 86 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química)- Technische Universitat Chemnitz, Fakultat fur, Naturwissenschaften, 2007.

SEADER, J. D. Continuous distillation apparatus and method. US Patent, 4.234.391, 1978/1980.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. *Introduction to Chemical engineering Thermodynamics*. New York: McGraw – Hill Inc., 7^a ed., 2005. 626 p.

SMITH, R. *Chemical Process Design*. New York: McGraw-Hill Inc., 1995. 460 p.

SOUDERS, M. and BROWN, G. G. Design of fractionating columns, I: Entrainment and capacity. *Ind. Eng. Chem.*, v. 26, p. 98-103, 1934.

SUN, L.; OLUJIC, Z.; DE RIJKE, A.; JANSSENS, P. J. Industrially viable configuration for a heat integrated distillation column. The 5th international Conference on Process Intensification for the Chemical Industry, 2003.

SUPHANIT, B. Design of internally heat-integrated distillation column (Hidic): Uniform heat transfer area versus uniform heat distribution. *Energy*, v. 35, p.1505-1514, 2010.

TAILBY, S., R., PORTALSKY, S. Wave inception on a liquid film flowing down a hydrodynamically smooth plate. *Chem. Eng. Sci.*, v. 17, p. 283–290, 1962.

TAKAMATSU, T.; NAKAIWA, M.; NAKANISHI, T. A Numerical Consideration on Dynamic Modeling and Control of Ideal Heat Integrated Distillation Columns *Journal of Chemical Engineering Japan*, v. **29**, p. 344-351, 1996.

TSUN-JEN HO. Design and Modeling Studies of Internally Heat-Integrated Distillation Column. Department of Chemical and Material Engineering, National Central University, Japão 2010. Tese (Doutorado).

VASCONCELOS, C. J. G. **Simulação, otimização e controle de processos para a separação de misturas não ideais.** 184 p. Dissertação de (Mestrado) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1999.

VDI-WARMEATLAS. Berechnungsblätter für den Wärmeübergang, 7th., erw Aufl. Verein Deutscher Ingenieure, VDI Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen (GVC). VDI Verlag GmbH, Düsseldorf, Germany, 1994.

WEISE, F., SCHOLL, S. Evaporation of pure liquids with increased viscosity in a falling film evaporator. *Heat Mass and Transfer*, v. 47, p. 1037-1046, 2007.

WILKE, W. Waermeübergang na Riesefilme, Ver. Deut.Ingrs. Forschungsh, 1962.

YASHIMOTO H., WATANABE T., SONG K., OTA Y., HAMAGUCHI T., MORI H.
Heat transfer analysis of tray-type HIDIC, Nagoya institute of Technology JAPAN
Presentation Disponível em:
<http://www.wcce8.org/repository/posters/energy/hashimoto/hidicposter.pdf>. Acessado em
13/11/2010.

APENDICE A. Validação do Modelo Termodinâmico

Em se tratando de misturas altamente polares, as não idealidades da fase líquida se apresentam mais pronunciadas. Como na CDIIC trabalha-se com pressões maiores que uma atmosfera, é interessante proceder de tal forma que na abordagem se retrate as não idealidades da fase líquida e também da fase vapor.

Com o intuito de avaliar a acurácia dos modelos termodinâmicos presentes no banco de dados do simulador Aspen Plus[®], foram pesquisados na literatura dados experimentais de equilíbrio para o binário (etanol-água) em diferentes pressões (acima de 760 mmHg). Em seguida, estes dados foram comparados com os resultados fornecidos pelo simulador utilizando os modelos de coeficientes de atividade UNIQUAC (*Universal Quasi-Chemical*) e NRTL (*Non-Random Two Liquid*); também foi feita a respectiva associação de cada um deles com o modelo de fugacidade representado pela equação de estado de Redlich-Kwong (1949).

A seguir, serão apresentados valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) e valores dos modelos termodinâmicos obtidos pelo simulador Aspen plus[®] a diferentes pressões. A comparação dos valores dos modelos com os valores experimentais foi feita através de dados das composições do líquido e do vapor do etanol variando-se a temperatura. O modelo cujo valor se obteve menor desvio dos valores experimentais (em todas as diferentes pressões) foi à associação do modelo de UNIQUAC com o modelo da RK (Redlich-Kwong).

