

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

***SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DO VAPOR
PARA A PRODUÇÃO DE ETANOL***

NAGEL ALVES COSTA

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA

1993

NAGEL ALVES COSTA

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DO VAPOR PARA A
PRODUÇÃO DO ETANOL**

*Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado em
Engenharia Química da Universidade Federal da
Paraíba, em cumprimento às exigências para
obtenção do Grau de Mestre.*

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: OPERAÇÕES E PROCESSOS

ORIENTADOR: Prof.: MICHEL FRANÇOIS FOSSY

CO-ORIENTADOR: Prof.: ROMILDO PEREIRA DE BRITO

Campina Grande - Paraíba



M386s Martins, Maria do Socorro Avelino.
Simulação do processo de destilação com recompressão mecânica de vapor para produção de acetona / Maria do Socorro Avelino Martins. - Campina Grande, 1994.
72 f.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 1994.

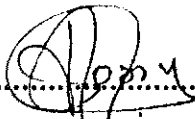
Referências.
"Orientação : Prof. Dr. Michel François Fossy, Prof. M.Sc. Nagel Alves Costa".

1. Acetona. 2. Acetona - Produção. 3. Redução do Consumo Energético. 4. Dissertação - Engenharia Química. I. Fossy, Michel François. II. Costa, Nagel Alves. III. Universidade Federal da Paraíba - Campina Grande (PB). IV. Título

CDU 661.727.4(043)

**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DE VAPOR PARA PRODUÇÃO
DO ETANOL**

DISSERTAÇÃO APROVADA EM13..... /10..... / 1993



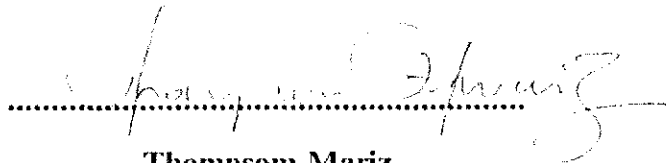
.....
Michel François Fossy

PROFESSOR ORIENTADOR



.....
Kepler Borges França

Examinador



.....
Thompsom Mariz

Examinador

Campina Grande, Outubro de 1993

AGRADECIMENTOS

Aos Professores **Michel François Fossy** e **Romildo Pereira Brito** pela orientação no desenvolvimento deste trabalho.

Aos Professores e alunos do curso de Pós-Graduação em Engenharia Química pela amizade e colaboração, em especial aos Professores **Laercio Gomes de Oliveira**, **Flávio Luiz Honorato da Silva** e **Vimário Simões Silva** pelo incentivo e críticas apresentadas na elaboração do texto.

Ao Professor **Kepler Borges França** coordenador do curso de Pós-Graduação, pelo apoio e amizade.

À Coordenação de Pós-Graduação, nas pessoas de **Maria José Bezerra** e **Maricé Pereira da Silva** pela paciência, compreensão e carinho.

Aos amigos **Romildo dos Santos Silva**, **José Nazareno dos Santos** e **Oswaldo dos Santos Leal** pela amizade sincera e incentivo na elaboração deste trabalho.

Ao CNPq

DEDICATÓRIA

A Deus.

Aos meus pais: Alcino e Peta, pelo carinho, respeito e admiração.

Aos meus irmãos e irmãs: Rangel, Ustâne, Telê, Artime, Artemizio, Arianne, Aymar, Marcial, Athenne, Verena, Calvert e Edna.

À memória de Alcimar, meu querido irmão.

A todos os companheiros que fizeram e ainda fazem parte da minha vida acadêmica.

RESUMO

A destilação consome grande percentagem de energia usada na indústria e consequentemente, uma melhoria da eficiência energética é o caminho para a redução do custo final do produto. A separação do sistema etanol-água é o principal problema na produção do álcool por fermentação; pois a alimentação é diluída, necessitando de grande quantidade de energia para a sua recuperação, até próximo da sua composição azeotrópica, por destilação convencional. O objetivo do presente trabalho é a redução do consumo energético na fase de concentração do etanol. O estudo foi dividido em duas partes: destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor. A primeira parte, simula a unidade convencional, visando estabelecer condições ótimas de operação com o objetivo de reduzir a quantidade de energia necessária ao refeedor. Em seguida, avalia-se a flexibilidade do sistema, em termos de variação da temperatura de alimentação, composições da alimentação e do destilado. A segunda parte, simula dois modelos de destilação com recompressão mecânica do vapor: RMVL e RMVH; o modelo RMVL opera com baixa pressão no vaso de refluxo, ou seja, opera na pressão da coluna, enquanto que o RMVH opera com pressão alta no vaso de refluxo, ou seja, opera na pressão de descarga do compressor. O principal objetivo é avaliar a eficiência, em termos energéticos, desses modelos comparando os resultados com os obtidos para a destilação convencional. Com base nos resultados obtidos o modelo RMVL mostrou-se mais eficiente que o modelo RMVH e também ficou evidenciado a grande economia de energia obtida com a implantação do sistema de recompressão. Como o sistema etanol-água apresenta comportamento não ideal na fase líquida, utilizou-se o modelo UNIFAC para a correção dessa fase.

ABSTRACT

The distillation consumes great percentage of energy used in the industry and consequently, an improvement of the energy efficiency is the way to decrease the final cost of the product. The separation of system ethanol-water is the main problem in the production of the alcohol for fermentation; because the feeding is diluted, needing great amount of energy for its recovery, until close of its azeotrope composition, for conventional distillation. The object of the present work to decrease the energy consumption in the phase of concentration of the ethanol. This study was divided in two parts: conventional distillation and vapor recompression distillation. The first one, simulates the conventional unit, seeking to establish great conditions of operation with the objective of reducing the amount of necessary energy to the reboiler. After that, the flexibility of the system is evaluated, in terms of variation of the feeding temperature, compositions of the feeding and of the distilled. The second part simulates two distillation models with mechanical vapor recompression: RMVL and RMVH; the model RMVL operates with low pressure in to reflux vase, it means that the system works the pressure of the column, while RMVH operates with high pressure in to reflux vase, in means that the pressure of discharge of the compressor. The main objective is to evaluate the efficiency in energy terms of those models and comparing the results with those obtained from the conventional distillation. The results shown that the model RMVL presented better performance than RMVH and also the recompression system shown great economy of energy. As the system ethanol-water presents a behavior of non ideal in the liquid phase, the model UNIFAC was used for the correction of that phase.

SIMBOLOGIA

Símbolo	Definições
A	Constante da Equação de Antoine;
A_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.14);
B	Constante da Equação de Antoine;
B_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.15);
C	Constante da equação de Antoine
C	Número de componentes;
C_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.16);
D_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.17);
$E_{i,j}$	Equação de equilíbrio para o componente i no estágio j;
F	Variância do sistema
F_j	Fluxo molar de alimentação para o estágio j;
\hat{f}_i^L	Fugacidade do componente i na solução líquida;
f_i°	Fugacidade do componente i no estado padrão;
\hat{f}_i^V	Fugacidade do componente i na fase vapor;
H_j	Equação do balanço de energia para o estágio j;
H_{Fj}	Entalpia molar da alimentação do estágio j;
H_{Lj}	Entalpia molar do líquido no estágio j;
H_{Vj}	Entalpia molar do vapor no estágio j;
$k_{i,j}$	Constante de equilíbrio do componente i no estágio j;
L_j	Vazão molar de líquido no estágio j;
Q_j	Quantidade de calor adicionado no estágio j;
$M_{i,j}$	Equação do balanço material para o componente i no estágio j;
n	Parâmetro da Equação (2.70);
N	Número total de estágios
N_c°	Relação de restrição para o estágio de equilíbrio;
N_i°	Variáveis de projeto de um estágio de equilíbrio;
N_v°	Número total de variáveis do estágio equilíbrio;

N_R	Grau de liberdade
N_v^U	Número total de variáveis de projeto da unidade;
P_{Fj}	Pressão de alimentação do estágio j;
P	Pressão do sistema;
p_j	Parâmetro do algoritmo de Thomas, definido pela Equação (2.26)
P_i^{sat}	Pressão de saturação do componente i;
q_j	Parâmetro do algoritmo de Thomas, definido pela Equação (2.26)
q_i	Volume molecular de Van der Waals para o componente i (Equação 2.62);
Q_K	Parâmetro de volume do grupo k do método UNIFAC;
r_i	Área superficial molecular de Van der Waals (Equação 2.61);
R	Constante universal dos gases;
R_D	Fator de incrustação de projeto
R_K	Parâmetros de área do grupo k do método UNIFAC;
RMV	Recompressão mecânica do vapor;
S_{ij}	Equação do somatório das frações molares para o estágio j;
T	Temperatura do sistema;
T_{Fj}	Temperatura de alimentação do estágio j;
U_j	Vazão molar de líquida retirada do estágio j;
V	Volume do sistema
V_i	Volume molar do componente i (Equação 2.52);
V_i^L	Volume molar do componente i na solução líquida;
V_j	Vazão molar de vapor no estágio j;
x_{ij}	Composição molar na fase líquido do componente i no estágio j;
z_{ij}	Composição molar do componente i no estágio j;
z	Número de coordenação (Equação 2.57);
W_e	Trabalho de compressão;
W_{is}	Trabalho isotérmico
W_j	Vazão molar de vapor no estágio j;
W_k	Trabalho adiabático;
W_p	Trabalho politrópico;
W_{real}	Trabalho real;
y_{ij}	Composição molar na fase vapor do componente i no estágio j;

Símbolo Gregos	Definições
α_j	Coefficiente da Equação (2.37);
β_j	Coefficiente da Equação (2.37);
ϕ_i	Fração de volume da molécula i;
$\hat{\phi}_i$	Coefficiente de fugacidade do componente i;
ϕ_i^{sat}	Coefficiente de fugacidade do componente i saturado;
Γ_k	Coefficiente de atividade residual do grupo k na solução
$\Gamma_k^{(i)}$	Coefficiente de atividade do grupo k em uma solução de referência;
γ_j	Coefficiente da Equação (2.37);
γ_i	Coefficiente de atividade do componente i;
γ_i^C	Coefficiente de atividade combinatorial;
γ_i^R	Coefficiente de atividade residual;
η_{is}	Rendimento isotérmico;
η_k	Rendimento adiabático;
η_p	Rendimento Politrópico;
θ_i	Fração de área da molécula i;
τ	Critério de convergência utilizado pela Equação (2.45);
Γ_k	Coefficiente de atividade residual do grupo k na solução
Ψ_{mn}	Parâmetro de interação entre os grupos m e n;

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO	1
2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	3
2.1 Simulação	3
2.1.1 Modelos Matemáticos	4
2.2 Economia de Energia em Destilação	5
2.3 Destilação.....	11
2.3.1 Conceito.....	11
2.3.2 Conceito de Estágio de Equilíbrio.....	11
2.3.3 Métodos Rigorosos de Destilação.....	12
2.3.3.1 Estrutura do Problema - Equação MESH	12
2.3.4 Variáveis de Projeto	14
2.3.5 Matriz Tridiagonal.....	16
2.3.5.1 Cálculo das Composições.....	16
2.3.6 Algoritmo de Thomas.....	17
2.3.7 Método do Ponto de Bolha.....	19
2.4 Cálculo do Equilíbrio Líquido-Vapor	23
2.4.1 Introdução.....	23
2.4.2 Tipos de Problemas de Equilíbrio Líquido-Vapor.....	25
2.4.3 Método UNIFAC (Uniquac Functional Group Activity Coefficients)	26
2.5 Trocador de Calor	28
2.5.1 Conceito.....	28
2.5.2 Classificação dos Trocadores de Calor Quanto ao Serviço	29
2.5.3 Descrição Geral dos Trocadores Tipo Casco e Tubos	29
2.5.4 Cálculos de Trocadores Multitubular	31
2.5.4.1 Algoritmo para Avaliação do Trocador para um Novo Serviço	31
2.5.4.2 algoritmo para o Projeto de um Trocador de Calor.....	32
2.6 Sistema de Compressão	33
2.6.1 Teoria de compressão.....	33

2.6.2 Trabalho de Compressão	34
3. MATERIAIS E MÉTODOS	36
3.1 Material Utilizado	36
3.2 Metodologia da Simulação	36
3.3 Métodos Utilizados pelo Simulador	39
3.3.1 Torre de Destilação	39
3.3.2 Sistema de Compressão	40
3.3.3 Trocador de Calor	40
3.3.4 Válvulas	41
3.3.5 Divisor	41
3.4 Propriedades Termodinâmicas	41
3.4.1 Constante de Equilíbrio	41
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	44
4.1 Destilação Convencional	44
4.1.1 Localização da Alimentação	44
4.1.2 Razão de Refluxo	48
4.1.3 Temperatura de Alimentação	49
4.1.4 Composição da Alimentação	50
4.1.5 Composição do Destilado	51
4.2 Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMV)	52
4.2.1 Número de estágios	52
4.2.2 Composição da Alimentação	55
4.2.3 Composição do Destilado	56
4.3 Economia de Energia	57
5. CONCLUSÕES	61
5.1 Quanto ao Estudo da Destilação Convencional	61
5.2 Quando ao estudo da destilação com recompressão mecânica do vapor	62
5.3 Comparação entre a destilação convencional e os modelos com recompressão mecânica do vapor.	62

6. SUGESTÕES	63
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	64
8. APÊNDICE A	66
8.1 Equação Tipo M Modificada.....	66
8.2 Matriz Didiagonal.....	67
8.2.1 Cálculo das Vazões de Vapor	67
9. APÊNDICE B	69
9.1 Dados de Equilíbrio	69

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1- Compressão dos Vapores de Topo da Coluna	6
Figura 2.2- Compressão por Fluido Intermediário	7
Figura 2.3- Instalação para a Destilação Azeotrópica	8
Figura 2.4- Instalação para Destilação Extrativa.....	8
Figura 2.5- Coluna de Destilação Convencional	10
Figura 2.6- Coluna com Recompressão Mecânica do Vapor.....	10
Figura 2.7- Esquema Geral de uma Cascata Contracorrente	13
Figura 2.8- Esquema de um Prato Teórico com Correntes Laterais	14
Figura 2.9- Esquema para uma Coluna de Cinco Estágios	17
Figura 2.10- Diagrama de Blocos para o Método do Ponto de Bolha	22
Figura 2.11- Esquema de um Trocador de Calor Tipo Casco e Tubos	30
Figura 2.12- Passo Quadrado.....	30
Figura 2.13- Passo Triangular	31
Figura 3.1- Coluna de Destilação Convencional	38
Figura 3.2- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMVH).....	38
Figura 3.3- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMVL).....	39
Figura 3.4- Comparação Entre os Dados Obtidos pelo Simulador e Experimentais.....	43
Figura 4.1 - Influência do Estágio de Alimentação sobre a Razão de Refluxo	47
Figura 4.2- Influência do Estágio de Alimentação sobre a Carga Térmica.....	47
Figura 4.3- Influência da Razão de Refluxo sobre o Número de Estágios	48
Figura 4.4- Influência da Temperatura de Alimentação sobre a carga Térmica e Razão de Refluxo.....	49
Figura 4.5- Influência da Composição do Etanol na Alimentação sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo.....	50

Figura 4.6- Influência da Composição do Etanol no Destilado sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo	51
Figura 4.7- Influência do Número de Estágio sobre o Trabalho de Compressão.....	55
Figura 4.8- Influência da Concentração do Etanol na Alimentação sobre o Trabalho de Compressão.....	56
Figura 4.9- Influência da Composição do Etanol no Destilado sobre o Trabalho de Compressão.....	57

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1- Equações Utilizadas nos Modelos Matemáticos.....	4
Tabela 2.2- Dados Operacionais Empregados por Collura & Luyben.....	9
Tabela 2.3- Resultados Obtidos por Collura & Luyben.....	9
Tabela 2.4- Relações de Restrições para a Cascata Contracorrente.....	15
Tabela 2.5- Especificações para o Projeto de uma Cascata Contracorrente.....	16
Tabela 2.6- Fatores de Correção de Poyting.....	25
Tabela 2.7- Classificação dos Trocadores de Calor.....	29
Tabela 3.1 - Métodos para o Cálculo da Constante de Equilíbrio.....	42
Tabela 4.1 - Resultados das Simulações para a Coluna Convencional.....	45
Tabela 4.2 - Resultados das Simulações para a Destilação Convencional.....	46
Tabela 4.3- Resultados das Simulações para o Modelo RMVH.....	53
Tabela 4.4- Resultados das Simulações para o Modelo RMVL.....	54
Tabela 4.5- Comparação entre a Carga Térmica e Trabalho de Compressão.....	58
Tabela 4.6- Comparação dos Dados deste Trabalho e os Obtidos por COLLURA & LUYBEN.....	59
Tabela 4.7- Comparação entre a Destilação Convencional e Destilação RMV.....	59
Tabela 4.8- Comparação entre a Carga Térmica do Sistema Convencional e o Trabalho de Compressão do Sistema RMV.....	60
Tabela 9.1- Dados de Equilíbrio - Sistema Etanol-Água - P=760 mmHg.....	69

CAPÍTULO I

1. INTRODUÇÃO

Os processos de separação, tais como: destilação, extração, absorção, cristalização, etc, têm importância fundamental na indústria, sendo a escolha entre os processos feita principalmente por critérios econômicos.

A destilação é um método direto de separação baseada em diferenças de ponto de ebulição, onde o agente de separação entre as fases é o calor. Apresenta como desvantagem o consumo de grande percentagem de energia, usada nas indústrias de processos químicos e petroquímicos. Existe, portanto, um grande interesse na utilização das técnicas de conservação de energia, visando obter maior eficiência energética, aprimorando a qualidade do produto e diminuindo assim o custo final do mesmo.

A destilação com recompressão mecânica do vapor (RMV) é discutida na literatura desde a metade do século, porém sua aplicação tecnológica somente adquiriu importância a partir da década de 70, com a crescente elevação dos custos energéticos. Na atualidade, onde o grande desafio é a conservação de energia, a destilação com recompressão mecânica do vapor e integração térmica das correntes assume um papel fundamental no sentido de racionalização de energia nos processos de destilação.

A simulação de processos é atualmente uma poderosa ferramenta para o projeto de uma coluna de destilação. Com o progresso dos métodos computacionais tornou-se possível a solução rigorosa das equações que aparecem no modelo de estágio de equilíbrio; o procedimento geral consiste em resolver simultaneamente as equações de balanço material, balanço de energia e relações de equilíbrio até que o valor correto para o conjunto de temperaturas, de vazões e de composições tenha sido encontrado. Evidentemente, a exatidão da solução entre outros fatores é limitada pela qualidade dos dados termodinâmicos; sendo assim, é de fundamental importância trabalhar com métodos termodinâmicos representativos do sistema projetado/simulado.

O presente trabalho está dividido em duas partes: destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor. O principal objetivo é a otimização em termos energéticos. A primeira parte, visa a obtenção da localização ótima do prato de alimentação e também da razão de refluxo ótima de operação. A segunda parte, analisa a influência do número de estágios, das composições de alimentação e destilado sobre o trabalho de compressão. Em seguida analisa a economia de energia, comparando os resultados dos modelos com recompressão mecânica do vapor com os obtidos a partir da destilação convencional.

CAPÍTULO II

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 Simulação

Simulação é a utilização de modelos matemáticos de maneira que os mesmos reproduzam o comportamento real do sistema. É essencial em sistemas que necessitem de um conjunto muito grande de equações para a sua descrição, com vários ciclos e alimentações, cálculos iterativos, integrações, acesso a banco de dados, etc. SATYRO et al. (1986).

Os simuladores de processos são utilizados de várias maneiras, desde avaliações preliminares de um processo até a análise da operação de uma unidade de produção. Já que cada emprego impõe uma exigência diferente sobre o sistema de simulação, é indispensável que este tenha eficiência diversificada.

