

ANÁLISE DE DESEMPENHO DE COLUNA DE DESTILAÇÃO CONTENDO RECHEIO ESTRUTURADO

Aloisio Euclides Orlando Júnior

Tese submetida ao Corpo Docente do Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Aprovado por:

Eliôni M. de Arruda Nicolaiewsky
(orientador – presidente da banca)

André Luiz Hemerly Costa, D. Sc.

Jorge Navaes Caldas, D. Sc.

José Luiz de Medeiros, D. Sc.

Rio de Janeiro, RJ - Brasil

Junho de 2007

Orlando Jr., Aloisio Euclides.

Análise de desempenho de coluna de destilação contendo recheio estruturado /
Aloisio Euclides Orlando Júnior. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2007.

x, 203 p.; il.

(Dissertação) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, 2007.

Orientador: Eliôni Maria de Arruda Nicolaiewsky

1. Recheios Estruturados. 2. *HETP*. 3. Simulação. 4. Tese. (Mestrado – UFRJ/EQ). 5.
Eliôni Maria de Arruda Nicolaiewsky. I. Análise de desempenho de coluna de
destilação contendo recheio estruturado.

Dedico este trabalho a Deus que em tudo tem me suprido e aos meus pais e familiares pelo apoio incondicional em todos os momentos importantes da minha vida.

Ninguém te poderá resistir, todos os dias da tua vida; como fui com Moisés, assim serei contigo; não te deixarei nem te desampararei. (Josué 1:5)

AGRADECIMENTOS

Ao apoio financeiro da **Agência Nacional do Petróleo – ANP** – e da **Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP** – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH-ANP/MCT, em particular ao **PRH 13**, da Escola de Química – Processamento, Gestão e Meio Ambiente na Indústria do Petróleo e Gás Natural.

À Professora Eliôni cujo incentivo, carinho e apoio são imensuráveis para comigo! Sem você seria difícil chegar aqui!

A todo Grupo OTIMDEST e LUBDEST (Cristina, Marisa, Reginaldo, Fernanda e Antônio), pela amizade e apoio operacional nas corridas. Sem vocês não daria certo!

A Lílían Medina, Lourdes e Ricardo que se empenharam por demais para que todas as análises fossem feitas. Obrigado, vocês ajudaram a construir este trabalho.

Ao PRH-13, em especial, ao Professor Mach e à Zizi por todo suporte, para que este trabalho fosse concretizado.

À Ana Carreiro que me ajudou por demais na instalação e manutenção do software PRO/II® na rede da EQ. À Fernanda da Invensys, pela ajuda seja nas simulações, seja nos problemas de licença do mesmo.

Ao Edmur por todas as explicações e atenção em tirar nossas dúvidas sobre a coluna. Ao Vilaça, por toda a paciência e suporte técnico na instrumentação da coluna.

A D. Maria e Jô, vocês fizeram com que minha estadia no LADEQ fosse ótima.

A DETEN Química S. A., especialmente ao Sr. Carlos Pellegrini Pessoa, pelo rápido fornecimento da mistura C10-C13, por duas vezes, sem ônus para a nossa Escola.

Resumo da Tese de Mestrado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos da Escola de Química/UFRJ como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Ciências, com ênfase na área de Petróleo e Gás Natural.