A escolha do melhor modelo foi atribuída àquele que apresentou o menor desvio quadrático tomando-se como base os valores experimentais. Abaixo seguem as figuras e Tabelas de A.1-4 respectivas aos ajuste de modelos termodinâmicos aos valores experimentais a diferentes pressões.

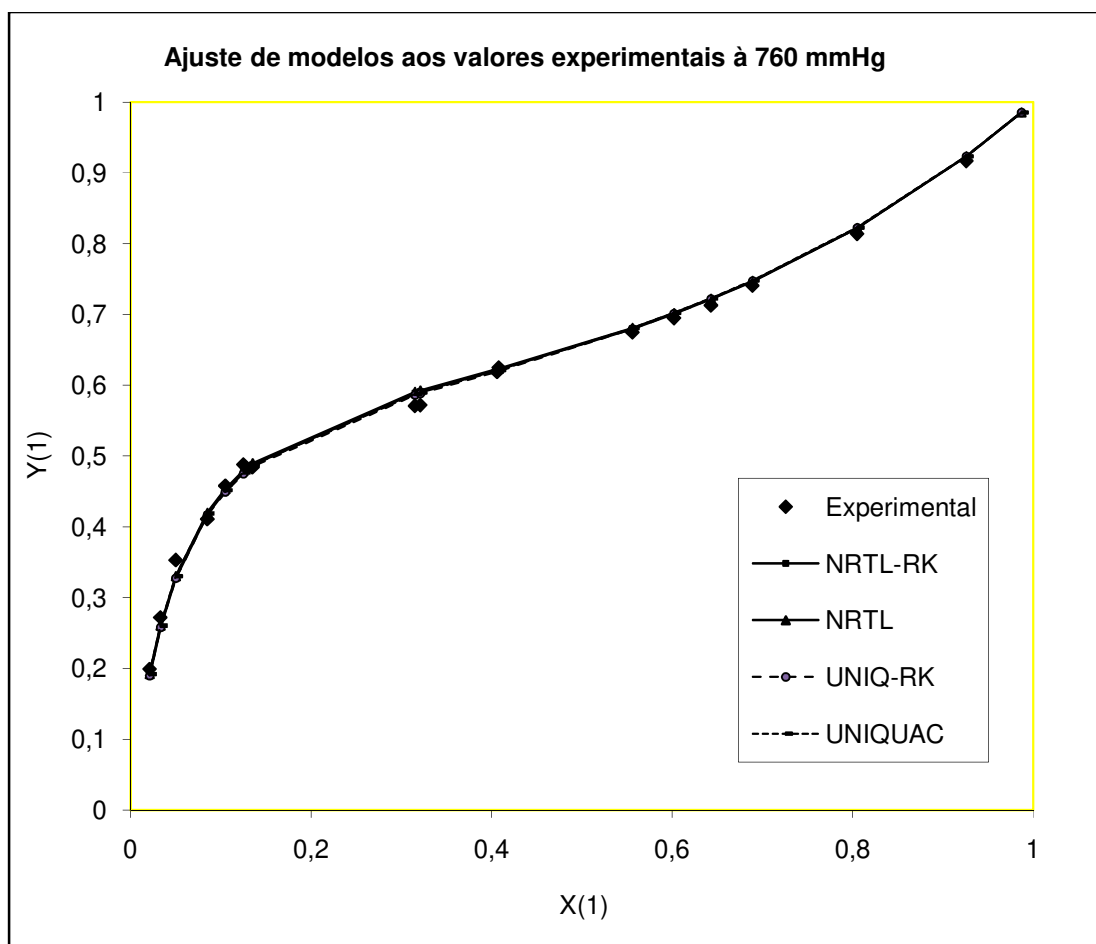


Figura A.1. Diagrama x-y do sistema etanol-água a 760 mmHg: comparação entre dados experimentais e calculados pelo simulador.