O sistema de simulação deve fornecer ao usuário estimativas seguras sobre o tamanho dos equipamentos, as cargas de aquecimento e resfriamento, os níveis de temperatura na rejeição de calor, as exigências de potência, de modo a se tornar possível uma avaliação confiável dos custos de instalação e produção. Além disso, o resultado da avaliação preliminar deve ter uma qualidade tal que os resultados possam servir de ponto de partida para o planejamento final. Na avaliação preliminar, os cálculos simplificados tradicionais fornecem resultados suficientemente exatos, desde que usados com critério e dentro dos limites de confiabilidade. O projeto final inclui o planejamento detalhado das unidades de operação e o emprego de cálculos rigorosos no balanço de energia e de massa de cada unidade, PERRY & CHILTON (1980).

2.1.1 Modelos Matemáticos

Segundo SATYRO et al. (1986), o modelo matemático é aquele que reproduz o sistema abstratamente, ou seja, representa a realidade por meio de equações matemáticas.

Os modelos matemáticos dividem-se em dois grupos:

- *Modelos com Parâmetros Concentrados*: São os sistemas onde a distribuição espacial não importa. Por exemplo, reator de mistura perfeita, onde a concentração é a mesma em todo o reator.
- *Modelos com parâmetros distribuídos*: São sistemas onde a distribuição espacial é importante. Por exemplo, coluna de destilação onde a concentração varia prato a prato.

As Equações utilizadas na elaboração de modelos matemáticos são mostradas na Tabela 2.1:

Tabela 2.1- Equações Utilizadas nos Modelos Matemáticos.

Equação	Descrição
Transporte	São as equações que descrevem as taxas de transporte de energia, massa e momento.
Termodinâmica	São as equações derivadas da termodinâmica clássica (entalpia, entropia, calores de reação, equilíbrio de fases, etc.).
Balanço	São as equações que descrevem os balanços de massa e de energia de um determinado sistema.
Cinética	São as equações que representam o comportamento cinético de um sistema químico reativo. Normalmente são equações com coeficientes a serem determinados empiricamente, ajustados ao comportamento de uma determinada reação química.
Empíricas	São as equações baseadas em observações experimentais (equações para representação de propriedades, regras de misturas, etc.)
Semi-empírica	São as equações deduzidas a partir da teoria, mas contêm coeficientes ajustados empiricamente por um procedimento estatístico qualquer (equação de Antoine para a pressão de vapor, equação de Wilke para a viscosidade de gases, etc.).

- Fonte: Satyro et al. (1986)

2.2 Economia de Energia em Destilação

A destilação consome uma grande quantidade de energia usada na indústria de processos químicos e petroquímicos. Estimativas indicam que 25 a 40% do total de energia consumida pelas indústrias é usada para o funcionamento dos equipamentos de destilação, RUSH Jr., Du PONT de NEMOURS e Co. (1980).

Segundo WEINSTEIN (1985), três áreas devem ser consideradas quando nos defrontamos com o problema de conservação de energia em processos de destilação:

- 1- melhorias operacionais em colunas existentes, com pequenos investimentos (taxa de refluxo, prato de alimentação, isolamento térmico, pré-aquecimento da alimentação, controle, efeito da pressão de operação, incrustações);
- 2- modificações extensas no equipamento existente (integração térmica em uma mesma coluna, integração térmica com outras correntes de processo, destilação extrativa);
- 3- outros processos de separação como alternativa à destilação (extração líquido-líquido, adsorção, etc).

O consumo específico global de energia na destilação pode ser fortemente reduzido pela instalação de um sistema de compressão mecânica dos vapores ou através da integração térmica das correntes.

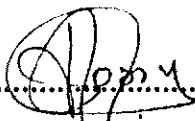
A maioria dos estudos sobre a destilação com recompressão mecânica do vapor estão focalizados em aspectos econômicos no estado estacionário: NULL (1976), MOSTAFA (1981), QUADRI (1981), BROUSSE et al. (1985), MEILI & STUECHELI (1987), FERRE et al. (1985), COLLURA & LUYBEN (1988). Todos esses pesquisadores mostram que a destilação com recompressão do vapor é viável economicamente quando as seguintes condições forem satisfeitas:

- 1- a energia não é disponível de outras fontes de processos;
- 2- baixas temperaturas requeridas para a refrigeração;
- 3- baixas temperaturas de operação (limitação térmica do compressor);
- 4- pressão moderada;
- 5- pequena diferença de temperatura entre topo e fundo da coluna.

Portanto, a maioria das aplicações práticas da técnica de destilação com recompressão mecânica do vapor (RMV) ocorre em sistemas binários onde a separação

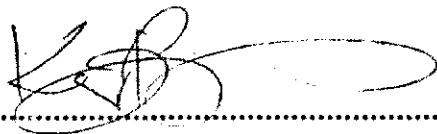
**SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE DESTILAÇÃO COM
RECOMPRESSÃO MECÂNICA DE VAPOR PARA PRODUÇÃO
DO ETANOL**

DISSERTAÇÃO APROVADA EM13..... /10..... / 1993



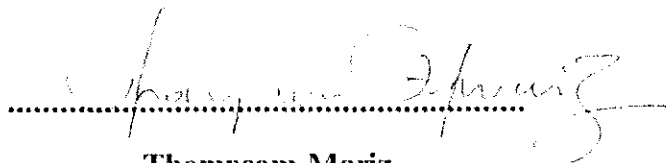
.....
Michel François Fossy

PROFESSOR ORIENTADOR



.....
Kepler Borges França

Examinador



.....
Thompsom Mariz

Examinador

Campina Grande, Outubro de 1993

AGRADECIMENTOS

Aos Professores **Michel François Fossy** e **Romildo Pereira Brito** pela orientação no desenvolvimento deste trabalho.

Aos Professores e alunos do curso de Pós-Graduação em Engenharia Química pela amizade e colaboração, em especial aos Professores **Laercio Gomes de Oliveira**, **Flávio Luiz Honorato da Silva** e **Vimário Simões Silva** pelo o incentivo e críticas apresentadas na elaboração do texto.

Ao Professor **Kepler Borges França** coordenador do curso de Pós-Graduação, pelo apoio e amizade.

À Coordenação de Pós-Graduação, nas pessoas de **Maria José Bezerra** e **Maricé Pereira da Silva** pela paciência, compreensão e carinho.

Aos amigos **Romildo dos Santos Silva**, **José Nazareno dos Santos** e **Oswaldo dos Santos Leal** pela amizade sincera e incentivo na elaboração deste trabalho.

Ao CNPq

DEDICATÓRIA

A Deus.

Aos meus pais: Alcino e Peta, pelo carinho, respeito e admiração.

Aos meus irmãos e irmãs: Rangel, Ustâne, Telê, Artime, Artemizio, Arianne, Aymar, Marcial, Athenne, Verena, Calvert e Edna.

À memória de Alcimar, meu querido irmão.

A todos os companheiros que fizeram e ainda fazem parte da minha vida acadêmica.

RESUMO

A destilação consome grande percentagem de energia usada na indústria e consequentemente, uma melhoria da eficiência energética é o caminho para a redução do custo final do produto. A separação do sistema etanol-água é o principal problema na produção do álcool por fermentação; pois a alimentação é diluída, necessitando de grande quantidade de energia para a sua recuperação, até próximo da sua composição azeotrópica, por destilação convencional. O objetivo do presente trabalho é a redução do consumo energético na fase de concentração do etanol. O estudo foi dividido em duas partes: destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor. A primeira parte, simula a unidade convencional, visando estabelecer condições ótimas de operação com o objetivo de reduzir a quantidade de energia necessária ao refeedor. Em seguida, avalia-se a flexibilidade do sistema, em termos de variação da temperatura de alimentação, composições da alimentação e do destilado. A segunda parte, simula dois modelos de destilação com recompressão mecânica do vapor: RMVL e RMVH; o modelo RMVL opera com baixa pressão no vaso de refluxo, ou seja, opera na pressão da coluna, enquanto que o RMVH opera com pressão alta no vaso de refluxo, ou seja, opera na pressão de descarga do compressor. O principal objetivo é avaliar a eficiência, em termos energéticos, desses modelos comparando os resultados com os obtidos para a destilação convencional. Com base nos resultados obtidos o modelo RMVL mostrou-se mais eficiente que o modelo RMVH e também ficou evidenciado a grande economia de energia obtida com a implantação do sistema de recompressão. Como o sistema etanol-água apresenta comportamento não ideal na fase líquida, utilizou-se o modelo UNIFAC para a correção dessa fase.

ABSTRACT

The distillation consumes great percentage of energy used in the industry and consequently, an improvement of the energy efficiency is the way to decrease the final cost of the product. The separation of system ethanol-water is the main problem in the production of the alcohol for fermentation; because the feeding is diluted, needing great amount of energy for its recovery, until close of its azeotrope composition, for conventional distillation. The object of the present work to decrease the energy consumption in the phase of concentration of the ethanol. This study was divided in two parts: conventional distillation and vapor recompression distillation. The first one, simulates the conventional unit, seeking to establish great conditions of operation with the objective of reducing the amount of necessary energy to the reboiler. After that, the flexibility of the system is evaluated, in terms of variation of the feeding temperature, compositions of the feeding and of the distilled. The second part simulates two distillation models with mechanical vapor recompression: RMVL and RMVH; the model RMVL operates with low pressure in to reflux vase, it means that the system works the pressure of the column, while RMVH operates with high pressure in to reflux vase, in means that the pressure of discharge of the compressor. The main objective is to evaluate the efficiency in energy terms of those models and comparing the results with those obtained from the conventional distillation. The results shown that the model RMVL presented better performance than RMVH and also the recompression system shown great economy of energy. As the system ethanol-water presents a behavior of non ideal in the liquid phase, the model UNIFAC was used for the correction of that phase.

SIMBOLOGIA

Símbolo	Definições
A	Constante da Equação de Antoine;
A_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.14);
B	Constante da Equação de Antoine;
B_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.15);
C	Constante da equação de Antoine
C	Número de componentes;
C_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.16);
D_j	Coefficiente da Equação (2.13), definido pela Equação (2.17);
$E_{i,j}$	Equação de equilíbrio para o componente i no estágio j;
F	Variância do sistema
F_j	Fluxo molar de alimentação para o estágio j;
\hat{f}_i^L	Fugacidade do componente i na solução líquida;
f_i°	Fugacidade do componente i no estado padrão;
\hat{f}_i^V	Fugacidade do componente i na fase vapor;
H_j	Equação do balanço de energia para o estágio j;
H_{Fj}	Entalpia molar da alimentação do estágio j;
H_{Lj}	Entalpia molar do líquido no estágio j;
H_{Vj}	Entalpia molar do vapor no estágio j;
$k_{i,j}$	Constante de equilíbrio do componente i no estágio j;
L_j	Vazão molar de líquido no estágio j;
Q_j	Quantidade de calor adicionado no estágio j;
$M_{i,j}$	Equação do balanço material para o componente i no estágio j;
n	Parâmetro da Equação (2.70);
N	Número total de estágios
N_c°	Relação de restrição para o estágio de equilíbrio;
N_i°	Variáveis de projeto de um estágio de equilíbrio;
N_v°	Número total de variáveis do estágio equilíbrio;

N_R	Grau de liberdade
N_v^U	Número total de variáveis de projeto da unidade;
P_{Fj}	Pressão de alimentação do estágio j;
P	Pressão do sistema;
p_j	Parâmetro do algoritmo de Thomas, definido pela Equação (2.26)
P_i^{sat}	Pressão de saturação do componente i;
q_j	Parâmetro do algoritmo de Thomas, definido pela Equação (2.26)
q_i	Volume molecular de Van der Waals para o componente i (Equação 2.62);
Q_K	Parâmetro de volume do grupo k do método UNIFAC;
r_i	Área superficial molecular de Van der Waals (Equação 2.61);
R	Constante universal dos gases;
R_D	Fator de incrustação de projeto
R_K	Parâmetros de área do grupo k do método UNIFAC;
RMV	Recompressão mecânica do vapor;
S_{ij}	Equação do somatório das frações molares para o estágio j;
T	Temperatura do sistema;
T_{Fj}	Temperatura de alimentação do estágio j;
U_j	Vazão molar de líquida retirada do estágio j;
V	Volume do sistema
V_i	Volume molar do componente i (Equação 2.52);
V_i^L	Volume molar do componente i na solução líquida;
V_j	Vazão molar de vapor no estágio j;
x_{ij}	Composição molar na fase líquido do componente i no estágio j;
z_{ij}	Composição molar do componente i no estágio j;
z	Número de coordenação (Equação 2.57);
W_e	Trabalho de compressão;
W_{is}	Trabalho isotérmico
W_j	Vazão molar de vapor no estágio j;
W_k	Trabalho adiabático;
W_p	Trabalho politrópico;
W_{real}	Trabalho real;
y_{ij}	Composição molar na fase vapor do componente i no estágio j;

Símbolo Gregos	Definições
α_j	Coefficiente da Equação (2.37);
β_j	Coefficiente da Equação (2.37);
ϕ_i	Fração de volume da molécula i;
$\hat{\phi}_i$	Coefficiente de fugacidade do componente i;
ϕ_i^{sat}	Coefficiente de fugacidade do componente i saturado;
Γ_k	Coefficiente de atividade residual do grupo k na solução
$\Gamma_k^{(i)}$	Coefficiente de atividade do grupo k em uma solução de referência;
γ_j	Coefficiente da Equação (2.37);
γ_i	Coefficiente de atividade do componente i;
γ_i^C	Coefficiente de atividade combinatorial;
γ_i^R	Coefficiente de atividade residual;
η_{is}	Rendimento isotérmico;
η_k	Rendimento adiabático;
η_p	Rendimento Politrópico;
θ_i	Fração de área da molécula i;
τ	Critério de convergência utilizado pela Equação (2.45);
Γ_k	Coefficiente de atividade residual do grupo k na solução
Ψ_{mn}	Parâmetro de interação entre os grupos m e n;

ÍNDICE

1. INTRODUÇÃO	1
2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	3
2.1 Simulação	3
2.1.1 Modelos Matemáticos	4
2.2 Economia de Energia em Destilação	5
2.3 Destilação	11
2.3.1 Conceito	11
2.3.2 Conceito de Estágio de Equilíbrio	11
2.3.3 Métodos Rigorosos de Destilação	12
2.3.3.1 Estrutura do Problema - Equação MESH	12
2.3.4 Variáveis de Projeto	14
2.3.5 Matriz Tridiagonal	16
2.3.5.1 Cálculo das Composições	16
2.3.6 Algoritmo de Thomas	17
2.3.7 Método do Ponto de Bolha	19
2.4 Cálculo do Equilíbrio Líquido-Vapor	23
2.4.1 Introdução	23
2.4.2 Tipos de Problemas de Equilíbrio Líquido-Vapor	25
2.4.3 Método UNIFAC (Uniquac Functional Group Activity Coefficients)	26
2.5 Trocador de Calor	28
2.5.1 Conceito	28
2.5.2 Classificação dos Trocadores de Calor Quanto ao Serviço	29
2.5.3 Descrição Geral dos Trocadores Tipo Casco e Tubos	29
2.5.4 Cálculos de Trocadores Multitubular	31
2.5.4.1 Algoritmo para Avaliação do Trocador para um Novo Serviço	31
2.5.4.2 algoritmo para o Projeto de um Trocador de Calor	32
2.6 Sistema de Compressão	33
2.6.1 Teoria de compressão	33

2.6.2 Trabalho de Compressão	34
3. MATERIAIS E MÉTODOS	36
3.1 Material Utilizado	36
3.2 Metodologia da Simulação	36
3.3 Métodos Utilizados pelo Simulador	39
3.3.1 Torre de Destilação	39
3.3.2 Sistema de Compressão	40
3.3.3 Trocador de Calor	40
3.3.4 Válvulas	41
3.3.5 Divisor	41
3.4 Propriedades Termodinâmicas	41
3.4.1 Constante de Equilíbrio	41
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	44
4.1 Destilação Convencional	44
4.1.1 Localização da Alimentação	44
4.1.2 Razão de Refluxo	48
4.1.3 Temperatura de Alimentação	49
4.1.4 Composição da Alimentação	50
4.1.5 Composição do Destilado	51
4.2 Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMV)	52
4.2.1 Número de estágios	52
4.2.2 Composição da Alimentação	55
4.2.3 Composição do Destilado	56
4.3 Economia de Energia	57
5. CONCLUSÕES	61
5.1 Quanto ao Estudo da Destilação Convencional	61
5.2 Quando ao estudo da destilação com recompressão mecânica do vapor	62
5.3 Comparação entre a destilação convencional e os modelos com recompressão mecânica do vapor.	62

6. SUGESTÕES	63
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	64
8. APÊNDICE A	66
8.1 Equação Tipo M Modificada.....	66
8.2 Matriz Didiagonal.....	67
8.2.1 Cálculo das Vazões de Vapor	67
9. APÊNDICE B	69
9.1 Dados de Equilíbrio	69

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1- Compressão dos Vapores de Topo da Coluna	6
Figura 2.2- Compressão por Fluido Intermediário	7
Figura 2.3- Instalação para a Destilação Azeotrópica	8
Figura 2.4- Instalação para Destilação Extrativa.....	8
Figura 2.5- Coluna de Destilação Convencional	10
Figura 2.6- Coluna com Recompressão Mecânica do Vapor	10
Figura 2.7- Esquema Geral de uma Cascata Contracorrente	13
Figura 2.8- Esquema de um Prato Teórico com Correntes Laterais	14
Figura 2.9- Esquema para uma Coluna de Cinco Estágios	17
Figura 2.10- Diagrama de Blocos para o Método do Ponto de Bolha	22
Figura 2.11- Esquema de um Trocador de Calor Tipo Casco e Tubos	30
Figura 2.12- Passo Quadrado.....	30
Figura 2.13- Passo Triangular	31
Figura 3.1- Coluna de Destilação Convencional	38
Figura 3.2- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMVH).....	38
Figura 3.3- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMVL).....	39
Figura 3.4- Comparação Entre os Dados Obtidos pelo Simulador e Experimentais.....	43
Figura 4.1 - Influência do Estágio de Alimentação sobre a Razão de Refluxo	47
Figura 4.2- Influência do Estágio de Alimentação sobre a Carga Térmica.....	47
Figura 4.3- Influência da Razão de Refluxo sobre o Número de Estágios	48
Figura 4.4- Influência da Temperatura de Alimentação sobre a carga Térmica e Razão de Refluxo.....	49
Figura 4.5- Influência da Composição do Etanol na Alimentação sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo.....	50

Figura 4.6- Influência da Composição do Etanol no Destilado sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo	51
Figura 4.7- Influência do Número de Estágio sobre o Trabalho de Compressão.....	55
Figura 4.8- Influência da Concentração do Etanol na Alimentação sobre o Trabalho de Compressão.....	56
Figura 4.9- Influência da Composição do Etanol no Destilado sobre o Trabalho de Compressão.....	57

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1- Equações Utilizadas nos Modelos Matemáticos.....	4
Tabela 2.2- Dados Operacionais Empregados por Collura & Luyben.....	9
Tabela 2.3- Resultados Obtidos por Collura & Luyben.....	9
Tabela 2.4- Relações de Restrições para a Cascata Contracorrente.....	15
Tabela 2.5- Especificações para o Projeto de uma Cascata Contracorrente.....	16
Tabela 2.6- Fatores de Correção de Poyting.....	25
Tabela 2.7- Classificação dos Trocadores de Calor.....	29
Tabela 3.1 - Métodos para o Cálculo da Constante de Equilíbrio.....	42
Tabela 4.1 - Resultados das Simulações para a Coluna Convencional.....	45
Tabela 4.2 - Resultados das Simulações para a Destilação Convencional.....	46
Tabela 4.3- Resultados das Simulações para o Modelo RMVH.....	53
Tabela 4.4- Resultados das Simulações para o Modelo RMVL.....	54
Tabela 4.5- Comparação entre a Carga Térmica e Trabalho de Compressão.....	58
Tabela 4.6- Comparação dos Dados deste Trabalho e os Obtidos por COLLURA & LUYBEN.....	59
Tabela 4.7- Comparação entre a Destilação Convencional e Destilação RMV.....	59
Tabela 4.8- Comparação entre a Carga Térmica do Sistema Convencional e o Trabalho de Compressão do Sistema RMV.....	60
Tabela 9.1- Dados de Equilíbrio - Sistema Etanol-Água - P=760 mmHg.....	69

CAPÍTULO I

1. INTRODUÇÃO

Os processos de separação, tais como: destilação, extração, absorção, cristalização, etc, têm importância fundamental na indústria, sendo a escolha entre os processos feita principalmente por critérios econômicos.