ANÁLISE DE DESEMPENHO DE COLUNA DE DESTILAÇÃO CONTENDO RECHEIO ESTRUTURADO

Aloísio Euclides Orlando Junior
Junho, 2007

Orientador: Prof. Eliôni Maria de Arruda Nicolaiewsky

O principal objetivo do presente trabalho foi o de estimar o *HETP* (*Height Equivalent to Theoretical Plate*) de uma coluna de destilação em escala laboratorial, operando continuamente, em alto vácuo. Vários testes com uma mistura de hidrocarbonetos parafínicos de composição conhecida (C10-C13), fornecida pela DETEN Química S. A., foram realizados na coluna de destilação de laboratório, com 40 mm de diâmetro nominal e 2,2 m de altura, recheada com internos da Sulzer®. Outros testes foram realizados com uma mistura contendo 42 % volume de Neutro Médio e *Bright Stock*. Cinco correlações existentes na literatura foram comparadas a fim de verificar qual delas seria a mais apropriada para colunas contendo recheios estruturados, operando com destilados médios e óleos básicos lubrificantes. Antes dos testes experimentais, estudos de simulação usando o *software* comercial PRO/II® foram realizados a fim de serem estabelecidas as melhores condições operacionais para a destilação, especialmente no que se refere à pressão operacional e à razão de refluxo. Devido a problemas operacionais e de projeto, os testes com a mistura de óleos básicos lubrificantes não foram conclusivos. Contudo, após as modificações na coluna e operando-se com uma vazão otimizada da alimentação, os resultados com essa mistura podem ser aprimorados. Entre as correlações teóricas para a estimativa de *HETP* [Bravo, Rocha e Fair, (1985); Rocha, Bravo e Fair, (1993, 1996); Brunazzi e Pagliant, (1997); Olujić et al., (2004)], o modelo de Olujić et al. (2004) mostrou melhor resultado (desvio de 24 %) do que o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996), que foi de 47%. Contudo, se for usado o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), com as premissas propostas neste trabalho, os resultados mostraram um desvio de apenas 8 % com relação ao valor de *HETP* experimental, permanecendo uma boa escolha para recheios do tipo *gauze* metálico. Com a vantagem de se evitar cálculos de área efetiva e de coeficientes de transferência de massa, um modelo empírico proposto por Carrillo e colaboradores (2000) também foi investigado, obtendo um pequeno desvio (12 %) com relação ao experimental.

Abstract of a Thesis presented to Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos – EQ/UFRJ as partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science with emphasis on Petroleum and Natural Gas.

PERFORMANCE ANALYSIS OF DISTILLATION COLUMN CONTAINING STRUCTURED PACKING

Aloisio Euclides Orlando Junior
June, 2007

Supervisor: Prof. Eliôni Maria de Arruda Nicolaiewsky

The main purpose of this work was to evaluate *HETP* (Height Equivalent to Theoretical Plate) of a structured packing laboratory scale distillation column, operating continuously, at high vacuum. Several tests with a paraffinic hydrocarbon mixture of known composition (C10-C13), obtained from DETEN Chemistry S. A., have been performed in a laboratory distillation column, having 40 mm of nominal diameter and 2,2 m high, with internals of Sulzer® DX structured packing. Other tests have been performed with a mixture containing 42 % volume of Medium Base Oil and Bright Stock. Five *HETP* correlations available in the literature were compared in order to find out which is the most appropriate for structured packed columns operating with medium distillates and lube base oils. Prior to the experimental tests, simulation studies using commercial software PRO/II® were performed in order to establish the optimum operational conditions for the distillation, especially concerning operating pressure and reflux ratio. Due to operational and design problems, the tests with the lube base oil mixture were not conclusive. However, after the column revamp, and operating with an optimized feed rate, results could be enhanced for that mixture. Among the theoretical correlations for *HETP* evaluation [Bravo, Rocha and Fair (1985); Rocha, Bravo and Fair (1993, 1996); Brunazzi e Pagliant (1997); Olujić et al. (2004)], the model of Olujić et al. (2004) has shown better results (24 % deviation) than Rocha, Bravo and Fair's model (1993, 1996), which had achieved a 47 % deviation. However, if it is used the model of Rocha, Bravo and Fair (1985), with the assumptions proposed in the present work, the results have shown a deviation of only 8 % relatively to the experimental *HETP* value, remaining a good choice for gauze metallic packing. With the advantage of avoiding the calculation of effective area and mass transfer coefficients, an empirical model proposed by Carrillo and coworkers (2000) was also investigated, having shown a small deviation (12 %), in comparison to the experimental value.

ÍNDICE

Capítulo I. Introdução	1
Capítulo II. Revisão Bibliográfica	5
II.1. Colunas de Destilação e seus Internos	5
II.1.1. Recheios Estruturados	5
II.1.2. Características Geométricas dos Recheios Estruturados Corrugados	7
II.1.3. Tipos de Recheios Estruturados	9
II.2. Estimativa de Eficiência de Colunas de Recheio Estruturado	10
Capítulo III – Materiais e Métodos	25
III.1. Descrição da Unidade de Destilação QVF	25
III.2. Limitações da Unidade de Destilação Contínua da QVF	30
III.2.1. Vazão de Produto de Fundo	30
III.2.2. Vazão de Alimentação	31
III.2.3. Temperatura de Topo	31
III.2.4. Temperatura de Fundo	32
III.2.5. Amostragem do Produto de Fundo	32
III.3. Operação da Unidade de Destilação Contínua da QVF	33
III.4. Curvas de Destilação	34
III.5. Condições Operacionais para a Carga C10-C13	36
III.6. Condições Operacionais para a Carga NM/BS	37
III.7. Modificação da Unidade QVF	45
III.8. Caracterização dos Produtos	47
Capítulo IV. Simulação de Coluna de Destilação utilizando o Software Comercial PRO/II®	48
IV.1. Método Aproximado para Destilação Multicomponente	49
IV.2. Resultado do Método Aproximado	63
IV.3. Simulação da Coluna de Destilação no PRO/II® usando a carga C10-C13	66