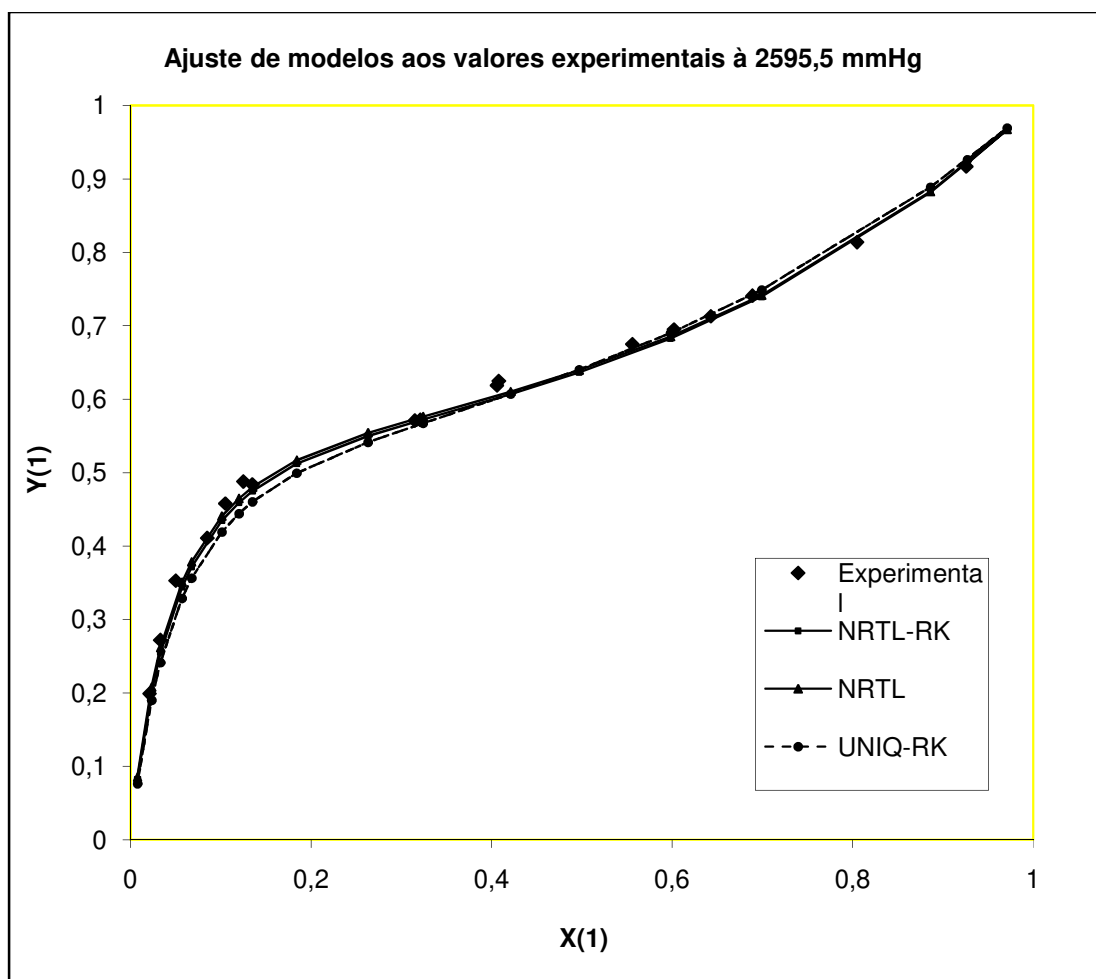


Figura A.2. Diagrama x-y do sistema etanol-água a 2595,5 mmHg: comparação entre dados experimentais e calculados pelo simulador.