A destilação é um método direto de separação baseada em diferenças de ponto de ebulição, onde o agente de separação entre as fases é o calor. Apresenta como desvantagem o consumo de grande percentagem de energia, usada nas indústrias de processos químicos e petroquímicos. Existe, portanto, um grande interesse na utilização das técnicas de conservação de energia, visando obter maior eficiência energética, aprimorando a qualidade do produto e diminuindo assim o custo final do mesmo.

A destilação com recompressão mecânica do vapor (RMV) é discutida na literatura desde a metade do século, porém sua aplicação tecnológica somente adquiriu importância a partir da década de 70, com a crescente elevação dos custos energéticos. Na atualidade, onde o grande desafio é a conservação de energia, a destilação com recompressão mecânica do vapor e integração térmica das correntes assume um papel fundamental no sentido de racionalização de energia nos processos de destilação.

A simulação de processos é atualmente uma poderosa ferramenta para o projeto de uma coluna de destilação. Com o progresso dos métodos computacionais tornou-se possível a solução rigorosa das equações que aparecem no modelo de estágio de equilíbrio; o procedimento geral consiste em resolver simultaneamente as equações de balanço material, balanço de energia e relações de equilíbrio até que o valor correto para o conjunto de temperaturas, de vazões e de composições tenha sido encontrado. Evidentemente, a exatidão da solução entre outros fatores é limitada pela qualidade dos dados termodinâmicos; sendo assim, é de fundamental importância trabalhar com métodos termodinâmicos representativos do sistema projetado/simulado.

O presente trabalho está dividido em duas partes: destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor. O principal objetivo é a otimização em termos energéticos. A primeira parte, visa a obtenção da localização ótima do prato de alimentação e também da razão de refluxo ótima de operação. A segunda parte, analisa a influência do número de estágios, das composições de alimentação e destilado sobre o trabalho de compressão. Em seguida analisa a economia de energia, comparando os resultados dos modelos com recompressão mecânica do vapor com os obtidos a partir da destilação convencional.

CAPÍTULO II

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 Simulação

Simulação é a utilização de modelos matemáticos de maneira que os mesmos reproduzam o comportamento real do sistema. É essencial em sistemas que necessitem de um conjunto muito grande de equações para a sua descrição, com vários ciclos e alimentações, cálculos iterativos, integrações, acesso a banco de dados, etc. SATYRO et al. (1986).

Os simuladores de processos são utilizados de várias maneiras, desde avaliações preliminares de um processo até a análise da operação de uma unidade de produção. Já que cada emprego impõe uma exigência diferente sobre o sistema de simulação, é indispensável que este tenha eficiência diversificada.

O sistema de simulação deve fornecer ao usuário estimativas seguras sobre o tamanho dos equipamentos, as cargas de aquecimento e resfriamento, os níveis de temperatura na rejeição de calor, as exigências de potência, de modo a se tornar possível uma avaliação confiável dos custos de instalação e produção. Além disso, o resultado da avaliação preliminar deve ter uma qualidade tal que os resultados possam servir de ponto de partida para o planejamento final. Na avaliação preliminar, os cálculos simplificados tradicionais fornecem resultados suficientemente exatos, desde que usados com critério e dentro dos limites de confiabilidade. O projeto final inclui o planejamento detalhado das unidades de operação e o emprego de cálculos rigorosos no balanço de energia e de massa de cada unidade, PERRY & CHILTON (1980).

2.1.1 Modelos Matemáticos

Segundo SATYRO et al. (1986), o modelo matemático é aquele que reproduz o sistema abstratamente, ou seja, representa a realidade por meio de equações matemáticas.

Os modelos matemáticos dividem-se em dois grupos:

- *Modelos com Parâmetros Concentrados:* São os sistemas onde a distribuição espacial não importa. Por exemplo, reator de mistura perfeita, onde a concentração é a mesma em todo o reator.
- *Modelos com parâmetros distribuídos:* São sistemas onde a distribuição espacial é importante. Por exemplo, coluna de destilação onde a concentração varia prato a prato.

As Equações utilizadas na elaboração de modelos matemáticos são mostradas na Tabela 2.1:

Tabela 2.1- Equações Utilizadas nos Modelos Matemáticos.

Equação	Descrição
Transporte	São as equações que descrevem as taxas de transporte de energia, massa e momento.
Termodinâmica	São as equações derivadas da termodinâmica clássica (entalpia, entropia, calores de reação, equilíbrio de fases, etc.).
Balanço	São as equações que descrevem os balanços de massa e de energia de um determinado sistema.
Cinética	São as equações que representam o comportamento cinético de um sistema químico reativo. Normalmente são equações com coeficientes a serem determinados empiricamente, ajustados ao comportamento de uma determinada reação química.
Empíricas	São as equações baseadas em observações experimentais (equações para representação de propriedades, regras de misturas, etc.)
Semi-empírica	São as equações deduzidas a partir da teoria, mas contêm coeficientes ajustados empiricamente por um procedimento estatístico qualquer (equação de Antoine para a pressão de vapor, equação de Wilke para a viscosidade de gases, etc.).

- Fonte: Satyro et al. (1986)

2.2 Economia de Energia em Destilação

A destilação consome uma grande quantidade de energia usada na indústria de processos químicos e petroquímicos. Estimativas indicam que 25 a 40% do total de energia consumida pelas indústrias é usada para o funcionamento dos equipamentos de destilação, RUSH Jr., Du PONT de NEMOURS e Co. (1980).

Segundo WEINSTEIN (1985), três áreas devem ser consideradas quando nos defrontamos com o problema de conservação de energia em processos de destilação:

- 1- melhorias operacionais em colunas existentes, com pequenos investimentos (taxa de refluxo, prato de alimentação, isolamento térmico, pré-aquecimento da alimentação, controle, efeito da pressão de operação, incrustações);
- 2- modificações extensas no equipamento existente (integração térmica em uma mesma coluna, integração térmica com outras correntes de processo, destilação extrativa);
- 3- outros processos de separação como alternativa à destilação (extração líquido-líquido, adsorção, etc).

O consumo específico global de energia na destilação pode ser fortemente reduzido pela instalação de um sistema de compressão mecânica dos vapores ou através da integração térmica das correntes.

A maioria dos estudos sobre a destilação com recompressão mecânica do vapor estão focalizados em aspectos econômicos no estado estacionário: NULL (1976), MOSTAFA (1981), QUADRI (1981), BROUSSE et al. (1985), MEILI & STUECHELI (1987), FERRE et al. (1985), COLLURA & LUYBEN (1988). Todos esses pesquisadores mostram que a destilação com recompressão do vapor é viável economicamente quando as seguintes condições forem satisfeitas:

- 1- a energia não é disponível de outras fontes de processos;
- 2- baixas temperaturas requeridas para a refrigeração;
- 3- baixas temperaturas de operação (limitação térmica do compressor);
- 4- pressão moderada;
- 5- pequena diferença de temperatura entre topo e fundo da coluna.

Portanto, a maioria das aplicações práticas da técnica de destilação com recompressão mecânica do vapor (RMV) ocorre em sistemas binários onde a separação

Portanto, o elemento possui sete correntes homogêneas de massa cada uma contribuindo com (C+2) variáveis, e uma corrente térmica que contribui com uma variável. Então:

$$N_V^e = 7 \cdot (C+2) + 1 \rightarrow N_V^e = 7 \cdot C + 15 \quad (2.9)$$

As relações de restrições são mostradas na Tabela 2.4:

Tabela 2.4- Relações de Restrições para a Cascata Contracorrente

Intrinsecas	
Identidade de T e P entre V_J e W_J	2
Identidade de T e P entre L_J e U_J	2
Identidade de Concentração entre V_J e W_J	C-1
Identidade de Concentração entre U_J e L_J	C-1
As correntes V_J e L_J estão em equilíbrio, $T^V=T^L$ e $P^V=P^L$	2
Balanco Material.....	C
Balanco de energia.....	1
Distribuição entre Fases.....	C
	4C+5

• Fonte: PERRY & GREEN, (1985)

O número de variáveis de projeto do elemento é obtido da Equação (2.8),

$$N_i^e = (7 \cdot C + 15) - (4 \cdot C + 5) \rightarrow N_i^e = 3 \cdot C + 10 \quad (2.10)$$

como a cascata contracorrente possui N estágios, o número total de variáveis de projeto é dado por,

$$\sum N_i^e = N \cdot (3 \cdot C + 10) \quad (2.11)$$

substituindo a Equação (2.11) na Equação (2.7), temos o número total de variáveis para a cascata contracorrente,

$$N_V^U = 1 + N \cdot (3 \cdot C + 10) \quad (2.12)$$

O modelo é representado por $N \cdot (2 \cdot C + 3)$ Equações MESH em $[N \cdot (3 \cdot C + 10) + 1]$ variáveis. A diferença entre o número total de variáveis e o número de equações MESH fornece a quantidade de variáveis que devem ser especificadas para a solução do projeto,

$$\text{Especificações} = [N \cdot (3 \cdot C + 10) + 1] - [N \cdot (2 \cdot C + 3)]$$

rearranjando,

$$\text{Especificações} = N \cdot C + 7 \cdot N + 1$$

Então, se N e todos $F_j, z_{ij}, T_{Fj}, P_{Fj}, P_j, U_j, W_j$ e Q_j são especificados, o modelo é representado por $N.(2.C+3)$ equações algébricas simultâneas em $N.(2.C+3)$ variáveis desconhecidas. Estas especificações estão resumidas na Tabela 2.5:

Tabela 2.5- Especificações para o Projeto de uma Cascata Contracorrente

Entrada		Saída	
Variáveis	Quantidade	Variáveis	Quantidades
N	1	x_{ij}	$N.C$
F_j	N	y_{ij}	$N.C$
z_{ij}	$N.C$	L_j	N
P_{Fj}	N	V_j	N
P_j	N	T_j	N
T_{Fj}	N		<hr/>
U_j	N		$2.N.C+3.N=N.(2.C+3)$
W_j	N		
Q_j	N		
	$N.C+7.N+1$		

2.3.5 Matriz Tridiagonal

2.3.5.1 Cálculo das Composições

As composições são obtidas modificando a Equação tipo M, substituindo as Equações (2.2) e (2.6) na Equação (2.1) para eliminar y e L . Os resultados para cada componente em cada estágio são os seguintes (ver Apêndice A-1),

$$A_j \cdot x_{i,j-1} + B_j \cdot x_{i,j} + C_j \cdot x_{i,j+1} = D_j \quad (2.13)$$

onde:

$$A_j = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad 2 \leq j \leq N \quad (2.14)$$

$$B_j = - \left[V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 + U_j + (V_j + W_j) \cdot k_{ij} \right] \quad 1 \leq j \leq N \quad (2.15)$$

$$C_j = V_{j+1} \cdot k_{i,j+1} \quad 1 \leq j \leq N-1 \quad (2.16)$$

$$D_j = -F_j \cdot z_{ij} \quad 1 \leq j \leq N \quad (2.17)$$

As constantes B_j e C_j para cada componente em cada estágio dependem da temperatura (T_j), vazão de vapor (V_j) e da constante de equilíbrio ($k_{i,j}$). A constante de equilíbrio ($k_{i,j}$) depende da temperatura, pressão e das composições das fases. Assim, com as especificações de projeto e partindo dos perfis iniciais de temperatura e vazão de vapor ao longo da coluna e ainda adotando como primeira estimativa valores ideais da constante de equilíbrio, todas as constantes da equação (2.13) são determinadas.

As equações tipo M modificadas (equação 2.13) podem ser agrupadas por componente, ser separadas e escritas como uma série C de matrizes tridiagonais, onde as variáveis de saída para cada matriz são os x_i sobre todos os N estágios da cascata contracorrente. A Figura (2.9) mostra o esquema para uma coluna de 5 estágios, PERRY & GREEN (1985).

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 \\ 0 & 0 & A_4 & B_4 & C_4 \\ 0 & 0 & 0 & A_5 & B_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ x_{i,4} \\ x_{i,5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5 \end{bmatrix}$$

Figura 2.9- Esquema para uma Coluna de Cinco Estágios

2.3.6 Algoritmo de Thomas

O algoritmo de Thomas para a solução da Equação linearizada (2.13) é uma eliminação gaussiana começando do estágio 1 até o estágio N para eliminar $x_{i,N}$. Os outros valores são computados recursivamente a partir do valor de $x_{i,N}$.

As equações usadas no algoritmo de Thomas são as seguintes:

Para o estágio 1, a equação (2.13) fornece,

$$A_1 \cdot x_{i,0} + B_1 \cdot x_{i,1} + C_1 \cdot x_{i,2} = D_1 \rightarrow B_1 \cdot x_{i,1} + C_1 \cdot x_{i,2} = D_1$$

de acordo com a Figura 2.7, $x_{i,0} = 0$. Então, a equação acima pode ser resolvida para $x_{i,1}$ em termos de $x_{i,2}$,

$$x_{i,1} = \frac{D_1 - C_1 \cdot x_{i,2}}{B_1} \quad (2.18)$$

fazendo, $p_1 = \frac{C_1}{B_1}$ e $q_1 = \frac{D_1}{B_1}$. Então,

$$x_{i,1} = q_1 - p_1 \cdot x_{i,2} \quad (2.19)$$

Para o estágio 2,

$$A_2 \cdot x_{i,1} + B_2 \cdot x_{i,2} + C_2 \cdot x_{i,3} = D_2 \quad (2.20)$$

substituindo $x_{i,1}$ da Equação (2.19) na Equação (2.20),

$$A_2 \cdot (q_1 - p_1 \cdot x_{i,2}) + B_2 \cdot x_{i,2} + C_2 \cdot x_{i,3} = D_2 \rightarrow x_{i,2} \cdot (B_2 - A_2 \cdot p_1) = D_2 - A_2 \cdot q_1 - C_2 \cdot x_{i,3}$$

rearranjando,

$$x_{i,2} = \frac{D_2 - A_2 \cdot q_1}{B_2 - A_2 \cdot p_1} - \frac{C_2 \cdot x_{i,3}}{B_2 - A_2 \cdot p_1} \quad (2.21)$$

fazendo, $q_2 = \frac{D_2 - A_2 \cdot q_1}{B_2 - A_2 \cdot p_1}$ e $p_2 = \frac{C_2}{B_2 - A_2 \cdot p_1}$. Então,

$$x_{i,2} = q_2 - p_2 \cdot x_{i,3} \quad (2.22)$$

Para o estágio 3,

$$A_3 \cdot x_{i,2} + B_3 \cdot x_{i,3} + C_3 \cdot x_{i,4} = D_3 \quad (2.23)$$

substituindo $x_{i,2}$ da Equação (2.22) na Equação (2.23),

$$A_3 \cdot (q_2 - p_2 \cdot x_{i,3}) + B_3 \cdot x_{i,3} + C_3 \cdot x_{i,4} = D_3 \rightarrow x_{i,3} \cdot (B_3 - A_3 \cdot p_2) = D_3 - A_3 \cdot q_2 - C_3 \cdot x_{i,4}$$

rearranjando,

$$x_{i,3} = \frac{D_3 - A_3 \cdot q_2}{B_3 - A_3 \cdot p_2} - \frac{C_3 \cdot x_{i,4}}{B_3 - A_3 \cdot p_2} \quad (2.24)$$

fazendo, $q_3 = \frac{D_3 - A_3 \cdot q_2}{B_3 - A_3 \cdot p_2}$ e $p_3 = \frac{C_3}{B_3 - A_3 \cdot p_2}$. Então,

$$x_{i,3} = q_3 - p_3 \cdot x_{i,4} \quad (2.25)$$

Por indução, pode-se definir,

$$p_j = \frac{C_j}{B_j - A_j \cdot p_{j-1}} \text{ e } q_j = \frac{D_j - A_j \cdot q_{j-1}}{B_j - A_j \cdot p_{j-1}} \quad (2.26)$$

então,

$$x_{i,j} = q_j - p_j \cdot x_{i,j+1} \quad (2.27)$$

Para o estágio N, a Equação (2.27) pode ser escrita como,

$$x_{i,N} = q_N \quad (2.28)$$

pois $x_{i,N+1} = 0$, conforme a Figura 2.7. Obtendo-se o valor de $x_{i,N}$, os outros valores de $x_{i,j}$, podem ser calculados sucessivamente através da equação (2.27) escrita para cada estágio j .

$$x_{i,j-1} = q_{j-1} - P_{j-1} \cdot x_{i,j} \quad (2.29)$$

a Equação (2.29) corresponde aos coeficientes da matriz tridiagonal.

2.3.7 Método do Ponto de Bolha

O método do ponto de bolha foi desenvolvido por Wang & Henke (1966). No método todas as equações são agrupadas e resolvidas seqüencialmente exceto a equação do tipo M modificada, que é resolvida separadamente para cada componente em cada estágio, pela técnica da resolução de matriz tridiagonal, ou seja, pelo algoritmo de Thomas.

As especificações consistem de: todas as condições e localizações das alimentações, pressão para cada estágio, fluxo total de todas as correntes laterais, taxa de calor para todos os estágios exceto o estágio 1 (condensador) e estágio N (refervedor), número total de estágios, taxa de refluxo externo e taxa de vapor destilado.

Para início dos cálculos, o perfil de temperatura e as vazões de vapor ao longo da torre devem ser previamente admitidos, pois são necessários para o cálculo das constantes da equação tipo M modificada. As temperaturas em cada estágio T_j são consideradas como uma variação linear em relação ao ponto de bolha do componente mais leve no topo e o ponto de bolha do componente mais pesado no fundo. Para a vazão de vapor admite-se um perfil constante ao longo da torre.

A partir do perfil inicial de temperatura, os valores de $k_{i,j}$ podem ser calculados, admitindo valores ideais para a primeira iteração,

$$k_{i,j} = \frac{P_i^{\text{sat}}}{P} \quad (2.30)$$

onde P_i^{sat} é a pressão de vapor obtida pela equação de Soave-Redlich-Kwong ou Peng-Robinson e P é a pressão do sistema.

Com os valores das constantes de equilíbrio, as composições $x_{i,j}$ podem ser calculadas pela resolução da matriz tridiagonal utilizando o algoritmo de Thomas.