IV.4. Simulação da Coluna de Destilação no PRO/II [®] usando a carga NM/BS	70
Capítulo V. Modelos para Estimativa de <i>HETP</i> em Colunas de Destilação	72
Contendo Recheios Estruturados	
V.1. Eficiência do Recheio na Destilação – <i>HETP</i>	72
V.2. <i>HETP</i> através de Métodos Empíricos – Correlação de Carrillo, Martin e Rosello (2000)	75
V.3. <i>HETP</i> através de Modelos de Transferência de Massa Teóricos	76
V.3.1. Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985)	78
V.3.2. Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)	81
V.3.3. Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997)	86
V.3.4. Modelo de Olujić e colaboradores (2004)	92
V.3.5. Adaptação do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985)	99
V.4. Estimativa das Difusividades das Fases Líquida e Vapor	101
Capítulo VI. Resultados e Discussão	103
VI.1. Separação de C10 ⁻ com 98 % de pureza no topo	103
VI.2. Separação de C11 ⁻ com 98 % de pureza no topo	107
IV.3. Resultados das Modificações da Unidade QVF	109
IV.4. Separação da mistura de óleos básicos NM/BS	114
VI.5. Análise de Desempenho do Recheio Sulzer [®] DX	120
Capítulo VII. Conclusões e Sugestões	136
VII.1. Separação da mistura C10-C13	136
VII.2. Separação da Mistura NM/BS	137
VII.3. Sugestões	138
Referências Bibliográficas	139
Apêndices	143
Apêndice I. Procedimento Operacional da Unidade QVF	143
Apêndice II. Análises das Cargas	147

II.1. Análises da Carga C10-C13	147
II.2. Análises da Carga NM/BS	148
II.2.1. Análises do Neutro Médio	148
II.2.2. Análises do <i>Bright Stock</i>	149
II.2.3. Análises da Mistura Processada NM/BS	150
Apêndice III. Analises dos Produtos	151
III.1. Carga C10-C13	151
III.2. Carga BS/NM	155
Apêndice IV. Modelos em Plataforma MatLab®	177

I. Introdução

A produção de óleos básicos lubrificantes no Brasil é feita através da rota de extração por solventes, em duas unidades de refino, a RLAM (Refinaria Landulpho Alves), situada na Bahia, que utiliza o petróleo parafínico nacional (petróleo baiano) e a outra, a REDUC – Refinaria Duque de Caxias, utilizando petróleo parafínico importado. A RLAM produz os lubrificantes básicos: Neutro Leve, Neutro Médio e *Bright Stock*; já a REDUC produz além desses, os óleos *Spindle*, *Spindle Branco*, Isolante Parafínico, Neutro Pesado, Turbina Leve, Turbina Pesado, Cilindro I e Cilindro II.

Há ainda outra refinaria, a LUBNOR (Fábrica de Lubrificantes do Nordeste) que utiliza a rota HDT (Hidrotratamento) para produzir outro tipo de lubrificante, o naftênico, usado em aplicações especiais.

A rota de extração por solventes para obtenção de óleos lubrificantes básicos tem a desvantagem de só processar petróleos parafínicos leves específicos. Esse é um problema para muitos países, inclusive para o Brasil onde os petróleos encontram-se, na sua maioria, em águas profundas, caracterizando-se pela alta densidade.

O tema desta tese está inserido em um projeto de pesquisa, concebido através de um Convênio com a FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), PETROBRAS e UFRJ, esta representada pela FUJB (Fundação Universitária José Bonifácio), que teve início em 2002 e que visava ao projeto e à otimização da destilação de óleos pesados para a obtenção de óleos lubrificantes básicos, pela rota de hidrorrefino. Essa rota, já empregada em alguns países como os Estados Unidos e alguns da Europa, é uma forma mais severa de hidrotratamento, cuja principal vantagem é a produção de óleos lubrificantes de melhor qualidade (Grupo II), além de produzir combustíveis, como nafta e diesel, mais limpos, a partir de petróleos pesados. Os óleos básicos do Grupo II são reconhecidos pelo alto IV, índice de viscosidade, e maior resistência à oxidação.