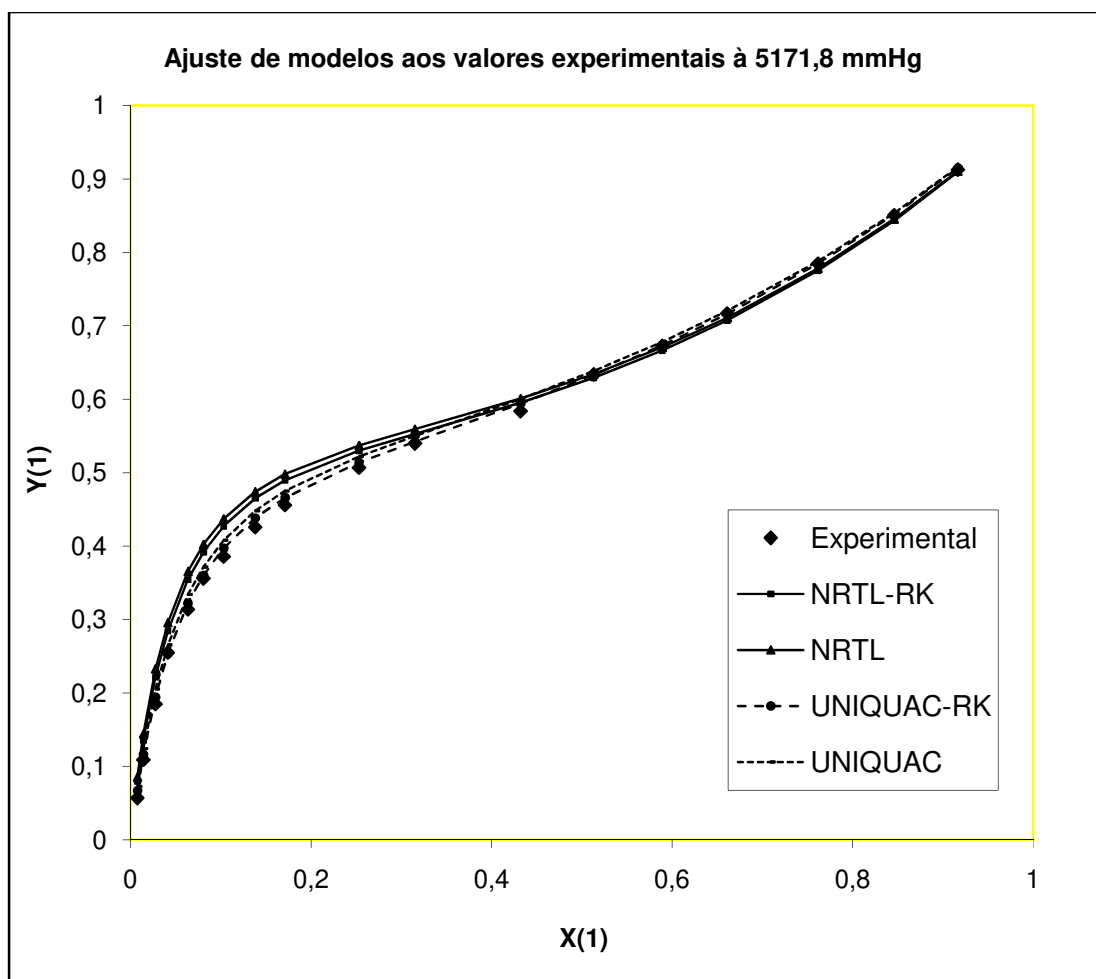


Figura A.3. Ajuste de modelos termodinâmicos aos valores experimentais à 5171,8 mmHg

Tabela A. 1. Valores dos modelos obtidos pelo simulador e valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) à pressão de 760 mmHg.