A partir dos valores de $x_{i,j}$ pode-se calcular um novo conjunto de valores para as temperaturas usando as equações do ponto de bolha. Antes porém, os valores de $x_{i,j}$ são normalizados para garantir que os valores usados no cálculo do novo conjunto de temperatura tenham soma unitária. A normalização é dada por,

$$(x_{i,j})_{\text{Normalizado}} = \frac{x_{i,j}}{\sum_i x_{i,j}} \quad (2.31)$$

As equações do ponto de bolha são obtidas combinando as Equações (2.2) e (2.3) para eliminar $y_{i,j}$ dando

$$\sum_{i=1}^c k_{i,j} \cdot x_{i,j} = 1.0 \quad (2.32)$$

Os valores de $y_{i,j}$ são determinados em conjunto com as temperaturas dos estágios, usando a equação do tipo E. Com o conjunto de valores para $x_{i,j}$, T_j , e $y_{i,j}$, calcula-se as entalpias molares das correntes líquida e vapor para cada estágio. Desde que F_1 , V_1 , U_1 , W_1 e L_1 são especificados, V_2 é obtido através do balanço global por,

$$V_2 = V_1 + L_1 + U_1 - F_1 - W_1 \quad (2.34)$$

Com o valor de V_2 e das especificações, calcula-se Q_1 e Q_N do balanço de energia. Esses valores são calculados por,

$$Q_1 = F_1 \cdot H_{F1} + V_2 \cdot H_{V2} - V_1 \cdot H_{V1} - (U_1 + L_1) \cdot H_{L1} \quad (2.35)$$

e

$$Q_N = \sum_{j=1}^N (F_j \cdot H_{Fj} - W_j \cdot H_{Vj} - U_j \cdot H_{Lj}) - \sum_{j=1}^{N-1} Q_j - V_1 \cdot H_{V1} - L_N \cdot H_{LN} \quad (2.36)$$

Um novo conjunto de V_j são calculados combinando-se a Equação (2.5) e (2.6) para eliminar L_{j+1} e L_j (ver Apêndice A-2), os resultados são os seguintes:

$$\alpha_j \cdot V_j + \beta_j \cdot V_{j+1} = \gamma_j \quad (2.37)$$

onde,

$$\alpha_j = H_{L,j+1} - H_{Vj} \quad (2.38)$$

$$\beta_j = H_{V_{j+1}} - H_{L_j} \quad (2.39)$$

$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - V_m) - V_1 \right] \cdot (H_{L_j} - H_{L_{j-1}}) + F_j \cdot (H_{L_j} - H_{F_j}) + W_j \cdot (H_{V_j} - H_{L_j}) + Q_j \quad (2.40)$$

A Equação (2.37) é resolvida começando do topo onde V_2 é conhecido e trabalhando recursivamente estágio a estágio, até o fundo. Então,

$$V_3 = \frac{\gamma_2 - \alpha_2 \cdot V_2}{\beta_2} \quad (2.41)$$

$$V_4 = \frac{\gamma_3 - \alpha_3 \cdot V_3}{\beta_3} \quad (2.42)$$

em geral,

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} \cdot V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad (2.43)$$

As vazões de líquido ao longo da torre são obtidas da seguinte equação,

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (2.44)$$

O procedimento é repetido até o critério de convergência estabelecido ser alcançado. O critério sugerido por Wang-Henke é dado por,

$$\tau = \sum_{j=1}^N [T_j^{(k)} - T_j^{(k-1)}]^2 \leq 0.01 * N \quad (2.45)$$

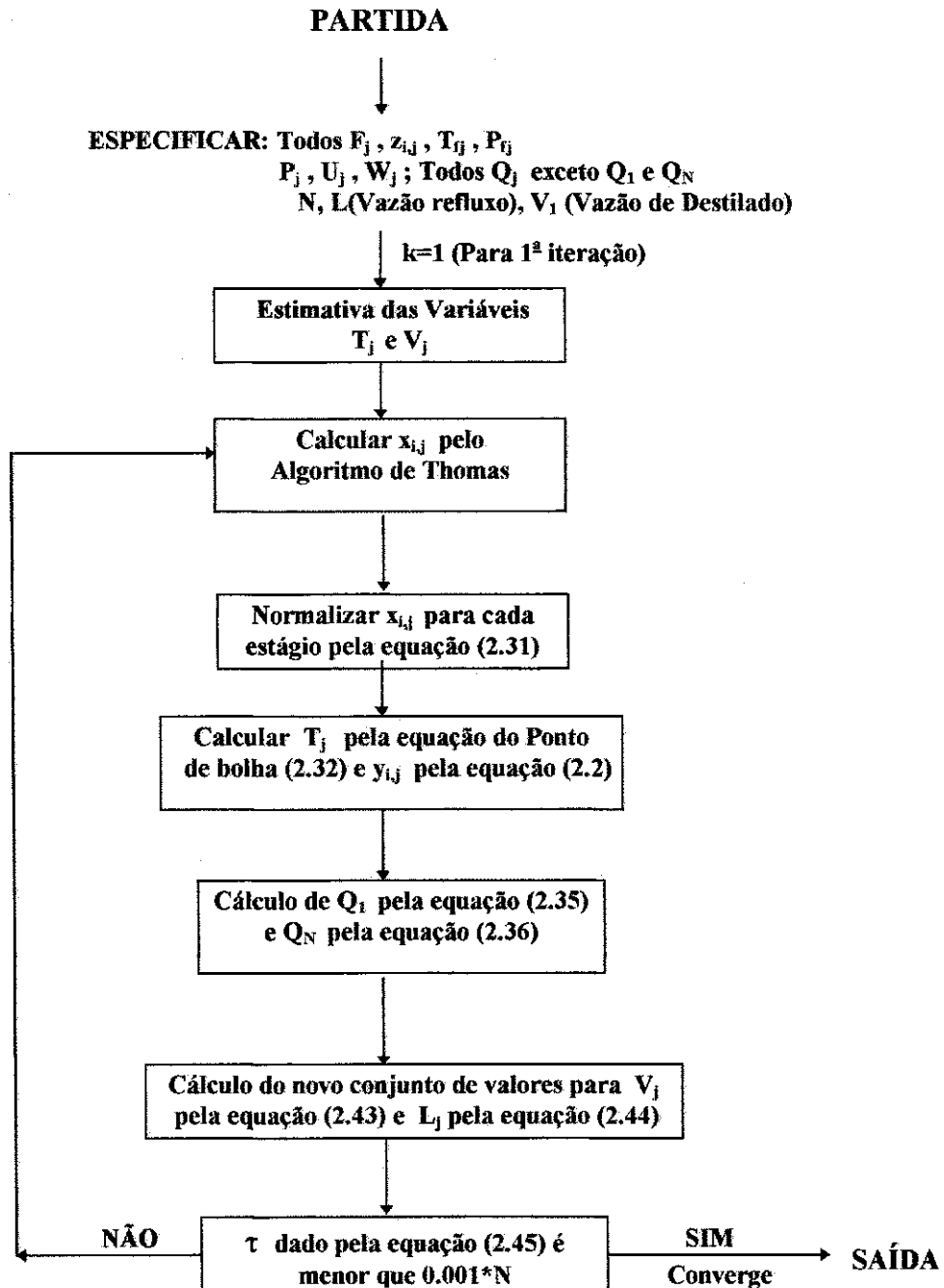


Figura 2.10- Diagrama de Blocos para o Método do Ponto de Bolha

2.4 Cálculo do Equilíbrio Líquido-Vapor

2.4.1 Introdução

Segundo SMITH & VAN NESS (1980), o problema fundamental do equilíbrio líquido-vapor aborda um sistema multicomponente, com C espécies não reatantes, cujas variáveis da regra das fases são T , P , $C-1$, frações molares na fase líquida e $C-1$ frações molares na fase vapor. Portanto, no equilíbrio líquido-vapor existem $2C$ variáveis.

A regra das fases é dada por,

$$F = 2 - \pi + C \quad (2.46)$$

onde F é a variância do sistema, π é o número de fases e C é o número de componentes. Aplicando a regra das fases ao problema ELV,

$$F = 2 - 2 + C \rightarrow F = C$$

portanto, apenas C entre as $2C$ variáveis são independentes, especificando as C variáveis da regra das fases, as C variáveis restantes podem ser determinadas pela resolução do sistema de C equações de equilíbrio na forma,

$$\hat{f}_i^V = \hat{f}_i^L \quad (i = 1, 2, \dots, C) \quad (2.47)$$

onde \hat{f}_i^V é a fugacidade do componente i na fase vapor e \hat{f}_i^L é a fugacidade do componente i na solução líquida.

Para um componente na fase vapor,

$$\hat{f}_i^V = y_i \cdot \hat{\phi}_i \cdot P \quad (2.48)$$

onde y_i e $\hat{\phi}_i$ são, respectivamente, a fração molar e o coeficiente de fugacidade do componente i na fase vapor e P é a pressão do sistema.

Para um componente na solução líquida,

$$\hat{f}_i^L = x_i \cdot \gamma_i \cdot f_i^O \quad (2.49)$$

onde x_i e γ_i são, respectivamente, a fração molar e o coeficiente de atividade do componente i na solução líquida e f_i^O é a fugacidade do componente i no estado padrão.

De acordo com o critério de equilíbrio, as expressões (2.48) e (2.49) devem ser iguais,

$$y_i \cdot \hat{\phi}_i \cdot P = x_i \cdot \gamma_i \cdot f_i^0 \quad (2.50)$$

Quando o estado padrão do componente i puro é baseado na regra de Lewis-Randall,

$$f_i^0 = f_i^L \quad (2.51)$$

onde f_i^L é a fugacidade do componente i puro dada por,

$$\ln \frac{f_i^L}{P} = \left(\frac{1}{R \cdot T} \right) \cdot \left[\int_0^P \left(V_i - \frac{R \cdot T}{P} \right) \cdot dP \right] \quad (2.52)$$

Para o cálculo da fugacidade do componente i puro à pressão P e temperatura T , separa-se a integral da Equação (2.52) em duas partes: a primeira parte fornece a fugacidade do vapor saturado à temperatura T e pressão de saturação P_i^{sat} ; a segunda parte fornece a correção devido à compressão da fase líquida a uma pressão P . Para uma dada pressão de saturação, a fugacidade do vapor saturado é igual a fugacidade do líquido saturado porque as fases saturadas estão em equilíbrio. Portanto, a equação (2.52) pode ser reescrita,

$$\ln \frac{f_i^L}{P} = \left[\left(\frac{1}{R \cdot T} \right) \cdot \int_0^{P_i^{sat}} \left(V_i - \frac{R \cdot T}{P} \right) \cdot dP + \left(\frac{1}{R \cdot T} \right) \cdot \int_{P_i^{sat}}^P \left(V_i^L - \frac{R \cdot T}{P} \right) \cdot dP \right] \quad (2.53)$$

A primeira integral da equação (2.53) fornece a fugacidade do vapor saturado.

Então,

$$\ln \frac{f_i^L}{P} = \ln \frac{f_i^{sat}}{P_i^{sat}} + \int_{P_i^{sat}}^P \frac{V_i^L}{R \cdot T} \cdot dP - \ln \frac{P}{P_i^{sat}} \quad (2.54)$$

rearranjando,

$$f_i^L = P_i^{sat} \cdot \phi_i^{sat} \cdot \exp \left(\int_{P_i^{sat}}^P \frac{V_i^L}{R \cdot T} \cdot dP \right) \quad (2.55)$$

onde $\phi_i^{sat} = \frac{f_i^{sat}}{P_i^{sat}}$, é o coeficiente de fugacidade do vapor saturado; o termo exponencial é

chamado correção de Poynting. Em geral, o volume é uma função da temperatura e pressão, mas para condições longe da região crítica, a fase líquida pode ser considerada como incompressível, neste caso a correção de Poynting é dada por,

$$\exp \left(\frac{V_i^L \cdot (P - P_i^{sat})}{R \cdot T} \right)$$

A correção de Poynting é uma função exponencial da pressão; é pequena para pressões baixas mas pode tornar-se grande a pressões altas ou baixas temperaturas. A Tabela 2.6 mostra os valores da correção de Poynting para um componente incompressível com $V_i^L = 100 \text{ cm}^3 / \text{mol}$ e $T = 300 \text{ K}$, PRAUSNITZ et al. (1988).

Tabela 2.6- Fatores de Correção de Poynting

$\Delta P = P - P_i^{\text{sat}}$ (bar)	Correção de Poynting
1	1.00405
10	1.04050
100	1.49900
1000	57.0000

Fonte: PRAUSNITZ et al. (1986).

2.4.2 Tipos de Problemas de Equilíbrio Líquido-Vapor

Segundo SMITH & VAN NESS (1987), os problemas de interesse no equilíbrio líquido-vapor enquadram-se em quatro classes:

Tipo I - Cálculo da temperatura e da composição no ponto de bolha

Dados	Cálculo
P	T
x_1, x_2, \dots, x_{C-1}	y_1, y_2, \dots, y_{C-1}

Tipo II - Cálculo da pressão e da composição no ponto de bolha

Dados	Cálculo
T	P
x_1, x_2, \dots, x_{C-1}	y_1, y_2, \dots, y_{C-1}

Tipo III - Cálculo da temperatura e da composição no ponto de orvalho

Dados	Cálculo
P	T
y_1, y_2, \dots, y_{C-1}	x_1, x_2, \dots, x_{C-1}

Tipo IV - Cálculo da pressão e da composição no ponto de orvalho

Dados	Cálculo
T	P
y_1, y_2, \dots, y_{C-1}	x_1, x_2, \dots, x_{C-1}

2.4.3 Método UNIFAC (Uniquac Functional Group Activity Coefficients)

O método UNIFAC foi originalmente desenvolvido por FREDENSLUND et al. (1975). É utilizado para prever o coeficiente de atividade de componentes abaixo do ponto crítico, temperatura entre 300 e 425 K, pressão moderada até 5 atm, líquidos miscíveis, misturas não eletrolíticas e não poliméricas REID et al. (1988).

O método UNIFAC utiliza o conceito de contribuição de grupo onde a mistura líquida é considerada como uma solução de grupos estruturais, tais como CH₃, OH, CO e outros que quando adicionados formam a molécula. Considerando que as propriedades físicas de um fluido seja a soma das contribuições individuais de cada grupo funcional é possível calcular as propriedades da mistura a partir das propriedades dos grupos estruturais, PRAUSNITZ et al. (1975).

O coeficiente de atividade γ_i de um componente na mistura consiste de uma contribuição configuracional devido às diferenças no tamanho molecular e uma contribuição da interação entre grupos devido às diferenças entre as forças moleculares,

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (2.56)$$

onde $\ln \gamma_i^C$ é a contribuição combinatorial e $\ln \gamma_i^R$ é a contribuição residual. O modelo UNIFAC combina dois modelos: UNIQUAC (Universal Quasi Chemical) e ASOG (Analytical Solution of Groups).

O modelo UNIQUAC fornece a parte combinatorial que leva em conta a não idealidade da fase líquida devido às diferenças no tamanho e forma das moléculas. É determinada somente pela composição, pelo tamanho e forma das moléculas; requer somente dados dos componentes puros,

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \cdot q_i \cdot \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \cdot \sum_j x_j \cdot l_j \quad (2.57)$$

$$l_i = \frac{z}{2} \cdot (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (2.58)$$

onde z é o número de coordenação que representa o número de moléculas vizinhas a considerada, os autores usaram $z=10$; os parâmetros de θ_i e ϕ_i representam, respectivamente, a fração de área e volume. São dados por:

$$\theta_i = \frac{q_i \cdot x_i}{\sum_j q_j \cdot x_j} \quad (2.59)$$

e

$$\phi_i = \frac{r_i \cdot x_i}{\sum_j r_j \cdot x_j} \quad (2.60)$$

onde x_i é a fração molar do componente i em solução; os parâmetros r_i e q_i são, respectivamente, medidas do volume e área superficial molecular de Van der Waals. São calculados como uma soma dos parâmetros de volume e de área dos grupos, dados por:

$$r_i = \sum_k v_k^i \cdot R_k \quad (2.61)$$

e

$$q_i = \sum_k v_k^i \cdot Q_k \quad (2.62)$$

onde v_k^i é o número de grupos do tipo k na molécula i . Os parâmetros dos grupos R_k e Q_k são obtidos do volume e área superficial de Van der Waals

$$R_k = \frac{\text{volume de Van der Waals}}{15,17} \quad (2.63)$$

$$Q_k = \frac{\text{area de Van der Waals}}{2,5 \times 10^9} \quad (2.64)$$

o fator de normalização 15,17 e $2,5 \times 10^9$ são determinados pelo volume e área superficial externa de CH_2 no polietileno.

O modelo ASOG fornece a parte residual dada que leva em conta a não idealidade da fase líquida devido às interações intermoleculares,

$$\ln \gamma_i^R = \sum_k v_k^{(i)} \cdot (\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)}) \quad (2.65)$$

onde Γ_k é o coeficiente de atividade residual do grupo k na solução e $\Gamma_k^{(i)}$ é o coeficiente de atividade residual do grupo k em uma solução de referência consistindo somente de moléculas do componente i . O coeficiente de atividade do grupo k na molécula i depende da molécula i onde k está situado. Por exemplo, $\Gamma_k^{(i)}$ em:

- etanol $\begin{cases} 50\% \text{ do grupo COH} \\ 50\% \text{ do grupo CH}_3 \end{cases}$

- n-butanol $\begin{cases} 25\% \text{ do grupo COH} \\ 50\% \text{ do grupo CH}_2 \\ 25\% \text{ do grupo CH}_3 \end{cases}$

Os parâmetros Γ_k são dados por,

$$\ln \Gamma_k = Q_k \cdot \left[1 - \ln \sum_m \theta_m \cdot \Psi_{mk} - \sum_m \frac{\theta_m \cdot \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \cdot \Psi_{nm}} \right] \quad (2.66)$$

a equação acima também é empregada para $\ln \Gamma_k^{(i)}$. A fração de área do grupo m (θ_m) é calculada por,

$$\theta_m = \frac{Q_m \cdot X_m}{\sum_n Q_n \cdot X_n} \quad (2.67)$$

onde X_m é a fração molar do grupo m na solução líquida dada por,

$$X_m = \frac{\sum_i x_i \cdot v_{mi}}{\sum_j x_j \cdot \sum_k v_{kj}} \quad (2.68)$$

Os parâmetros de interação entre grupos Ψ_{mn} são dados por,

$$\Psi_{mn} = \exp\left(-\frac{U_{mn} - U_{nn}}{R \cdot T}\right) = \exp\left(-\frac{a_{mn}}{T}\right) \quad (2.69)$$

onde U_{mn} é uma medida da energia de interação entre os grupos m e n. Os parâmetros de interação entre grupos a_{mn} são obtidos de dados experimentais de equilíbrio entre fases.

2.5 Trocador de Calor

2.5.1 Conceito

Trocador de calor é qualquer equipamento que promova a troca de calor entre dois fluidos, através de uma interface metálica. Nos processamentos industriais, o trocador de calor é empregado para economizar calor e atender às necessidades de processo GHIZZE (1989).

2.5.2 Classificação dos Trocadores de Calor Quanto ao Serviço

A designação dada ao equipamento deriva das modificações no estado físico sofrida pelo fluido de processo ou em sua condição de temperatura. A classificação é dada na Tabela 2.7, PERRY & GREEN (1985).

Tabela 2.7- Classificação dos Trocadores de Calor

Tipo	Descrição
Aquecedor (Heater)	Fornece calor sensível a um fluido de processo utilizando vapor de água condensante ou fluido térmico como o Dowtherm
Condensador (Condenser)	Retira calor de um vapor ou mistura de vapores (podendo inclusive, conter gases não condensáveis) provocando a sua condensação que pode ser realizada parcial ou totalmente.
Evaporador (Evaporator)	Evapora o líquido de uma dada solução aumentando a sua concentração, utilizando vapor de água ou fluido térmico para o aquecimento.
Gerador de Vapor (Steam Generator)	Gera vapor de água aproveitando o calor excedente de um fluido de processo.
Refervedor (Reboiler)	Equipamento que opera ligado ao fundo de uma torre de fracionamento, fornecendo o calor necessário a destilação. O meio de aquecimento empregado pode ser o vapor de água ou fluido térmico.
Refrigerador (Chiller)	Resfria um fluido de processo a uma temperatura mais baixa do que, aquela que é atingida com o uso de água de resfriamento ou o ar atmosférico. Utiliza-se do efeito frigorífico de certos fluidos como o freon, amônia, etc.
Resfriador (Cooler)	Resfria um líquido ou gás utilizando água de resfriamento ou ar atmosférico.
Superaquecedor (Superheater)	Aquece um vapor acima de sua temperatura de saturação.
Trocador de Calor (Heater Exchanger)	São equipamentos onde a troca de calor é feita entre dois fluidos de processo.
Vaporizador (Vaporizer)	Cede calor ao líquido de processo, vaporizando-o total ou parcialmente.