O processo de hidrorrefino consiste em duas etapas, a primeira de hidrotratamento para remoção de nitrogênio e a segunda de hidrocraqueamento, para remoção final de nitrogênio, para ajuste final da qualidade dos resíduos e a geração de produtos leves. Após o processo de hidrocraqueamento catalítico, o efluente passa por uma destilação atmosférica onde são retirados a nafta e o diesel. Os resíduos gerados, geralmente $370\text{ }^{\circ}\text{C}^{+}$ são separados em seus respectivos cortes de lubrificantes em uma torre a vácuo. Cada um desses cortes é, então, submetido ao processo de hidro-iso-

desparafinação e hidroacabamento, para ajuste final da qualidade dos óleos lubrificantes.

No projeto citado acima, foi adquirida uma unidade de destilação, construída pela empresa alemã QVF, subsidiária da suíça De Dietrich. A coluna de destilação, de diâmetro nominal de 40 mm e de 2,2 metros de altura, contendo recheio estruturado da Sulzer, opera continuamente em alto vácuo. A coluna apresenta ainda certa versatilidade tanto em termos de carga, podendo ser introduzida em três lugares diferentes, como em termos de pressão operacional, variando de pressão atmosférica até o vácuo de 1 (um) mbar.

De modo a trazer subsídios ao projeto de novas colunas de destilação ou de modificações de colunas já existentes, esse projeto teve um desdobramento, desta vez, com o objetivo de se fazer uma análise de desempenho da coluna de destilação na produção de óleos lubrificantes básicos. Para atender a esses objetivos, foram propostas modificações na coluna, tais como, colocação de retirada lateral na seção de absorção, nova saída de produto de fundo e novo divisor de refluxo.

Os testes experimentais foram realizados com uma mistura de Neutro Médio e *Bright Stock* (NM/BS), de modo a facilitar a separação dos produtos de topo e de fundo da coluna. Face aos problemas operacionais e de projeto da unidade, foi muito difícil obter resultados satisfatórios com relação à mistura NM/BS. Por se tratar de uma mistura complexa, houve dificuldades também com relação às análises dos produtos, cujos resultados demoravam muito para serem disponibilizados, optou-se, então, por se trabalhar também com uma mistura mais leve, de composição conhecida, cedida pela DETEN Química S. A.

A vantagem de se trabalhar com uma mistura mais leve (da mesma faixa de destilação do querosene) e de composição conhecida (C10-C13) pode ser sentida na presteza dos resultados das análises e na maior facilidade com relação ao cálculo, em plataforma MatLab[®], do número de estágios de equilíbrio (N_{eq}) necessário para efetuar as separações desejadas. O N_{eq} é essencial para se estimar o *HETP* (*Height of Equivalent Theoretical Plate*) experimental a fim de comparação com os valores de *HETP* obtidos pelo uso de correlações existentes na literatura.

No presente estudo, foram escolhidos cinco modelos, dentre os quais havia quatro mais teóricos: Bravo, Rocha e Fair (1985), Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996), Brunazzi e Pagliant (1997) e Olujić et al. (2004), que trazem no seu desenvolvimento a dependência dos coeficientes de transferência de massa das fases envolvidas e do

cálculo da área superficial efetiva, propondo correlações para o cálculo desses parâmetros. O modelo de Brunazzi e Pagliant (1997) fora desenvolvido para absorção, mas resolveu-se utilizá-lo para fins de comparação com os demais, que são aplicados em colunas de destilação. O quinto modelo investigado foi o de Carrillo, Martin e Rosello (2000), bastante simplificado, pois considera o *HETP* função apenas da vazão de vapor e das propriedades físicas da mistura.

Uma nova abordagem do modelo original de Bravo, Rocha e Fair (1985) foi proposta neste trabalho, tendo obtido resultados bastante surpreendentes em termos de estimativa de *HETP* para recheios de tecido metálico, para o qual foi desenvolvido.

No capítulo II, apresentou-se uma extensa revisão bibliográfica sobre internos de coluna, sobre os tipos de recheio mais comumente empregados em destilação e sobre os modelos para estimativa de *HETP*.