UNIQUEAC		UNIQ-RK		NRTL		NRTL-RK		Experimental			
x1	Y1	x1	y1	x1	y1	x1	y1	X1	y1	T (°C)	P (mmHg)
0,021	0,192	0,021	0,190	0,021	0,192	0,021	0,189	0,021	0,199	94,300	760,000
0,033	0,261	0,033	0,258	0,033	0,260	0,033	0,257	0,033	0,272	91,900	760,000
0,050	0,330	0,050	0,327	0,050	0,330	0,050	0,327	0,050	0,353	90,000	760,000
0,085	0,419	0,085	0,417	0,085	0,420	0,085	0,417	0,085	0,411	87,300	760,000
0,105	0,452	0,105	0,449	0,105	0,453	0,105	0,451	0,105	0,458	86,100	760,000
0,125	0,477	0,125	0,475	0,125	0,479	0,125	0,477	0,125	0,488	85,200	760,000
0,135	0,488	0,135	0,486	0,135	0,490	0,135	0,488	0,135	0,484	84,700	760,000
0,315	0,588	0,315	0,586	0,315	0,591	0,315	0,589	0,315	0,571	81,800	760,000
0,321	0,590	0,321	0,589	0,321	0,593	0,321	0,591	0,321	0,572	81,600	760,000
0,406	0,621	0,406	0,620	0,406	0,623	0,406	0,621	0,406	0,619	80,600	760,000
0,408	0,622	0,408	0,620	0,408	0,624	0,408	0,622	0,408	0,625	80,200	760,000
0,556	0,681	0,556	0,680	0,556	0,681	0,556	0,680	0,556	0,675	79,500	760,000
0,602	0,702	0,602	0,701	0,602	0,702	0,602	0,701	0,602	0,695	79,200	760,000
0,643	0,723	0,643	0,722	0,643	0,723	0,643	0,722	0,643	0,713	79,100	760,000
0,689	0,748	0,689	0,747	0,689	0,748	0,689	0,747	0,689	0,741	78,600	760,000
0,805	0,823	0,805	0,823	0,805	0,823	0,805	0,822	0,805	0,814	78,300	760,000
0,926	0,924	0,926	0,923	0,926	0,923	0,926	0,923	0,926	0,917	78,300	760,000
0,987	0,986	0,987	0,986	0,987	0,986	0,987	0,986	0,987	0,985	78,200	760,000

Tabela A.2. Valores dos modelos obtidos pelo simulador e valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) à pressão de 2595,5 mmHg.

NRTL		UNIQU-RK		NRTL-RK		UNIQUAC		experimental			
X1	Y1	X1	Y1	X1	Y1	X1	Y1	X1	Y1	T (°C)	P (mmHg)
0,008	0,090	0,008	0,076	0,008	0,086	0,008	0,080	0,008	0,072	135,500	2595,500
0,023	0,206	0,023	0,182	0,023	0,200	0,023	0,188	0,023	0,195	131,100	2595,500
0,033	0,261	0,033	0,234	0,033	0,254	0,033	0,241	0,033	0,265	128,700	2595,500
0,057	0,351	0,057	0,321	0,057	0,344	0,057	0,329	0,057	0,321	126,100	2595,500
0,068	0,380	0,068	0,350	0,068	0,373	0,068	0,357	0,068	0,338	125,400	2595,500
0,101	0,441	0,101	0,413	0,101	0,435	0,101	0,419	0,101	0,411	122,500	2595,500
0,120	0,465	0,120	0,438	0,120	0,459	0,120	0,444	0,120	0,433	121,300	2595,500
0,135	0,480	0,135	0,454	0,135	0,475	0,135	0,460	0,135	0,454	120,400	2595,500
0,184	0,517	0,184	0,494	0,184	0,512	0,184	0,499	0,184	0,492	119,400	2595,500
0,263	0,554	0,263	0,537	0,263	0,550	0,263	0,541	0,263	0,536	117,100	2595,500
0,324	0,577	0,324	0,563	0,324	0,573	0,324	0,567	0,324	0,566	116,300	2595,500
0,421	0,610	0,421	0,603	0,421	0,607	0,421	0,607	0,421	0,604	115,300	2595,500
0,497	0,640	0,497	0,637	0,497	0,637	0,497	0,640	0,497	0,638	114,600	2595,500
0,598	0,685	0,598	0,687	0,598	0,683	0,598	0,690	0,598	0,684	113,900	2595,500
0,699	0,742	0,699	0,747	0,699	0,740	0,699	0,749	0,699	0,739	113,300	2595,500
0,805	0,815	0,805	0,821	0,805	0,814	0,805	0,822	0,805	0,820	112,800	2595,500
0,871	0,869	0,871	0,875	0,871	0,868	0,871	0,876	0,871	0,873	112,600	2595,500
0,927	0,922	0,927	0,925	0,927	0,921	0,927	0,926	0,927	0,924	112,600	2595,500

Tabela A.3. Valores dos modelos obtidos pelo simulador e valores experimentais obtidos de HIRATA et al. (1975) à pressão de 5171,8 mmHg.