- Fonte PERRY & GREEN, (1985).

2.5.3 Descrição Geral dos Trocadores Tipo Casco e Tubos

São constituídos basicamente de um feixe de tubos, inseridos em uma carcaça. Um dos fluidos circula entre a carcaça e o exterior do feixe tubular (lado do casco) orientado por meio de chicanas. O outro fluido circula no interior dos tubos (lado dos tubos), sendo distribuídos e coletados através de cabeçotes instalados nas extremidades do feixe tubular (Figura 2.11).

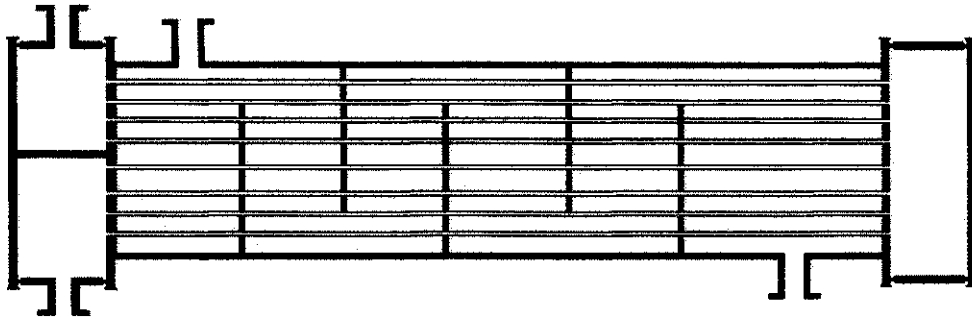


Figura 2.11- Esquema de um Trocador de Calor Tipo Casco e Tubos

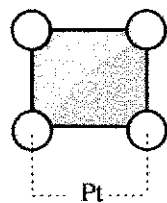
O feixe tubular é composto por: tubos, chicanas, tirantes, espaçadores, etc.

Os tubos são classificados pelo diâmetro externo e pela espessura de parede, expressa na escala BWG (Birmingham Wire Gage). As características são:

- um calibre BWG fornece a mesma espessura de parede, qualquer que seja o diâmetro do tubo;
- o diâmetro externo do tubo corresponde exatamente ao diâmetro nominal;
- para um mesmo diâmetro, o aumento do calibre BWG produz uma redução na espessura de parede, conseqüentemente ocorre um aumento do diâmetro interno do tubo.

Espelhos são discos metálicos instalados nas extremidades dos tubos, constituindo-se barreiras separadoras entre o fluido dos tubos e do casco. A disposição dos tubos no espelho é feita obedecendo arranjos padronizados, que visam conter o maior número possível de tubos em uma dada carcaça, propiciando ao mesmo tempo elevados coeficientes de transferência de calor e baixa queda de pressão. Os arranjos básicos são:

- Arranjo Quadrado - é empregado quando se deseja baixa queda de pressão ou limpeza mecânica externa (Figura 2.12);



Pt - é o passo tubular, ou seja, é a distância de centro a centro entre tubos adjacentes.

C - é a folga entre tubos.

Figura 2.12- Passo Quadrado

- Passo Triangular - é adequado para fluidos limpos ou cujas incrustações possam ser removidas por limpeza química (Figura 2.13);

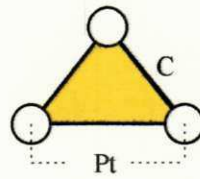


Figura 2.13- Passo Triangular

Chicanas são placas instaladas transversalmente ao feixe tubular, fixadas e espaçadas igualmente mediante um sistema de tirantes e espaçadores. Cumprem as seguintes funções:

- evitar a flexão dos tubos;
- aumentar a turbulência do fluido do casco;
- evitar a formação de caminhos preferenciais do fluido do casco, reduzindo com isso, o coeficiente de transferências de calor.

2.5.4 Cálculos de Trocadores Multitubular

Kern (1980), analisa as seguintes situações envolvendo o cálculo de trocador de calor casco e tubo:

- avaliação da adaptação de um trocador para um novo serviço;
- projeto de um trocador para o atendimento das condições exigidas pelo processo.

2.5.4.1 Algoritmo para Avaliação do Trocador para um Novo Serviço

1. fazer o levantamento dos dados de processo disponíveis;
2. fazer o balanço térmico;
3. calcular a diferença de temperatura real;

4. obter os dados de área de troca e demais parâmetros geométricos necessários ao cálculo do trocador;
5. calcular os coeficientes de transferência de calor interno e externo, coeficientes globais limpo e sujo e fator de incrustação do equipamento;
6. comparar o fator de incrustação calculado com o fator de incrustação de projeto (valor desejado);
se $R_D \geq R_{D \text{ Proj.}} \Rightarrow$ o trocador atende termicamente;
se $R_D < R_{D \text{ Proj.}} \Rightarrow$ o trocador não é satisfatório.
7. se o equipamento for satisfatório termicamente, deve-se checar se as quedas de pressão para o lado do casco e dos tubos são compatíveis com os valores exigidos pelo sistema. Caso sejam, o equipamento é satisfatório para o serviço.

2.5.4.2 Algoritmo para o Projeto de um Trocador de Calor

1. especificação das condições de processo:
 - composições das correntes;
 - vazões;
 - temperaturas;
 - pressões.
2. obtenção das propriedades físicas (μ , ρ , k , c_p) para a faixa de temperatura e pressões de interesse;
3. escolha do tipo de equipamento a ser empregado;
4. estimativa preliminar das dimensões do trocador, utilizando um coeficiente de transferência de calor global, adequado aos fluidos e ao tipo de serviço executado;
5. propor um arranjo geral para o equipamento (diâmetro e comprimento dos tubos, afastamento entre chicanas e diâmetro do casco);
6. escolher a localização mais adequada para os fluidos (lado do casco ou lado dos tubos), baseado em critérios.
7. efetuar avaliação do trocador, conforme descrito no item 2.4.5.1;

8. baseados nos resultados da etapa 7, podem ser escolhidas novas configurações até que se tenha um projeto que atenda satisfatoriamente aos requisitos de carga térmica e queda de pressão.

2.6 Sistema de Compressão

Compressores são máquinas operatrizes de fluxo compressível. São utilizados para proporcionar a elevação de pressão do gás ou escoamento gasoso. Normalmente essa elevação de pressão é superior a 2,5 atm PERRY & CHILTON (1980).

Segundo BARBOSA (1984), quando um compressor é instalado em um determinado sistema, algumas condições de funcionamento lhe são impostas:

- pressão de sucção;
- temperatura de sucção;
- pressão de descarga;
- natureza do gás, definida através de sua composição química ou, para um gás ideal, através do peso moléculas e expoente adiabático.

São estas condições que a cada instante, governam o funcionamento do compressor.

Resultam da interação do compressor com o sistema:

- vazão;
- potência de compressão;
- temperatura de descarga.

A análise termodinâmica dos compressores tem como finalidade as determinações da potência de compressão e da temperatura de descarga do gás, através do conceito de rendimento termodinâmico. Este rendimento é um parâmetro determinado pelo fabricante do compressor e fornecido ao usuário com o objetivo de possibilitar os cálculos.

2.6.1 Teoria de compressão

Em qualquer processo de compressão contínua a relação funcional entre a pressão e o volume é dada por:

$$P \cdot V^n = \text{constante} \quad (2.70)$$

onde o expoente n assume os seguintes valores:

- processo isométrico, $n = \infty$;
- processo isobárico, $n = 0$;
- processo isotérmico, $n = 1$;
- processo isoentrópico, $n = k = \frac{c_p}{c_v}$.

Quando o expoente n é diferente de 0, 1, k e ∞ ; o processo é denominado politrópico.

2.6.2 Trabalho de Compressão

O trabalho de compressão é obtido a partir do balanço de massa em escoamento permanente, desprezando as variações de energia cinética e potencial gravitacional,

$$W_e = - \int_{P_1}^{P_2} V dP \quad (271)$$

Avaliando a integral e definindo o rendimento termodinâmico para cada processo, temos:

- Trabalho Isotérmico: é calculado ao longo de uma evolução isotérmica,

$$W_{is} = R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{P_2}{P_1} \right) \quad (2.72)$$

$$\eta_{is} = \frac{W_{is}}{W_{real}} \quad (2.73)$$

- Trabalho Adiabático: é calculado ao longo de uma evolução adiabática,

$$W_k = - \frac{k}{k-1} \cdot R \cdot T_1 \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right] \quad (2.74)$$

$$\eta_k = \frac{W_k}{W_{real}} \quad (2.75)$$

- Trabalho Politrópico: é calculado ao longo de uma evolução politrópica que passa pelos estados inicial e final de um processo real,

$$W_p = -\frac{n}{n-1} \cdot R \cdot T_1 \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right] \quad (2.76)$$

$$\eta_p = \frac{W_p}{W_{real}} \quad (2.77)$$

onde P_1 , P_2 são, respectivamente, as pressões de sucção e descarga; T_1 é a temperatura de sucção; R é a constante universal dos gases; n e k são, respectivamente, os expoentes politrópico e adiabático.

Os trabalhos ideais isotérmico e adiabático dependem apenas das características do sistema. Enquanto que o trabalho ideal politrópico depende do estado final do gás, que resulta da interação máquina-sistema.

O rendimento politrópico resulta na melhor apreciação da qualidade do projeto, visto que provém da comparação entre dois processos cujos estados iniciais e final coincidem.

CAPÍTULO III

3. MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 Material Utilizado

Utilizou-se o simulador de processo CHEMCAD II-V.2.2, desenvolvido pela CHEMSTATIONS INC., para ser implementado em microcomputadores IBM-PC, XT, AT, PS/2 ou compatíveis. Permite projetar e avaliar diversos equipamentos de uma unidade industrial, utilizando modelos matemáticos que reproduzem o comportamento real desses equipamentos.

Neste trabalho foi utilizado um microcomputador tipo PC-XT com winchester de 35 Mb e co-processor matemático INTEL 8087.

3.2 Metodologia da Simulação

O CHEMCAD II utiliza uma seqüência de módulos para o projeto e avaliação dos equipamentos, ou seja, divide o problema de simulação global da unidade em suas partes (torres, trocadores, compressores, válvulas, etc.), exigindo a especificação completa de cada equipamento. A seqüência de cálculo de cada módulo é pré-determinada pelo usuário com passagem automática para outro módulo quando a convergência é alcançada.

Procede-se a simulação em duas partes: destilação convencional e destilação com recompressão mecânica do vapor (RMV). A primeira parte simula a unidade convencional (Figura 3.1), analisando a influência da localização do prato de alimentação para um dado número de estágios sobre a carga térmica e razão de refluxo. A partir da análise anterior, estuda-se o comportamento da razão de refluxo em função do número de estágios com o objetivo de determinar o refluxo mínimo e a faixa de análise com relação ao número de estágios para a destilação com recompressão mecânica do vapor. Em seguida avalia-se a flexibilidade do sistema, estudando a influência da temperatura de alimentação, das composições da alimentação e do destilado sobre a carga térmica e razão de refluxo.

A segunda parte simula as unidades com recompressão mecânica do vapor (Figuras 3.2 e 3.3) com o objetivo de estudar a influência do número de estágios, das composições da alimentação e do destilado sobre a carga térmica, razão de refluxo e trabalho de compressão. A Figura 3.2 identificada como RMVH mostra um esquema no qual o tambor de refluxo opera na pressão de descarga do compressor, ou seja, 4,0 atm. A Figura 3.3 identificada como RMVL apresenta um esquema no qual o tambor de refluxo opera na pressão da coluna.

No estudo da destilação convencional para a análise da influência do prato de alimentação, as especificações de processos são as de COLLURA & LUYBEN (1988), apresentadas na Tabela 2.2 com exceção da temperatura de topo e dos dados operacionais da coluna RMV. Além dessas especificações, fixou-se a temperatura de alimentação em 210 °F, número de estágio em 30, e as pressões de topo e alimentação em 1 e 2 atm, respectivamente. Na avaliação da flexibilidade, manteve-se as especificações citadas acima porém, variando-se em cada caso as composições da alimentação e destilado.

Para a destilação com recompressão mecânica do vapor na análise da influência do número de estágios, manteve-se as especificações da Tabela 2.2 com exceção da pressão de descarga do compressor. Além dessas especificações, adotou-se eficiência politrópica de 70%, temperatura de alimentação (T_{F1}) em 90 °F, pressões de alimentação, topo e descarga do compressor em 2,0, 1,0 e 4,0 atm, respectivamente. Na avaliação da flexibilidade manteve-se as especificações citadas e foram utilizados os mesmos dados operacionais em termos de composição da alimentação e destilado da análise da flexibilidade da unidade convencional.

Em todas as simulações fixou-se em cada prato uma eficiência de 50% e uma queda de pressão de 10 mmHg.

Quanto ao modelo termodinâmico, utilizou-se o modelo UNIFAC para representar a não idealidade da fase líquida. Como a coluna opera em pressão baixa, a hipótese da idealidade da fase vapor não afeta significativamente os resultados. Os dados dos componentes puros, os parâmetros do modelo UNIFAC e as correlações empregadas foram obtidas diretamente do banco de dados ou estimados pelo simulador.

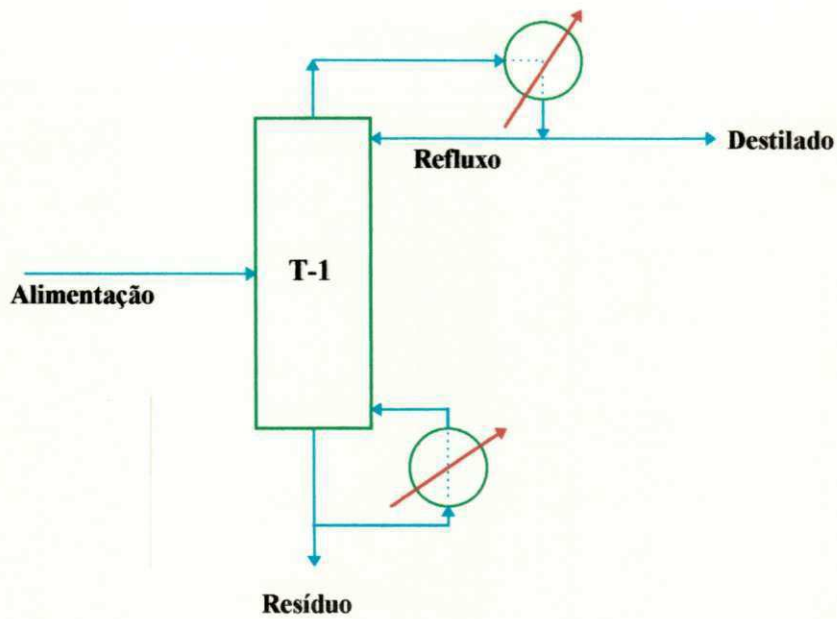


Figura 3.1- Coluna de Destilação Convencional

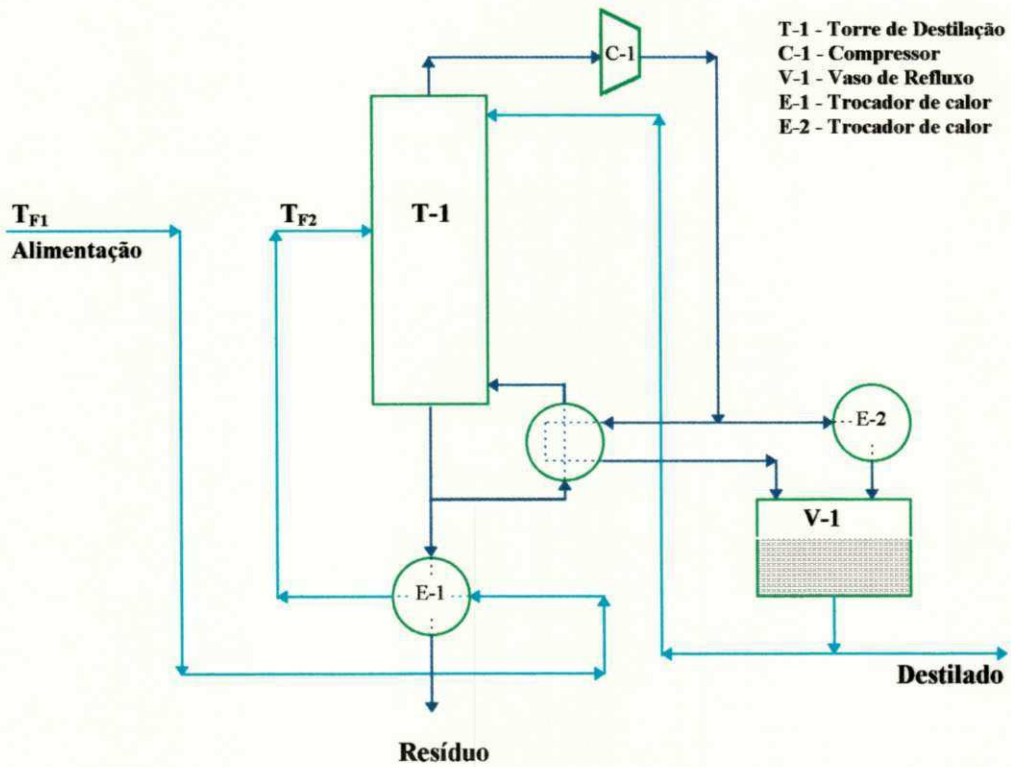


Figura 3.2- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMVH)

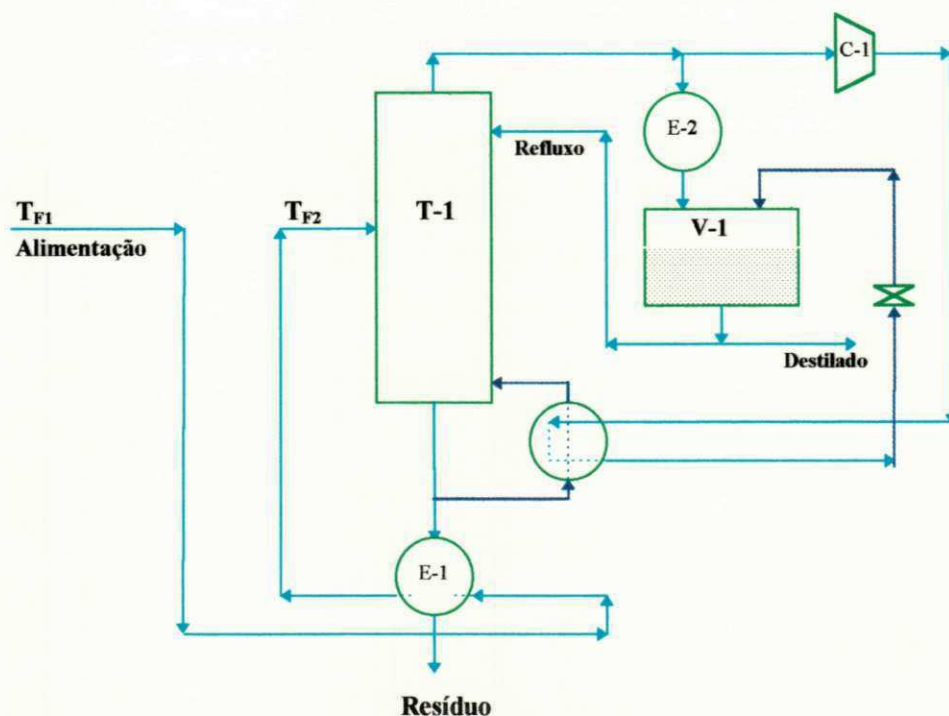


Figura 3.3- Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMVL)

3.3 Métodos Utilizados pelo Simulador

3.3.1 Torre de Destilação

O “Módulo Tower” é usado para a simulação e projeto de colunas de destilação e absorção, utilizando métodos rigorosos para o cálculo do equilíbrio líquido-vapor multi-componente. Oferece grande flexibilidade para o seu uso pois, pode-se especificar o condensador, refeedor ou as condições dos pratos (estágios teóricos). Sua convergência é muito rápida entretanto, não é recomendado se uma das seguintes condições ocorrer:

- a coluna de destilação possuir mais de 100 estágios;
- a eficiência do prato ser diferente de 1.