No capítulo III, de Materiais e Métodos, apresenta-se uma descrição bastante objetiva da unidade de destilação contínua QVF e de suas limitações, além da descrição das características do recheio Sulzer DX[®]. Além disso, são apresentadas as condições operacionais para a separação da mistura C10-C13, de composição conhecida, e da mistura de óleos lubrificantes básicos, Neutro Médio e *Bright Stock*. Por fim, são descritas, ainda nesse capítulo, as melhorias realizadas na unidade de destilação QVF e as análises da carga e dos produtos, realizadas pelo Laboratório de Avaliação de Petróleos do CENPES/ PETROBRAS.

No capítulo IV, foram apresentadas as condições para a simulação no *software* PRO/II[®], a fim de se determinarem as condições ótimas de destilação, tanto da mistura C10-C13, quanto da carga NM/BS. Além do *software* PRO/II[®], fez-se necessária a programação, em plataforma MatLab[®], descrita nesse capítulo, dos métodos aproximados (Fenske-Underwood-Gilliland) para obtenção do número de estágios teóricos e da razão de refluxo operacional, a fim de se obter o *HETP* experimental na separação da mistura C10-C13.

No capítulo V, são descritos os modelos para estimativa de *HETP*, em colunas contendo recheios estruturados. Como mencionado acima, para fins de comparação, foram investigados neste trabalho quatro modelos denominados teóricos e um empírico. Nesse capítulo, descreve-se também uma nova abordagem do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) que, assim como o modelo empírico, mostrou-se a melhor opção para a estimativa de *HETP* de recheios tipo *gauze* metálico.

No capítulo VI, são apresentados os resultados e discussões da separação da mistura C10-C13, tanto para o corte de 98 % de pureza de C10 no topo, quanto para o corte de C11, com a mesma pureza, no destilado. No primeiro caso, os resultados foram bastante satisfatórios, em termos operacionais e na estimativa de *HETP*. Já para o corte de C11, ocorria inundação da coluna e a separação não ocorreu conforme o simulado. Nesse capítulo, são apresentados também os resultados e discussões quanto à separação da carga NM/BS, que, por problemas de limitações da unidade de destilação QVF, não puderam ser conclusivos. Espera-se que com a modificação realizada na unidade, os novos testes experimentais com a mistura NM/BS possam gerar resultados mais satisfatórios.

Finalmente, no capítulo VII, são apresentadas as conclusões desta dissertação e as sugestões para trabalhos futuros.

II. Revisão Bibliográfica

II.1. Colunas de Destilação e seus Internos

A separação de misturas líquidas por destilação depende principalmente da criação e da manutenção de área de contato líquido-vapor. Há uma grande variedade de dispositivos de contato líquido-vapor, porém os mais usados são três: pratos, recheios randômicos e recheios estruturados. Em termos de queda de pressão/estágio de equilíbrio, os recheios estruturados estão suplantando os outros dois dispositivos, embora a custo mais alto. Os randômicos são recheios discretos, de forma geométrica bem definida (cilindros, selas, etc.) que são colocados aleatoriamente na coluna. Os recheios estruturados são feitos sob medida para um determinado diâmetro e se constituem de chapas, em geral metálicas, corrugadas e dispostas paralelamente umas às outras na coluna (NICOLAIEWSKY, 1999). Enquanto os recheios randômicos são, em geral, menos caros em termos de investimento de capital, os recheios estruturados fornecem uma baixa queda de pressão, aliada a uma alta eficiência de transferência de massa, reduzindo, portanto, os custos operacionais (McGLAMERY, 1988).

Tanto os pratos como os recheios são utilizados para promover o contato íntimo entre o líquido descendente e o vapor ascendente, sem que haja decréscimo da capacidade da coluna de destilação. A grande diferença entre pratos e recheios é a porcentagem de abertura entre esses dois tipos de dispositivos de contato líquido-vapor. O prato tem uma área aberta de 8-15 % da área da seção reta da torre, enquanto para um projeto típico de torres recheadas essa relação é de 50 % (CHEN, 1984). Também, no caso de recheios, o contato entre o líquido-vapor se dá em toda a coluna e não em pontos específicos como nas torres de pratos.

II.1.1. Recheios Estruturados

Os recheios estruturados começaram a aparecer na década de 40, como descrito por Nicolaiewsky, em 1999, mas somente no fim dos anos 50 é que começaram a ser aplicados na indústria, com o aparecimento dos altamente eficientes recheios feitos de tela metálica (*wire-mesh*), tais como Goodloe[®], Hyperfil[®] e o Koch-Sulzer[®].