UNIQUEAC		UNIQ-RK		NRTL		NRTL-RK		experimental			
x1	Y1	x1	y1	x1	y1	x1	y1	X1	Y1	T (°C)	P (mmHg)
0,008	0,072	0,008	0,067	0,008	0,086	0,008	0,080	0,008	0,057	162,100	5171,800
0,014	0,124	0,014	0,116	0,014	0,144	0,014	0,136	0,014	0,109	160,400	5171,800
0,028	0,205	0,028	0,194	0,028	0,233	0,028	0,222	0,028	0,185	157,000	5171,800
0,041	0,266	0,041	0,254	0,041	0,296	0,041	0,284	0,041	0,255	154,000	5171,800
0,064	0,334	0,064	0,322	0,064	0,366	0,064	0,354	0,064	0,314	151,400	5171,800
0,081	0,372	0,081	0,360	0,081	0,402	0,081	0,392	0,081	0,356	149,500	5171,800
0,103	0,408	0,103	0,397	0,103	0,437	0,103	0,427	0,103	0,386	147,800	5171,800
0,138	0,448	0,138	0,438	0,138	0,474	0,138	0,465	0,138	0,426	146,800	5171,800
0,171	0,475	0,171	0,466	0,171	0,498	0,171	0,490	0,171	0,456	144,800	5171,800
0,253	0,522	0,253	0,514	0,253	0,537	0,253	0,530	0,253	0,507	142,700	5171,800
0,315	0,550	0,315	0,543	0,315	0,559	0,315	0,553	0,315	0,540	141,500	5171,800
0,432	0,600	0,432	0,594	0,432	0,601	0,432	0,595	0,432	0,584	139,900	5171,800
0,513	0,638	0,513	0,633	0,513	0,634	0,513	0,629	0,513	0,634	139,000	5171,800
0,589	0,678	0,589	0,674	0,589	0,671	0,589	0,667	0,589	0,673	138,200	5171,800
0,661	0,720	0,661	0,716	0,661	0,711	0,661	0,708	0,661	0,717	137,500	5171,800
0,762	0,788	0,762	0,785	0,762	0,778	0,762	0,775	0,762	0,785	135,900	5171,800
0,846	0,854	0,846	0,852	0,846	0,846	0,846	0,844	0,846	0,851	135,700	5171,800
0,917	0,916	0,917	0,915	0,917	0,911	0,917	0,910	0,917	0,913	135,700	5171,800

APENDICE B. Procedimento para o cálculo da área dos painéis

Gadalla et al. (2007) fez uma análise geométrica na CDIIC com painéis de troca de calor, para o caso destes serem alocados na seção de esgotamento. Com os diâmetros da coluna calculados pelo diâmetro de inundação e também com alguns valores fixados do painel torna-se viável o cálculo da área proporcionada pelos painéis de troca de calor. As dimensões de um painel são 30 mm de espessura e 30 cm de altura com o comprimento dependendo do espaço radial da coluna. O espaço livre entre o painel e a parede da coluna foi de 5 mm (ε). A área do vertedouro (*dowcomer*) foi especificada como 10% da área de seção transversal da seção de esgotamento. A Figura B.1 abaixo mostra mais detalhes sobre a análise geométrica dos painéis e destes alocados na coluna.