O “Módulo Tower” utiliza algoritmos internos e externos para o cálculo estágio a estágio. Basicamente, o laço externo calcula a constante de equilíbrio e a entalpia, utilizando modelos termodinâmicos. O laço interno faz o cálculo da Equação MESH⁽¹⁾

⁽¹⁾ MESH são as equações que aparecem no modelo de estágio de equilíbrio.

utilizando os valores calculados no laço externo e as especificações do usuário, gerando novos valores de entalpia e das constantes de equilíbrio. Os valores calculados no algoritmo interno são comparados com os valores externos até atingir a convergência desejada.

3.3.2 Sistema de Compressão

O “Módulo Compressor” simula operações isoentrópica e politrópica. As variáveis especificadas são: pressão final, razão de compressão e trabalho requerido. Se a pressão final ou a razão de compressão for especificada, as condições da corrente de saída e o trabalho requerido são calculados. Se o trabalho requerido é especificado, a pressão final e as condições da corrente de saída são calculadas. A eficiência adiabática pode ser obtida se a pressão final e o trabalho de compressão forem especificados.

Para a compressão politrópica, o trabalho é calculado pelas seguintes equações:

$$\text{Polyc} = \frac{(k-1)/k}{P_{\text{eff}}} \quad k = \frac{c_p}{c_v} \quad W = \frac{F \cdot Z \cdot R \cdot T}{\text{Polyc}} \cdot \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\text{Polyc}} - 1 \right]$$

onde:

$$\text{polyc} = \frac{n-1}{n}$$

F = fluxo

Z = fator de compressibilidade

R = constante universal dos gases

P_1 = pressão inicial

P_2 = pressão final

n = coeficiente politrópico

k = coeficiente adiabático

P_{eff} = pressão efetiva

3.3.3 Trocador de Calor

O “Módulo HTXR” é usado para simular um trocador com uma ou duas correntes de entrada. Para uma corrente de entrada, o trocador é utilizado como aquecedor e resfriador. Se o trocador possui duas correntes de entrada, dependendo das especificações, formas de operações mais complicadas são avaliadas, tais como: cálculo de utilidades, avaliação do trocador para um novo serviço e projeto do equipamento.

3.3.4 Válvulas

O “Módulo VALV” faz um flash adiabático da corrente de entrada. A pressão final, queda de pressão, temperatura do ponto de bolha ou de orvalho podem ser especificadas. No caso da especificação do ponto de bolha ou de orvalho, o módulo inicialmente determina a pressão correspondente e em seguida a performance do flash adiabático. O módulo VALV também é utilizado como um separador de fases se duas ou mais correntes de saída são especificadas.

3.3.5 Divisor

O “Módulo DIVI” produz a partir de uma corrente de entrada diversas correntes de saída com a mesma composição e propriedades intensivas. O fluxo molar ou a composição molar podem ser especificadas.

3.4 Propriedades Termodinâmicas

O CHEMCAD II fornece uma variedade de opções para o cálculo da constante de equilíbrio e entalpia.

3.4.1 Constante de Equilíbrio

A constante de equilíbrio em uma mistura líquido-vapor multicomponente é definida como:

$$k_i = \frac{y_i}{x_i}$$

onde k_i é a constante de equilíbrio; y_i e x_i são respectivamente, as composições das fases vapor e líquida em equilíbrio. O cálculo da constante de equilíbrio depende do modelo termodinâmico selecionado pelo usuário; a Tabela 3.1 apresenta as possibilidades de seleção mais importantes para a destilação e utilizadas no simulador CHEMCAD II.

O cálculo da constante de equilíbrio pelo método do coeficiente de atividade é dado pela seguinte expressão:

$$k_i = \frac{\gamma_i \cdot f_i^{\text{ol}}}{P \cdot \hat{\theta}_i^v}$$

onde:

γ_i - é o coeficiente de atividade do componente i na fase líquida;

P - é a pressão do sistema;

f_i^{ol} - é a fugacidade padrão do componente i;

$\hat{\theta}_i$ - é o coeficiente de fugacidade do componente i na fase vapor.

Tabela 3.1 - Métodos para o Cálculo da Constante de Equilíbrio

Constante de Equilíbrio			
Equação de Estado	Soave-Redlich-Kwong Grayson-Streed/Chao-Seader Peng-Robinson API Soave-Redlich-Kwong Soave-Redlich-Kwong modificada	$k_i = \frac{\hat{\phi}_i^l}{\hat{\phi}_i^v}$	São usadas, principalmente, para sistemas de hidrocarbonetos.
Semi-Empírico	Grayson-Streed modificada por Chao-Seader	$k_i = \frac{V_i^o \cdot \gamma_i}{\hat{\phi}_i^v}$	É usada para sistemas de hidrocarbonetos e frações pesadas do petróleo.
Método do Coeficiente de Atividade	UNQUAC UNIFAC Wilson Van Laar Margules NRTL Scatchard-Hildebrand Pressão de Vapor	$k_i = \frac{F_i^o \cdot \gamma_i}{P \cdot \hat{\phi}_i^v}$	São usadas em sistemas químicos e para componentes não polares
		$k_i = \frac{p_i^{\text{sat}}}{P}$	É usada quando as fases vapor e líquida se comportam idealmente.

fonte: CHEMCAD II

Os coeficientes de atividade das espécies são calculados através do modelo UNIFAC (ver item 2.4.3, para a descrição desse método).

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R$$

onde $\ln \gamma_i^C$ e $\ln \gamma_i^R$ são respectivamente, os coeficientes de atividade combinatorial e residual.

Os coeficientes de fugacidade da fase vapor são determinados pela equação de Soave-Redlich-Kwong (Tabela 3.1). No estado padrão eles são definidos pela seguinte expressão:

$$f_i^0 L = P_i^{\text{sat}} \cdot \phi_i \cdot \exp\left[\left(P - P_i^{\text{sat}}\right) \cdot \frac{V_i}{R \cdot T}\right]$$

onde:

P_i^{sat} - é a pressão de vapor do componente i na temperatura do sistema;

P - é a pressão do sistema;

V_i - é o volume molar do componente i puro;

ϕ_i - é o coeficiente de fugacidade do componente i puro.

R - é a constante universal dos gases;

T - é a temperatura do sistema.

A pressão de vapor do componente i puro é obtida a partir da equação de Antoine,

$$\ln P_i^{\text{sat}} = A - \frac{B}{T + C}$$

onde A, B e C são constantes características de cada componente. T é a temperatura do sistema.

Para testar a representatividade dos resultados obtidos por este modelo (Tabela B-1 do apêndice B-1) foi traçado uma curva de equilíbrio (Figura 3.4) comparando-se estes dados com os experimentais. Observa-se que os dados obtidos são de excelente confiabilidade.

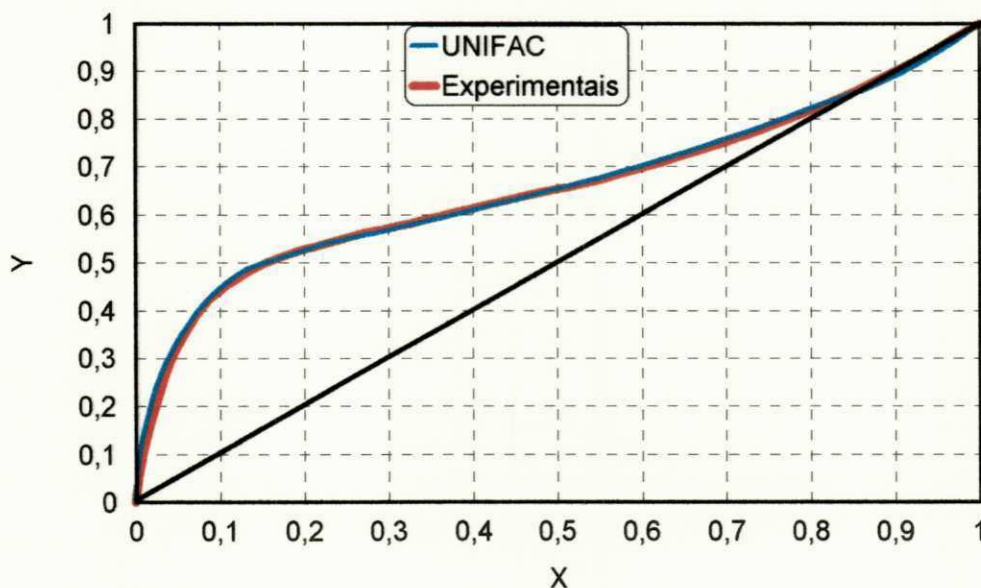


Figura 3.4- Comparação Entre os Dados Obtidos pelo Simulador e Experimentais.

CAPÍTULO IV

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Destilação Convencional

Os resultados das simulações são mostrados nas Tabelas 4.1 e 4.2. Os dados da Tabela 4.1 foram obtidos fixando o número de estágios e avaliando a localização ótima do prato de alimentação (definida neste trabalho como aquela em que se obtém a menor razão de refluxo para uma determinada especificação). As especificações de processos utilizadas são mostradas na Tabela 2.2.

A Tabela 4.2 mostra a influência da temperatura de alimentação e das composições da alimentação e destilado. Manteve-se as especificações da Tabela 2.2, exceto o parâmetro analisado em cada caso. Além disso, fixou-se o número de estágios em 30 (número de estágio ótimo), pressão de alimentação em 2 atm e alimentação no ponto ótimo.

4.1.1 Localização da Alimentação

As Figuras 4.1 e 4.2 mostram como a razão de refluxo e carga térmica variam em função da localização do prato de alimentação tendo como parâmetro o número de estágios. Observa-se que a localização do prato de carga exerce influência significativa sobre a carga térmica quando o número de estágios está próximo ao valor mínimo, tornando-se independente, na faixa de análise do prato de carga, para número de estágios acima de 25.

Este comportamento se deve ao número reduzido de estágios de retificação, pois a alimentação entrando em uma bandeja cuja concentração não está próxima à da alimentação ocorre uma contaminação por efeito de mistura, alterando os perfis de temperatura e concentração ao longo da coluna, perdendo com isto, a eficiência de separação. Portanto, necessita-se aumentar a razão de refluxo, o que implica em um aumento da carga térmica para realizar a separação especificada.

Tabela 4.1 - Resultados das Simulações para a Coluna Convencional

Estágios	Prato de Alimentação	Razão de Refluxo	Carga Térmica		Queda de Pressão (atm)
			(MBtu/h)	(GJ/h)	
15	7	35,590	290,330	306,298	0,19
	8	12,490	108,291	114,247	
	9	9,123	81,760	86,257	
	10	8,938	80,299	84,716	
	11	12,190	105,930	111,756	
20	8	11,234	99,079	104,528	0,26
	10	4,838	48,682	51,359	
	12	4,567	46,557	49,117	
	13	5,278	52,147	55,015	
	14	6,418	61,131	64,493	
25	11	3,714	40,397	42,619	0,32
	12	3,314	37,246	39,294	
	13	3,210	36,426	38,429	
	14	3,376	37,732	39,807	
	15	3,616	39,630	41,809	
30	13	2,916	34,745	36,656	0,39
	14	2,792	33,770	35,627	
	15	2,805	33,870	35,733	
	16	2,875	34,424	36,318	
	17	2,976	35,221	37,158	
35	14	2,726	33,869	35,732	0,46
	15	2,667	33,407	35,244	
	16	2,658	33,330	35,163	
	17	2,663	33,362	35,197	
	18	2,679	33,490	35,332	
40	18	2,626	33,584	35,431	0,52
	19	2,621	33,548	35,393	
	20	2,619	33,529	35,373	
	21	2,620	33,533	35,377	
	22	2,627	33,589	35,437	
50	25	2,574	34,218	36,100	0,65
	27	2,562	34,126	36,003	
	29	2,553	34,053	35,926	
	31	2,552	34,044	35,916	
	33	2,573	34,210	36,092	

Tabela 4.2 - Resultados das Simulações para a Destilação Convencional

Temperatura de Alimentação		Razão de Refluxo	Carga Térmica	
°F	°C		MBtu/h	GJ/h
100	37,78	2,343	57,110	60,252
120	48,89	2,365	53,432	56,371
140	60,00	2,388	47,745	50,371
160	71,11	2,412	43,058	45,426
180	82,22	2,505	38,892	41,031
200	93,33	2,658	35,183	37,118
220	104,44	2,975	32,733	34,533
240	115,55	5,707	28,174	29,724
Composição da Alimentação		Razão de Refluxo	Carga Térmica	
(%) molar	(%) peso		MBtu/h	GJ/h
2,5	6,15	3,15	32,22	33,99
2,7	6,62	2,95	32,93	34,74
2,9	7,09	2,79	33,77	35,63
3,2	7,79	2,63	35,41	37,36
Composição do Destilado		Razão de Refluxo	Carga Térmica	
(%) molar	(%) peso		MBtu/h	GJ/h
81	91,59	2,65	33,42	35,26
83	92,58	2,79	33,77	35,63
85	93,54	4,03	42,57	44,91
87	94,47	12,20	102,57	108,21

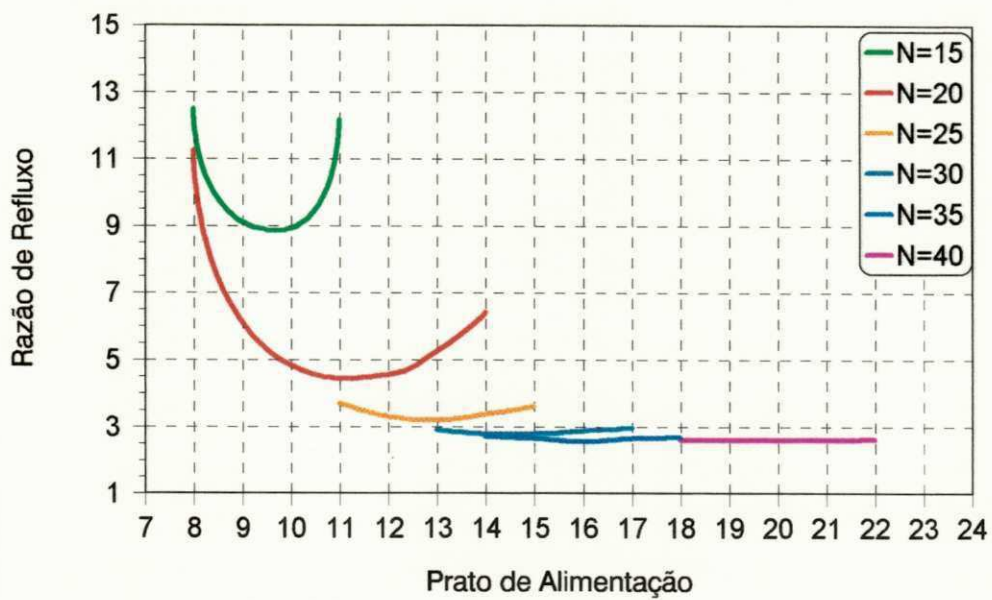


Figura 4.1 - Influência do Estágio de Alimentação sobre a Razão de Refluxo

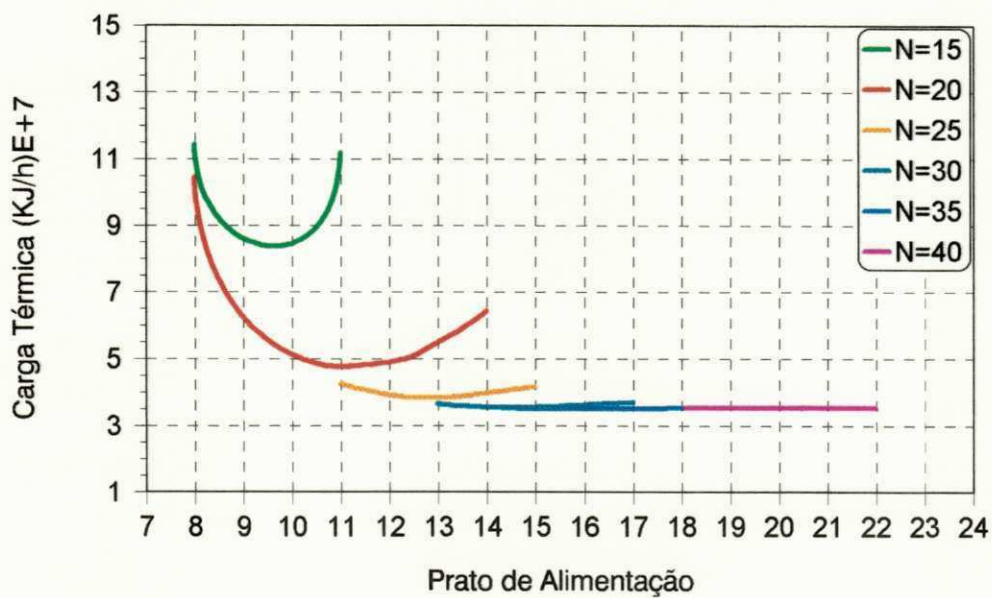


Figura 4.2- Influência do Estágio de Alimentação sobre a Carga Térmica

4.1.2 Razão de Refluxo

Quando se projeta colunas de destilação, o número de estágios necessários para realizar uma determinada separação depende da escolha do refluxo de operação. Então, a otimização do refluxo torna-se um problema onde o objetivo é operar a custos mínimos mas garantindo que os produtos estejam dentro da especificação. Estudos realizados indicam que o refluxo ótimo de projeto está situado entre 1,1 a 1,5 vezes o refluxo mínimo, PERRY & GREEN (1985).

O estudo do comportamento do número de estágios em função da razão de refluxo tem como objetivo a obtenção do refluxo mínimo e definição da faixa de análise com relação ao número de estágios para a destilação com recompressão mecânica do vapor (RMV). Observa-se na Figura 4.3, que o refluxo mínimo é aproximadamente 2,55. Então de acordo com o parágrafo anterior, encontra-se o valor da razão de refluxo ótima de operação entre 2,8 a 3,8; correspondendo a um número de estágios entre 22 a 30. Neste trabalho, para maior flexibilidade, adota-se a faixa de 20 a 35 estágios para a análise da destilação com recompressão mecânica do vapor.



Figura 4.3- Influência da Razão de Refluxo sobre o Número de Estágios

4.1.3 Temperatura de Alimentação

O comportamento da carga térmica e razão de refluxo em função da temperatura de alimentação é mostrado na Figura 4.4. Verifica-se que para uma determinada quantidade de alimentação, à medida que esta é aquecida ocorre um aumento na razão de refluxo e uma diminuição na carga térmica. Este efeito pode ser explicado, tomando como base uma temperatura na Figura 4.4; por exemplo, considere a temperatura de alimentação igual a 120 °F, para este ponto a carga está sub-resfriada pois a temperatura de ponto de bolha à pressão de 2 atm é igual a 234,4 °F. Portanto, a mistura deve receber calor para atingir a saturação e este calor é proveniente da condensação de uma parte do vapor ascendente na coluna. O efeito final é o aumento da carga térmica do refeedor em virtude do aumento da vazão de líquido na seção de esgotamento e uma diminuição da razão de refluxo em virtude da redução da vazão de vapor na seção de retificação.