Os recheios estruturados corrugados, introduzidos pela Sulzer em fins dos anos 70, deram início à terceira geração de recheios estruturados. Alta capacidade, custo mais

baixo, uma menor sensibilidade aos sólidos e, ao mesmo tempo, mantendo uma alta eficiência, fizeram com que os recheios corrugados se tornassem competitivos em relação aos internos de torres convencionais. Os anos 80 presenciaram uma crescente popularidade desses recheios, especialmente em *revamps* de colunas de destilação de petróleo.

Essa terceira geração de recheios estruturados, fabricados a partir de lâminas metálicas corrugadas, apresentam também superfícies tratadas, mecânica ou quimicamente, com a finalidade de aprimorar suas características de molhabilidade. Além de aços carbono ou inoxidáveis, podem ser fabricados de plástico ou de cerâmica. Esses recheios apresentam uma estrutura muito bem definida, em termos macroscópico e microscópico. A macroestrutura é constituída de corrugações, cuja dimensão característica varia de 1-5 cm, formando canais, na maioria das vezes, a um ângulo de 45° com o eixo da coluna, por onde passa a fase vapor. Em relação à forma dos canais, grande parte dos recheios apresenta uma seção reta triangular, enquanto outros, como os da Montz, têm a forma mais arredondada.

A microestrutura está presente devido ao tratamento dado à superfície: são as texturas sob a forma de pontilhados em arranjo triangular, ou com o formato de sulcos, perfurações ou rasgos. A microestrutura é a responsável pela criação e pela manutenção de um filme líquido estável na superfície do recheio. Às vezes, além das diferentes texturas, as superfícies podem sofrer tratamento químico a fim de assegurar ângulos de contato menores, aprimorando a molhabilidade do recheio (NICOLAIEWSKY, 1999).

Os recheios estruturados de alta eficiência são bem mais caros por unidade de volume que os outros recheios. Entretanto, como são mais eficientes, o volume de recheio a ser aplicado é menor. A economia gerada por sua aplicação deve ser avaliada em cada caso. No início da década de 70 custavam entre 50 a 100 vezes mais que um recheio randômico. Durante os anos 80, a concorrência tem feito com que eles tenham o seu custo bastante reduzido, atingindo cerca de 3 a 5 vezes o custo dos randômicos. Esse fato tem permitido maior aplicação dos mesmos, chegando em 1987, no caso da separação etilbenzeno/ estireno, a cerca de 70 % das instalações industriais em todo o mundo (CALDAS; PASCHOAL, 1991).

Apesar de o recheio estruturado corrugado (REC) ser considerado um dispositivo de contato fácil de ser compreendido e implementado, na prática tem havido alguns casos de insucesso, particularmente nas destilações a altas pressões, indicando uma preocupante falta de compreensão do seu funcionamento (OLUJIC;

KAMERBEEK; GRAAUW, 1999). De uma maneira geral, o recheio estruturado corrugado é um dispositivo do tipo escoamento em filme (*film flow*) e funciona bem desde que o líquido se mova formando um filme fino contínuo devido à tensão superficial. Contudo, o projeto da superfície e da corrugação desses recheios especiais diferem bastante um dos outros e isso tem um profundo efeito no desempenho desses recheios.

Sendo assim, começaram a surgir alguns estudos apresentando modelos que levassem em conta os efeitos da geometria desses recheios. Um desses trabalhos foi desenvolvido por Olujić, Kamerbeek e Graauw, em 1999, que achavam que o maior pré-requisito para a utilização de todo o potencial dos REC é a compreensão das relações existentes entre a hidrodinâmica imposta, não apenas pela macroestrutura como pela microgeometria desses recheios e o processo de transferência de massa.

II.1.2. Características Geométricas dos Recheios Estruturados Corrugados

Os elementos de recheio consistem de chapas metálicas finas, corrugadas (com pregas, ondulações), perfuradas ou não e arranjadas paralelamente umas às outras. A superfície das chapas corrugadas pode ser lisa, texturada, com nervuras ou perfurada. As corrugações são inclinadas em relação ao eixo da torre e, além disso, duas chapas adjacentes são posicionadas de maneira que as suas corrugações tenham direções contrárias. Esses elementos podem ter de 8 a 12 polegadas de altura e são colocados na torre de modo que dois elementos adjacentes estejam posicionados com uma rotação de 90°, um em relação ao outro.