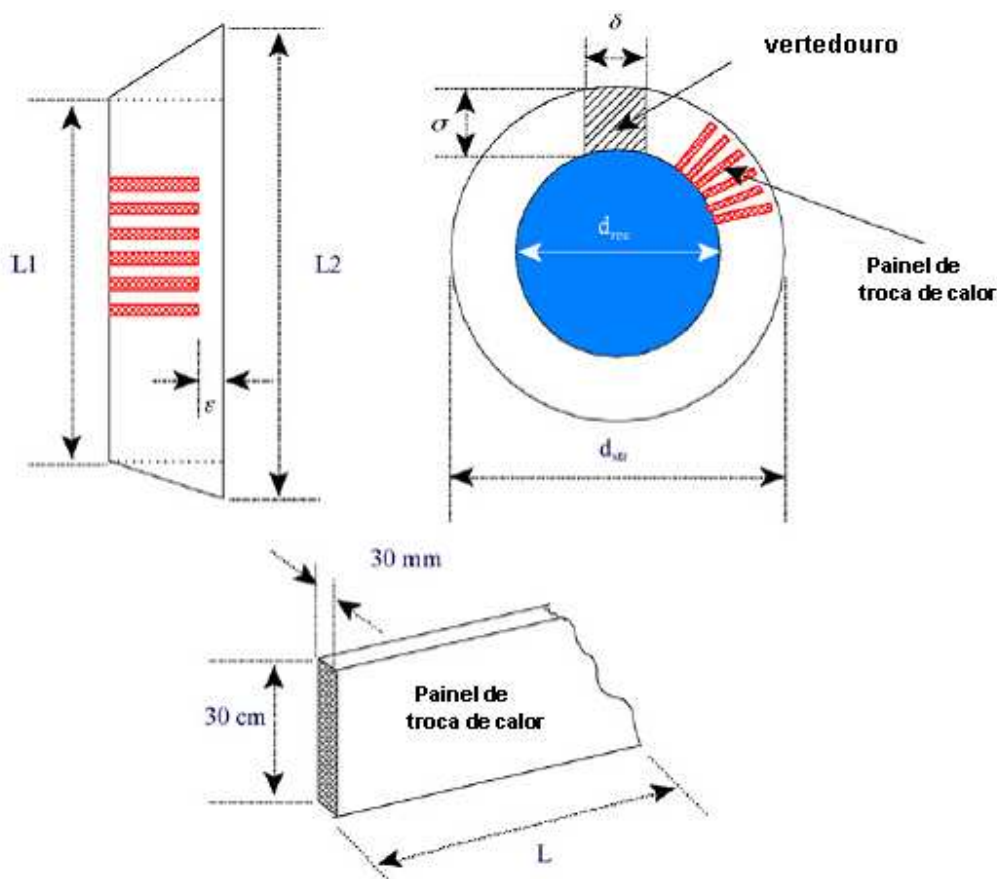


Figura B.1. Análise geométrica da configuração CDIIC com painéis de troca de calor. (Fonte: Adaptado de GADALLA et al., 2007)

As equações B.1-9 que seguem permitem o cálculo da área dos painéis de troca de calor e estas serão utilizadas no desenvolvimento deste estudo.

$$\sigma = \frac{d_{str} - d_{ret}}{2} \quad (B.1)$$

$$A_{D.C.} = 10 - 20\%(A_{STR}) \quad (B.2)$$

$$\sigma = \frac{0,10 \cdot \pi \cdot d_{str}^2}{2 \cdot (d_{str} - d_{ret})} \quad (B.3)$$

$$L = \sigma - \varepsilon \quad (B.4)$$

$$L_1 = \pi \cdot d_{rec} - \delta \quad (B.5)$$

$$L_2 = \pi \cdot d_{str} - \delta \quad (B.6)$$

$$A_{H.P.} = 0,30 \cdot L \quad (B.7)$$

$$N_{H.P.} = \frac{L_1}{0,03} \quad (B.8)$$

$$TA_{H.P.} = N_{H.P.} \cdot A_{H.P.} \quad (B.9)$$

$A_{D.C.}$ = área do vertedouro (m²)

σ = distancia entre as colunas de esgotamento e retificação (m)

d_{str} = diâmetro da seção da coluna de esgotamento (m)

d_{ret} = diâmetro da coluna de retificação (m)

$A_{D.C.}$ = área do vertedouro (m²)

A_{STR} = área do vertedouro (m²)

$A_{H.P.}$ = área do painel de troca de calor (m²)

L = comprimento do painel (m)

L_1 = perímetro da coluna de esgotamento

L_2 = perímetro da coluna de retificação

δ = largura do vertedouro (m)

$N_{H.P.}$ = Número de painéis de troca térmica (m²)

$TA_{H.P.}$ = área total dos painéis de troca de calor (m²)