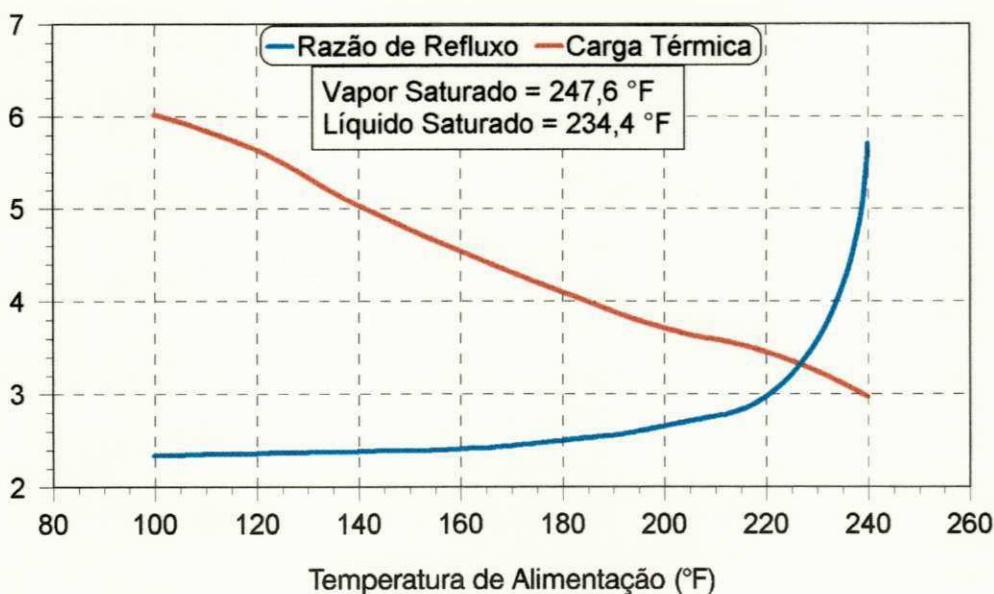


Figura 4.4- Influência da Temperatura de Alimentação sobre a carga Térmica e Razão de Refluxo

4.1.4 Composição da Alimentação

A Figura 4.5 apresenta o efeito da composição do etanol na alimentação sobre a carga térmica e razão de refluxo. Observa-se um comportamento inverso com relação a quantidade de etanol na alimentação, entre a carga térmica e razão de refluxo. Isto significa que um aumento da composição do etanol produz uma diminuição da temperatura de saturação da alimentação. Portanto, a entrada dessa corrente na coluna altera o perfil de temperatura, ou seja, diminui a temperatura em cada estágio, sendo necessário um aumento da carga térmica para manter o perfil de temperatura e atingir a mesma especificação de processo. No caso da razão de refluxo, o comportamento é inverso, pois a alimentação entra na coluna com maior pureza necessitando menor razão de refluxo para efetuar a mesma separação.

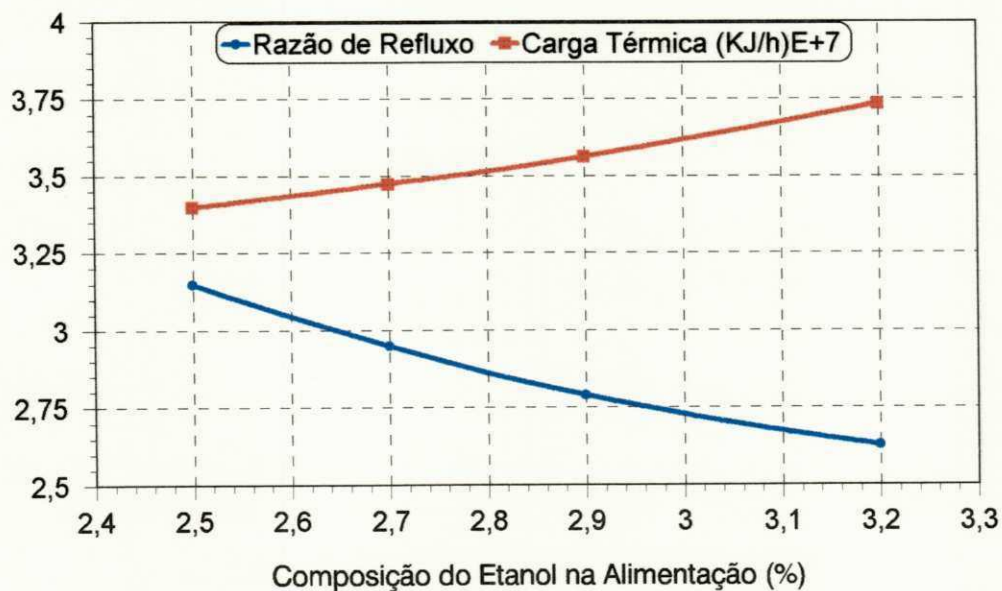


Figura 4.5- Influência da Composição do Etanol na Alimentação sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo

4.1.5 Composição do Destilado

O comportamento da carga térmica e razão de refluxo em função da composição do destilado é mostrado na Figura 4.6. Verifica-se que a razão de refluxo e carga térmica aumentam lentamente com o acréscimo da composição do etanol no destilado (até aproximadamente 85% em moles), pois nesta região não ocorre dificuldade na separação do produto, ou seja, as vazões internas da coluna são praticamente constantes. À medida que a composição do etanol se aproxima da azeotrópica, verifica-se que ocorre um grande aumento na razão de refluxo e na carga térmica devido à grande dificuldade na separação.

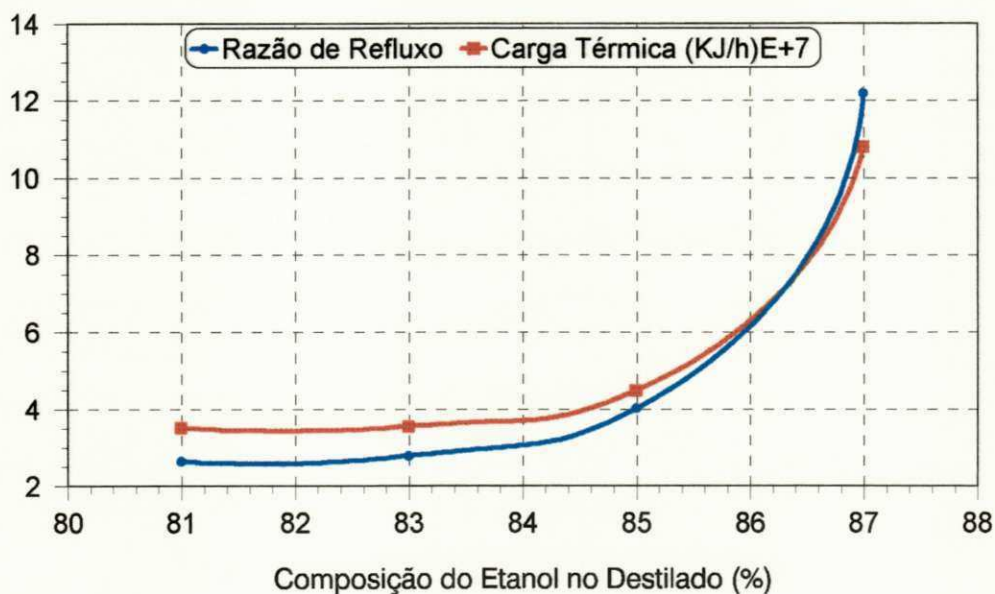


Figura 4.6- Influência da Composição do Etanol no Destilado sobre a Carga Térmica e Razão de Refluxo

4.2 Destilação com Recompressão Mecânica do Vapor (RMV)

Com base nos resultados obtidos para a coluna convencional foi possível montar as configurações com recompressão mecânica do vapor: alta pressão (RMVH) e baixa pressão (RMVL). Nos dois modelos analisados, foi instalado um trocador de calor na base da coluna com o objetivo de aproveitar a energia da corrente de fundo no pré-aquecimento da corrente de alimentação.

Foram estudados a influência do número de estágios, composição da alimentação e do destilado, mantendo-se as especificações da Tabela 2.2, exceto os parâmetros analisados em cada caso. Para a análise da influência das composições da alimentação e destilado, o valor do refluxo foi fixado como sendo 1,12 vezes o refluxo mínimo. Desta maneira, o número de estágios foi tomado como sendo 30, com localização da alimentação no ponto ótimo. Os resultados das simulações são mostrados nas tabelas 4.3 e 4.4.

4.2.1 Número de estágios

A Figura 4.7 mostra o comportamento do trabalho de compressão em função do número de estágios para as duas configurações. Verifica-se que para ambas configurações, o trabalho de compressão é inversamente proporcional ao número de estágios. Este efeito deve-se ao comportamento inverso entre a razão de refluxo e o número de estágios, ou seja, para mesma especificação de processo quanto menor o número de estágios maior será a razão de refluxo, conseqüentemente maior será a vazão de vapor de topo. Portanto, como o trabalho de compressão é função da vazão de vapor de topo, o aumento desta vazão ocasiona uma elevação deste trabalho.

Apesar do mesmo comportamento, a destilação RMVH apresenta maior trabalho de compressão devido ao aumento da vazão de vapor de topo da coluna causada pela vaporização de parte do refluxo quando a pressão é reduzida de 4 para 1 atm.

Tabela 4.3- Resultados das Simulações para o Modelo RMVH

Número de Estágios		Razão de Refluxo	Temperatura da Alimentação		Carga Térmica		Trabalho de Compressão	
			°F	°C	MBtu/h	GJ/h	HP	GJ/h
20		5,32	212,4	100,22	46,19	48,73	3140,0	8,43
25		3,79	214,8	101,55	35,82	37,79	2384,0	6,40
30		3,36	217,3	102,94	32,83	34,64	2167,0	5,82
35		3,28	219,7	104,28	32,30	34,08	2128,0	5,71
Composição da Alimentação		Razão de Refluxo	Temperatura da Alimentação		Carga Térmica		Trabalho de Compressão	
(%) molar	(%) peso		°F	°C	MBtu/h	GJ/h	HP	GJ/h
2,5	6,15	3,88	218,24	103,47	31,53	33,26	2092,0	5,62
2,7	6,62	3,60	217,98	103,32	32,15	33,92	2131,5	5,72
2,9	7,09	3,36	217,30	102,94	32,83	34,64	2167,0	5,82
3,2	7,79	3,06	216,4	102,44	33,92	35,79	2228,0	5,98
Composição do Destilado		Razão de Refluxo	Temperatura da Alimentação		Carga Térmica		Trabalho de Compressão	
(%) molar	(%) peso		°F	°C	MBtu/h	GJ/h	HP	GJ/h
81	91,59	3,25	217,20	102,89	32,78	34,58	2166,8	5,81
83	92,58	3,36	217,30	102,94	32,83	34,64	2167,0	5,82
85	93,54	4,29	217,20	102,89	38,40	40,51	2564,0	6,88
87	94,47	12,56	217,40	103,00	90,78	95,77	6473,0	17,38

Tabela 4.4- Resultados das Simulações para o Modelo RMVL

Número de Estágios		Razão de Refluxo	Temperatura da Alimentação		Carga Térmica		Trabalho de Compressão	
			°F	°C	MBtu/h	GJ/h	HP	GJ/h
20		4,60	212,4	100,23	46,20	48,74	2845,0	7,64
25		3,29	214,8	101,59	35,83	37,80	2207,6	5,93
30		2,90	217,3	102,94	32,83	34,64	2021,6	5,43
35		2,83	219,7	104,28	32,30	34,08	1988,5	5,34
Composição da Alimentação		Razão de Refluxo	Temperatura da Alimentação		Carga Térmica		Trabalho de Compressão	
(%) molar	(%) peso		°F	°C	MBtu/h	GJ/h	HP	GJ/h
2,5	6,15	3,35	218,00	103,33	31,55	33,28	1941,0	5,21
2,7	6,62	3,11	217,90	103,28	32,14	33,91	1974,0	5,30
2,9	7,09	2,90	217,30	102,94	32,83	34,64	2021,6	5,43
3,2	7,79	2,65	216,50	102,50	33,96	35,83	2090,0	5,61
Composição do Destilado		Razão de Refluxo	Temperatura da Alimentação		Carga Térmica		Trabalho de Compressão	
(%) molar	(%) peso		°F	°C	MBtu/h	GJ/h	HP	GJ/h
81	91,59	2,80	216,70	102,61	32,81	34,61	2018,0	5,42
83	92,58	2,90	217,30	102,94	32,83	34,64	2021,6	5,43
85	93,54	3,90	216,70	102,61	39,90	42,09	2483,0	6,66
87	94,47	12,20	216,70	102,61	101,60	101,19	6235,0	16,74

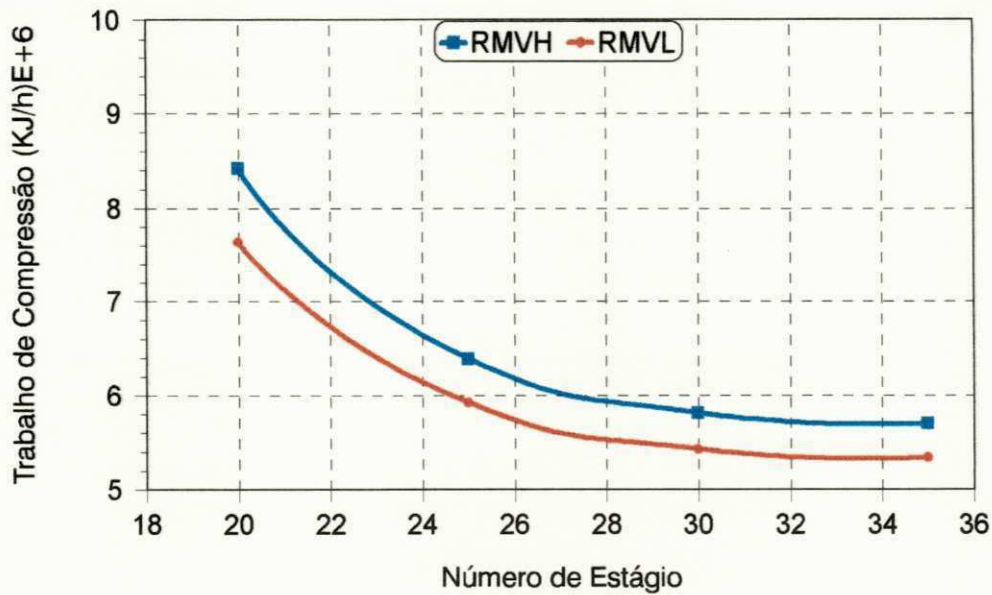


Figura 4.7- Influência do Número de Estágio sobre o Trabalho de Compressão

4.2.2 Composição da Alimentação

As simulações foram realizadas variando-se a composição da alimentação e os resultados são mostrados na Figura 4.8 e na segunda parte das tabelas 4.3 e 4.4. Verifica-se que o trabalho de compressão é diretamente proporcional a composição da alimentação. Este efeito pode ser explicado observando-se que, para uma determinada especificação de processo, quanto mais concentrada for a alimentação maior será o fluxo de vapor na seção de retificação. Portanto, como o trabalho de compressão é função da vazão de vapor de topo, o aumento deste produz uma elevação do trabalho de compressão.

A destilação RMVH, como explicado no item anterior, opera com maior vazão de vapor, conseqüentemente, apresenta maior trabalho de compressão quando comparado com a destilação RMVL.

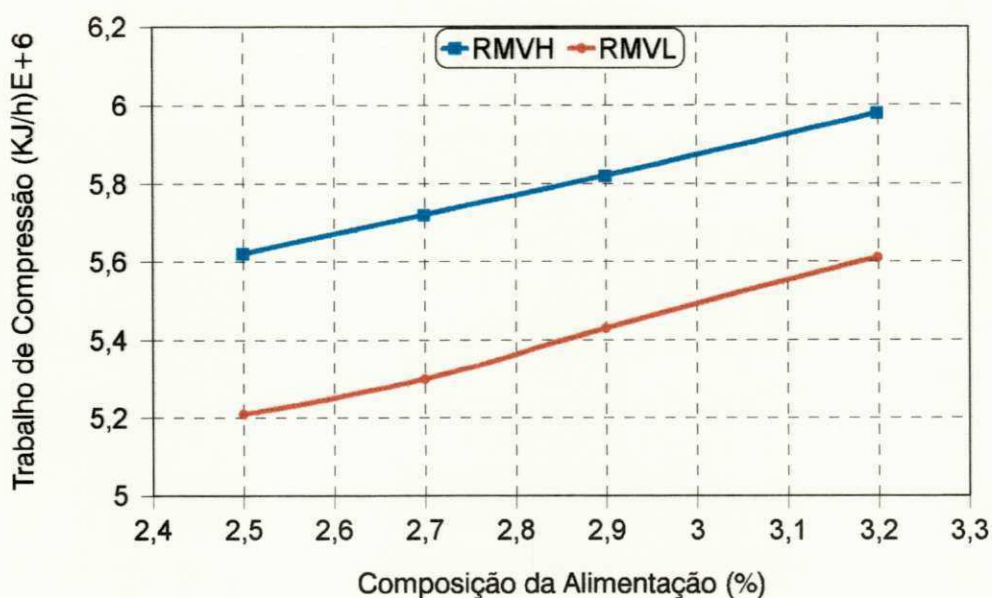


Figura 4.8- Influência da Concentração do Etanol na Alimentação sobre o Trabalho de Compressão

4.2.3 Composição do Destilado

A Figura 4.9 mostra como o trabalho de compressão varia em função da composição do destilado. Observa-se que o trabalho de compressão é diretamente proporcional à composição do etanol no produto de topo. Para uma determinada especificação, à medida que se eleva a pureza do destilado é necessário um aumento no grau de separação. Este aumento é conseguido com a elevação da taxa de refluxo. Portanto, ocorre um aumento da vazão de vapor de topo devido à elevação da taxa de refluxo, como o trabalho de compressão é diretamente proporcional a vazão de topo, o aumento desta produz um aumento no trabalho de compressão.

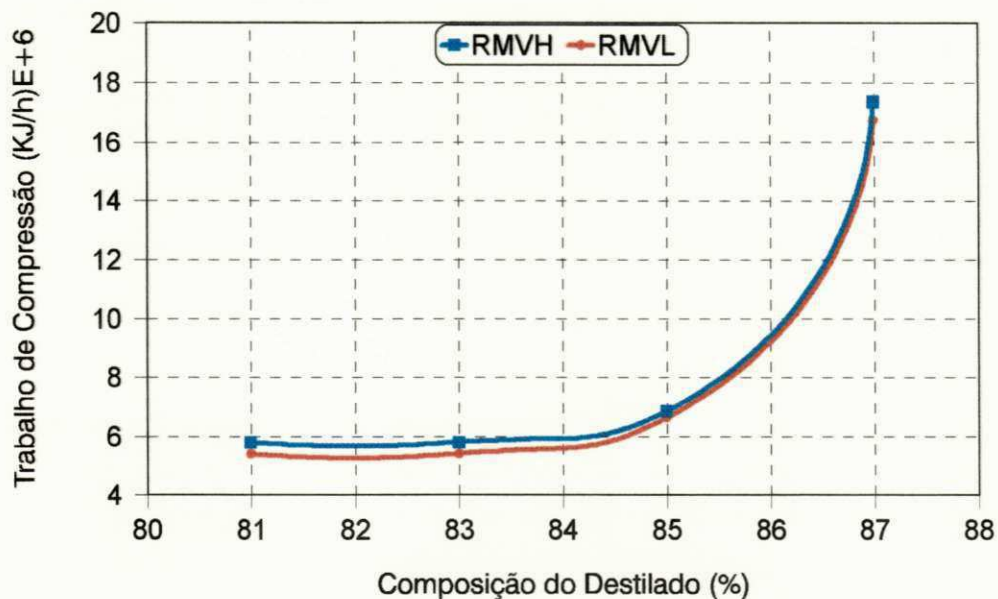


Figura 4.9- Influência da Composição do Etanol no Destilado sobre o Trabalho de Compressão

4.3 Economia de Energia

A adição do compressor para pressurizar o vapor de topo da coluna convencional é uma modificação que exige grande investimento inicial, mas resulta em uma grande redução do consumo energético global da instalação. Entretanto, como o compressor é acionado por energia elétrica e esta é geralmente mais cara que a energia térmica, a implantação desse sistema poderá ser inviável economicamente.