- a) *geometria da corrugação* - O tamanho da corrugação define a distância entre as chapas adjacentes. Quanto menores **B**, **h** e **S** (veja Fig. II.1), menor a abertura, maior o número de chapas (maior área de contato) e mais eficiente o recheio. Por outro lado, com aberturas estreitas, reduzem-se os espaços vazios, aumentando a resistência ao escoamento do gás (ou vapor) ascendente, levando a uma menor capacidade e podendo ocasionar problemas de entupimento e de corrosão (KISTER, 1992).

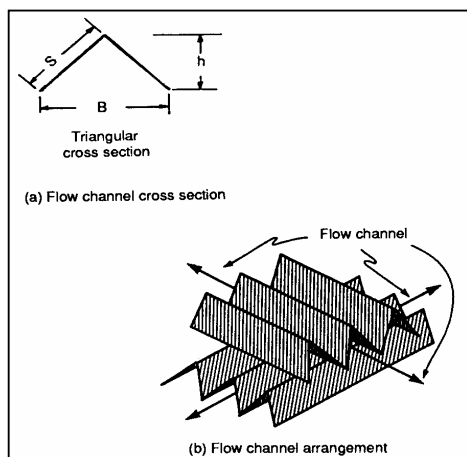


Fig. II.1. Geometria da corrugação: a) seção reta do canal de escoamento; b) arranjo do canal do escoamento na coluna (FAIR; BRAVO, 1990).

A relação entre **B** e **h**, e entre **S** e **h** e o ângulo da corrugação definem a geometria do canal de escoamento e a região de contato líquido-vapor. Essa geometria se mantém constante num mesmo tipo de recheio, mas se modifica entre as diversas famílias de recheios estruturados. O ângulo da corrugação varia de 28° a 45° e a relação base/altura da mesma pode variar entre 2:1 e 4:1. Em alguns recheios, como os da Montz[®], o vértice do topo do triângulo mostrado na Fig. II.1 é arredondado, a fim de reduzir o atrito e evitar o acúmulo de líquido nas bordas. Atualmente, muitos fabricantes têm oferecido recheios com ângulo de corrugação de 60° para aumentar a capacidade e, assim, satisfazer as necessidades de aumento de produção.

b) *geometria do elemento* - Pelo fato de as chapas serem corrugadas, o escoamento do líquido e do vapor, através de um único elemento, se dá sobre uma série de planos paralelos. Para que esse escoamento seja uniforme em todos os planos, cada elemento de recheio estruturado sofre uma rotação de 90° em relação ao imediatamente inferior. O ângulo de rotação e a altura dos elementos afetam o espalhamento do líquido (*liquid spreading*) em um recheio estruturado. Por essa razão, a altura dos elementos é relativamente baixa (tipicamente variando de 8 a 12 polegadas) e o ângulo de rotação de 90°. Em cada elemento, as corrugações das chapas ficam inclinadas em relação ao eixo da torre, em geral formando um ângulo de 45°. Esse ângulo é suficientemente grande para uma boa drenagem do líquido, evitando bolsões estagnantes e regiões de acúmulo de líquido. É, contudo, pequeno o bastante para evitar que o vapor evite (*bypass*) as superfícies metálicas.

c) *características das superfícies* - Muito poucos recheios estruturados apresentam uma superfície lisa. A maioria tem um tratamento de superfície a fim de melhorar as suas características de molhabilidade, aumentando assim a área superficial efetiva do recheio. Experimentos em laboratório baseados em taxas de absorção mostraram que tanto a eficiência na transferência de massa quanto a área efetiva aumentam nas superfícies metálicas texturadas (McGLAMERY, 1988). O acréscimo na eficiência da transferência de massa é função do tipo de tratamento de superfície. Esses tratamentos incluem perfurações, nervuras, ranhuras, relevo baixo, relevo alto, etc... As perfurações servem de canais de comunicação entre as partes superiores e inferiores de cada chapa. Se as perfurações forem muito pequenas, ou não existentes, os dois lados da chapa irão molhar-se apenas a baixas vazões de líquido. Os fabricantes de recheios sem furos acreditam que as perfurações impedem o espalhamento de líquido através da chapa, afetando assim negativamente o desempenho dos recheios estruturados. Usualmente os furos são circulares, mas existe um recheio que emprega furos com o formato da letra W, com as dobras de modo a direcionar o líquido para a outra face da superfície metálica (NICOLAIEWSKY, 1999).