Os resultados obtidos neste trabalho comprovam a eficiência da destilação com recompressão mecânica do vapor quando comparado com a destilação convencional. Estes resultados são mostrados nas Tabelas 4.5, 4.7 e 4.8. Para todas variáveis estudadas, procura-se estabelecer as condições mais adequadas de operação com o objetivo de reduzir o consumo energético dos dois modelos estudados.

A comparação dos resultados deste trabalho com os obtidos por COLLURA & LUYBEN (1988) são mostrados na Tabela 4.6. As especificações de processo são as mesmas, com exceção do número de estágios e pressão de descarga do compressor. Os autores empregaram uma pressão de descarga de 4,1 atm e 63 estágios reais com 40% de eficiência na seção de esgotamento e 50% de eficiência na seção de retificação, ou

seja, empregaram 28 estágios teóricos ou de equilíbrio. Analisando os resultados mostrados na Tabela 4.6 verifica-se a excelente concordância entre os resultados deste trabalho com os obtidos pelos autores.

Tabela 4.5- Comparação entre a Carga Térmica e Trabalho de Compressão

Número de Estágio	RMVH			RMVL		
	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)
20	48,730	8,429	82,70	48,741	7,637	84,33
25	37,790	6,400	83,07	37,801	5,926	84,32
30	34,636	5,817	83,21	34,636	5,427	84,33
35	34,076	5,712	83,24	34,076	5,338	84,34
Composição da Alimentação (% molar)	RMVH			RMVL		
	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)
2,5	33,264	5,616	83,12	33,285	5,210	84,35
2,7	33,918	5,722	83,14	33,908	5,299	84,38
2,9	34,636	5,817	83,21	34,636	5,427	84,33
3,2	35,786	5,981	83,29	35,828	5,610	84,34
Composição do Destilado (% molar)	RMVH			RMVL		
	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)
81	34,583	5,814	83,19	34,614	5,417	84,35
83	34,636	5,817	83,21	34,636	5,427	84,33
85	40,512	6,883	83,01	42,094	6,665	84,17
87	95,773	17,376	81,86	107,188	16,737	84,39

Tabela 4.6- Comparação dos Dados deste Trabalho e os Obtidos por COLLURA & LUYBEN

Número de Estágios	RMVH		RMVL		COLLURA & LUYBEN
	25	30	25	30	28
Razão de Refluxo	3,79	3,36	3,29	2,90	3,31
Carga Térmica (MBtu/h)	35,82	32,83	35,83	32,83	38,00
Trabalho de Compressão (HP)	2384,0	2167,0	2207,6	2021,6	2200,0

Tabela 4.7- Comparação entre a Destilação Convencional e Destilação RMV

Número de Estágio	Carga Térmica (GJ/h)			Razão de Refluxo		
	Convencional	RMVH	RMVL	Convencional	RMVH	RMVL
20	49,117	48,730	48,741	4,567	5,320	4,600
25	38,429	37,790	37,801	3,210	3,790	3,290
30	35,627	34,636	34,636	2,792	3,360	2,899
35	35,163	34,076	34,076	2,568	3,280	2,834
Composição da Alimentação (%)	Carga Térmica (GJ/h)			Razão de Refluxo		
	Convencional	RMVH	RMVL	Convencional	RMVH	RMVL
2,5	33,991	33,264	33,285	3,150	3,883	3,350
2,7	34,739	33,918	33,908	2,950	3,604	3,110
2,9	35,627	34,636	34,636	2,792	3,360	2,899
3,2	37,357	35,786	35,828	2,630	3,062	2,653
Composição do Destilado (%)	Carga Térmica (GJ/h)			Razão de Refluxo		
	Convencional	RMVH	RMVL	Convencional	RMVH	RMVL
81	35,258	34,583	34,614	2,655	3,250	2,787
83	35,627	34,636	34,636	2,792	3,360	2,899
85	44,907	40,512	42,094	4,031	4,290	3,904
87	108,207	95,773	107,188	12,196	12,560	12,198

Tabela 4.8- Comparação entre a Carga Térmica do Sistema Convencional e o Trabalho de Compressão do Sistema RMV

Número de Estágio	Convencional - RMVH			Convencional - RMVL		
	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)
20	49,117	8,429	82,84	49,117	7,637	84,45
25	38,429	6,399	83,35	38,429	5,926	84,58
30	35,627	5,817	83,67	35,627	5,427	84,77
35	35,163	5,712	83,75	35,163	5,338	84,82
Composição da Alimentação (% molar)	Convencional - RMVH			Convencional - RMVL		
	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)
2,5	33,991	5,616	83,48	33,991	5,210	84,67
2,7	34,739	5,722	83,53	34,739	5,299	84,86
2,9	35,627	5,817	83,67	35,627	5,427	84,77
3,2	37,357	5,981	83,99	37,357	5,610	84,98
Composição do Destilado (% molar)	Convencional - RMVH			Convencional - RMVL		
	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)	Carga Térmica (GJ/h)	Trabalho de Compressão (GJ/h)	Economia (%)
81	35,258	5,814	83,51	35,258	5,417	84,64
83	35,627	5,817	83,67	35,627	5,427	84,77
85	44,907	6,883	84,67	44,907	6,665	85,16
87	108,207	17,376	83,94	108,207	16,737	84,53

CAPÍTULO V

5. CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos pode-se concluir:

5.1 Quanto ao Estudo da Destilação Convencional

1. A otimização do prato de alimentação é um fator muito importante na redução do consumo energético de uma coluna de destilação.
2. A coluna deve ser projetada para uma razão de refluxo entre 2,8 a 3,8, o que corresponde a um número de estágios entre 22 a 30.
3. A elevação da temperatura de 37,8 para 104,4 °C (Tabela 4.2), possibilita uma redução no consumo energético de 42,68%, com pequena variação do refluxo. Na faixa de 104,4 a 115,55 °C, tem-se uma redução de 26,93%, mas ocorre um grande aumento no refluxo. Portanto, a temperatura de alimentação deve entrar na coluna na faixa de 93,3 a 104,4 °C, o que possibilita uma redução de energia com pequeno aumento das vazões internas.
4. Para o projeto da coluna, a especificação máxima de etanol no topo é 85% molar. Acima dessa composição ocorre um grande aumento na carga térmica devido a grande dificuldade de separação, ou seja, de 85 a 87% a carga térmica aumenta 104,95%.

5.2 Quando ao estudo da destilação com recompressão mecânica do vapor

1. Para a mesma especificação de processo, o modelo RMVL mostrou-se mais eficiente que o modelo RMVH; pois no modelo RMVL, somente a quantidade de vapor necessária ao refulvedor passa através do compressor, minimizando o trabalho de compressão.
2. Para as mesmas especificações, os dois modelos possuem praticamente a mesma carga térmica. Portanto, a vazão de líquida de ambos são praticamente iguais.
3. O modelo RMVH opera com maior razão de refluxo externa que o modelo RMVL. Como o refluxo interno de ambos são iguais, então, o modelo RMVH possui maior vazão de vapor de topo implicando em maior trabalho de compressão. Portanto, o modelo RMVH é menos eficiente pois necessita de maior trabalho compressão.

5.3 Comparação entre a destilação convencional e os modelos com recompressão mecânica do vapor.

1. A carga térmica para a destilação convencional é maior que as obtidas para os modelos devido a menor temperatura de alimentação dessa coluna.
2. Ficou evidenciado a grande economia de energia obtida com o sistema de compressão, como mostrado na Tabela 4.8. Entretanto, a viabilidade de implantação de um sistema de compressão está intimamente ligado ao custo de energia elétrica para o acionamento do compressor.

CAPÍTULO VI

6. SUGESTÕES

1. Realizar os cálculos relativos a hidrodinâmica da coluna, em termos de diâmetro, espaçamento entre os pratos, eficiências, etc.
2. Avaliar a viabilidade econômica analisando o investimento inicial e a taxa de retorno obtida com o sistema de recompressão.
3. Analisar, em termos técnicos e econômico, o processo global de produção do etanol anidro, ou seja, integrando a coluna de destilação com recompressão mecânica do vapor com a coluna de destilação extrativa ou azeotrópica.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, T. F. & PRAUSNITZ, J. M. Application of the UNIQUAC Equation to Calculation Multicomponent Phase Equilibria. 1. Vapor-Liquid Equilibria. *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*; Vol. 17, Nº 4, 552-561, 1978.
- BARBOSA, P. S; Compressores. PETROBRÁS, CENPES-DIVEN, 2ª edição, 1984.
- BROUSSE, E; CLAUDEL, B; & JALLUT, C. Modeling and Optimization of the Steadystate Operation of a Vapor Recompression Distillation Column, *Chem. Eng. Sci.* 40, 2073-2078, 1985.
- CHEMCAD II, Process Flowsheet Simulator Chemstations inc. Engineering Software for the PC. 952, Echo Lane 450, Houston.
- COLLURA, M. A. & LUYBEN, W. L; Energy- Saving Distillation Designs in Ethanol Production. *Ind. Eng. Chem. Res.* 27, p. 1686-1696, 1988.
- FERRÉ, J. A; CASTELLS, F. & FLORES, J; Optimization of a Distillation Column with a Direct Vapor Recompression Heat Pump. *Ind. Eng. Chem. Proc. Dev.*; vol. 24, p. 128-132, 1985.
- FOUST, A. S; WENZELL, L. A; CLUMP, W. C; MAUS, L. & ANDERSEN, L. B; *Princípios das Operações Unitárias*, Guanabara Dois, 2ª ed. Rio de Janeiro, 1982.
- FREDENSLUND, A; JONES, R. L; & PRUSNITZ, J. M. *AICHE J*; Vol. 21, 1086, 1975, apud REID, R. C; PRAUSNITZ, J. M; & POLING, B. E; *The Properties of Gases and Liquid*. McGraw-Hill Book Company, 1989.
- GMEHLING, J; RASMUSSEN, P. & FREDENSLUND, A; Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension, 2. *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*; Vol.21 p. 118-127, 1982.
- KERN. D. Q. *Processos de Transferência de Calor*. Ed. Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1982.
- MEILI, A; STUECHEL, A. Distillation Column with Direct Vapor Recompression. *Chem. Eng.* 1987, 94, 133-143, 1987.
- MEIRELES, A. J. A. Etanol Anidro: Como Produzi-lo com Menor Consumo Energético?. *Conservar Energia: um Desafio dos anos 90*. Fundação Roberto Marinho, CNPq, Grupo Gerdau. p.10-22, Rio de Janeiro, 1991.

- MOSTAFA, H. A; Thermodynamic Availability Analysis of Fractional Distillation with Vapor Recompression. *Can. J. Chem. Eng.* Vol. 59, p. 487-491.
- MUHRER, C. A; COLLURA, M. A. & LUYBEN, W. L; Control of Vapor Recompression Distillation Column; *Ind. Eng. Chem. Res.* Vol. 29, p. 59-71, 1990.
- PRAUSNITZ, J. M. LICHTENTALHER, R. N. & AZEVEDO, G. E; Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria; Prentice-Hall Inc; Englewood Cliffs, N. J. 07632; Second edition, 1986.
- PERRY, R. H. & CHILTON, C. H; Manual de Engenharia Química, 5ª ed; Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1980.
- PERRY, R. H. & GREEN, C. H; Handbook Chemical Engineering, 6ª ed; Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1985.
- REID, R. C; PRAUSNITZ, J. M. & POLING, B. E; The Properties of Gases and Liquids; McGraw-Hill Book Company, 1988.
- RUSH Jr; F. E; Du Pont's Engineering Service Div. AIChE, Julho, 1980.
- SATYRO, M. A; ALVES, P. M. & PICCOLI FILHO, D. E; Modelagem e Simulação de Processos: Conceituação Geral. *Revista Brasileira de Engenharia Química*, vol. 9, nº 4, p. 3-7, setembro/outubro, 1986.
- SMITH, J. M; & VAN NESS, H. C; Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. Ed. Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1980.
- SOAVE, G; *Chem. Eng. Sci*; 27, 1107, 1972, apud CHEMCAD II V-2.2.
- WANG, J. C. & HENKE, G. E. Tridiagonal matrix for distillation. *Hydrocarbon Processing*, 45(8): 155-163, aug. 1966; 45(9), sept. 1966 (errata); 45(12): 83, dec. 1966 (errata).
- WEINSTEIN, E; Economia de Energia em Destilação. *Revista Brasileira de Engenharia Química*. 8, p. 11-23, Julho, 1985.

CAPÍTULO VIII

8. APÊNDICE A

8.1 Equação Tipo M Modificada

A Equação 2.7 é obtida combinando as equações 2.2 e 2.1 para eliminar $y_{i,j}$ e $y_{i,j+1}$, fornecendo:

$$L_{j-1} \cdot x_{i,j-1} + V_{j+1} \cdot k_{i,j+1} \cdot x_{i,j+1} + F_j \cdot z_{i,j} - (L_j + V_j) \cdot x_{i,j} - (V_j + W_j) \cdot k_{i,j} \cdot x_{i,j} = 0 \quad \text{A-1.1}$$

rearranjando,

$$L_{j-1} \cdot x_{i,j-1} - \left[(V_j + W_j) \cdot k_{i,j} + (L_j + V_j) \right] \cdot x_{i,j} - V_{j+1} \cdot k_{i,j+1} \cdot x_{i,j+1} = F_j \cdot z_{i,j} \quad \text{A-1.2}$$

definindo A_j , B_j , C_j e D_j , como:

$$\begin{aligned} A_j &= L_{j-1} & 2 \leq j \leq N \\ B_j &= -\left[(V_j + W_j) \cdot k_{i,j} + (L_j + V_j) \right] & 1 \leq j \leq N \\ C_j &= V_{j+1} \cdot k_{i,j} & 1 \leq j \leq N - 1 \\ D_j &= -F_j \cdot z_{i,j} & 1 \leq j \leq N \end{aligned} \quad \text{A-1.3}$$

onde L_{j-1} e L_j são obtidos pelo balanço global,

$$L_{j-1} = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad \text{A-1.4}$$

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad \text{A-1.5}$$

substituindo as Equações A-1.3, A-1.4 e A-1.5 na Equação A-1.2,

$$A_j \cdot x_{i,j+1} + B_j \cdot x_{i,j} + C_j \cdot x_{i,j-1} = D_j \quad \text{A-1.6}$$

Esta equação sendo escrita para N estágios de equilíbrio fornece um conjunto de equações cujos os coeficientes formam uma matriz tridiagonal.

$$\begin{bmatrix}
 B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} & 0 \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\
 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 x_{i,1} \\
 x_{i,2} \\
 x_{i,3} \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 x_{i,N-2} \\
 x_{i,N-1} \\
 x_{i,N}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 D_1 \\
 D_2 \\
 D_3 \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 \dots \\
 D_{N-2} \\
 D_{N-1} \\
 D_N
 \end{bmatrix}
 \quad (A-1.7)$$

8.2 Matriz Didiagonal

8.2.1 Cálculo das Vazões de Vapor

As vazões de vapor são obtidas a partir da Equação 2.5,

$$H_j = L_{j-1} \cdot H_{L_{j-1}} + V_{j+1} \cdot H_{V_{j+1}} + F_j \cdot H_{F_j} - (L_j + U_j) \cdot H_{L_j} - (V_j + W_j) \cdot H_{V_j} - Q_j = 0 \quad (A-2.1)$$

As expressões para os cálculos de L_j e L_{j-1} são dadas a partir da Equação 2.6,

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (A-2.2)$$

e

$$L_{j-1} = V_j + \sum_{m=1}^{j-1} (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (A-2.3)$$

substituindo as Equações (A-2.2) e (A-2.3) na Equação (A-2.1), obtemos, depois de um rearranjo:

$$\alpha_j \cdot V_j + \beta_j \cdot V_{j+1} = \gamma_j \quad (A-2.4)$$

onde

$$\alpha_j = H_{L_{j-1}} - H_{V_j} \quad (A-2.5)$$

$$\beta_j = H_{V_{j+1}} - H_{L_j} \quad (A-2.6)$$

$$\gamma_j = \left[\sum_{m=1}^{j-1} (F_m - W_m - U_m) - V_1 \right] \cdot (H_{L_j} - H_{L_{j-1}}) + F_j \cdot (H_{L_j} - H_{F_j}) + W_j \cdot (H_{V_j} - H_{L_j}) + Q_j \quad (\text{A-2.7})$$

A Equação A-2.4 pode ser escrita na forma de matriz didiagonal quando aplicada do estágio 2 até o estágio N-1,

$$\begin{bmatrix} \beta_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & & & 0 \\ \alpha_3 & \beta_3 & 0 & 0 & \dots & & & 0 \\ 0 & \alpha_4 & \beta_4 & 0 & \dots & & & 0 \\ \dots & \dots & & & & & & \dots \\ \dots & \dots & & & & & & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \alpha_{N-3} & \beta_{N-3} & 0 & 0 & V_{N-2} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \alpha_{N-2} & \beta_{N-2} & 0 & V_{N-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} & V_N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} V_3 \\ V_4 \\ V_5 \\ \dots \\ \dots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \\ V_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_2 - \alpha_2 \cdot V_2 \\ \gamma_3 \\ \gamma_4 \\ \dots \\ \dots \\ \gamma_{N-3} \\ \gamma_{N-2} \\ \gamma_{N-1} \end{bmatrix} \quad (\text{A-2.8})$$

A matriz A-2.8 pode ser resolvida, começando do estágio de topo onde V_2 é conhecido e trabalhando recursivamente até o estágio de fundo (N-1). Então,

$$V_3 = \frac{\gamma_2 - \alpha_2 \cdot V_2}{\beta_2} \quad (\text{A-2.9})$$

$$V_4 = \frac{\gamma_3 - \alpha_3 \cdot V_3}{\beta_3} \quad (\text{A.2.10})$$

em geral,

$$V_j = \frac{\gamma_{j-1} - \alpha_{j-1} \cdot V_{j-1}}{\beta_{j-1}} \quad (\text{A-2.11})$$

CAPÍTULO IX

9. APÊNDICE B

9.1 Dados de Equilíbrio

Tabela 9.1- Dados de Equilíbrio - Sistema Etanol-Água - P=760 mmHg

Método UNIFAC (CHEMCAD II)			Experimentais ^(*)		
X ₁	Y ₁	T (°C)	X ₁	Y ₁	T (°C)
0,0000	0,0000	100,0	0,0000	0,0000	100,00
0,0500	0,3474	89,5	0,0721	0,3891	89,0
0,1000	0,4486	85,8	0,0966	0,4375	86,7
0,2000	0,5260	84,1	0,1661	0,5089	84,1
0,3000	0,5694	82,3	0,2608	0,5580	82,3
0,4000	0,6096	81,2	0,3965	0,6122	80,7
0,5000	0,6530	80,3	0,5198	0,6599	79,7
0,6000	0,7020	79,9	0,5732	0,6841	79,3
0,7000	0,7581	79,5	0,6763	0,7385	78,74
0,8000	0,8224	78,8	0,7472	0,7815	78,41
0,9000	0,8900	78,4	0,8943	0,8943	78,15
1,0000	1,0000	78,1	1,0000	1,0000	78,1

^(*) Fonte: PERRY & GREEN, (1985)