II.1.3. Tipos de Recheios Estruturados

Exemplo bem sucedido da segunda geração dos recheios estruturados, o *Sulzer® Wire Gauze Packing* é uma espécie de tecido metálico em tiras, feito com arame muito fino. Essas tiras são corrugadas e montadas paralelas uma às outras, em camadas circulares de mesmo diâmetro que o casco da coluna. A ação capilar distribui o líquido pelo tecido de arame bem fino e o vapor ao subir no recheio o faz de modo tortuoso, através das superfícies molhadas (CALDAS; PASCHOAL, 1991).

O Mellapak®, também fabricado pela Sulzer Chemtech. (Suiça), possui estrutura equivalente ao Sulzer BX, porém em vez da tela de tecido metálico, é feito de uma chapa metálica perfurada e com sulcos na sua superfície. Nos Estados Unidos, Canadá e México esse recheio é comercializado com o nome de Flexipac®, pela Koch-Glitsch. Nos testes com o Flexipac®, constataram que esse recheio é mais eficiente na seção do topo da coluna, indicando uma deterioração na distribuição do líquido, à medida que este desce pelo recheio. O ângulo da corrugação é de 45°, com vértice pontiagudo. A notação é importante: o Mellapak® 250 Y, por exemplo, nos diz que a área superficial é

de $250 \text{ m}^2/\text{m}^3$ e que o ângulo em relação ao eixo da coluna é de 45° ; se fosse X, o ângulo seria de 60° .

Fabricado pela Koch-Glitsch temos o Gempak[®], cuja superfície é lisa e perfurada, com ângulo da corrugação de 45° . A sua notação tem um número que representa o inverso da altura da corrugação. Por exemplo, o Gempak 2A tem $1/2 \text{ in}$ de altura de corrugação, enquanto a letra A denota o recheio padrão (*Standard*). Já o Gempak 4BG é um tipo similar ao *Sulzer Wire Gauze BX*.

Em contraste com os recheios Mellapak[®], Flexipac[®] e Gempak[®], os recheios Montz B1[®] apresentam corrugações sinusoidais em vez de pontiagudas. As superfícies não são perfuradas e têm ranhuras como numa matriz de pontinhos, em arranjo triangular. O número (por exemplo, Montz B1 250) indica a área superficial nominal do recheio, no caso, $250 \text{ m}^2/\text{m}^3$.

ISP ou *Intalox[®] high performance structured packing* apresenta corrugações bem achatadas, com vértices arredondados e superfícies texturadas, com pequenos furinhos. Tem o aspecto de ralador de queijo e os canais formados pelas corrugações são desencontrados, ao longo do elemento do recheio. Nos testes de molhabilidade com vários líquidos de propriedades físicas bem distintas, realizados por Nicolaiewsky (1999), o ISP foi o recheio estruturado corrugado que apresentou melhor resultado em todos os líquidos testados.

II.2. Estimativa de Eficiência de Colunas de Recheio Estruturado

Meier e colaboradores (1977) desenvolveram um dos trabalhos pioneiros na avaliação do desempenho de recheios estruturados testando a eficiência da transferência de massa do recheio Mellapak 250 Y. Para isso, testes a refluxo total foram conduzidos em uma coluna de destilação de 2,5 m de diâmetro e 11 m de altura, equipada com Mellapak 250 Y em substituição a anéis do tipo Pall de 2 in, utilizando-se nos testes misturas de cis/trans-decaline e clorobenzeno/etilbenzeno, abrangendo uma extensa faixa de pressão e vazões de vapor. Os resultados dos testes mostraram que o recheio Mellapak 250 Y exibe valores de *HETP* (*Height Equivalent to Theoretical Plate*) e de perda de carga aproximadamente metade daqueles obtidos pelo recheio randômico, além de apresentar capacidade 50 % maior. A substituição dos recheios aumentou a pureza do produto de topo de 98 para 99,5 % e de fundo de 97 para 98,5 % e se a

operação fosse realizada a refluxo parcial, com o incremento no número de estágios, a razão de refluxo seria reduzida em 18 % e a capacidade aumentada em 54 %. Os autores observaram também que não há problemas de *scale-up*, pois os resultados obtidos em uma coluna de 25,4 cm de diâmetro são os mesmos para uma de 1 m, usando-se o Mellapak 250 Y como dispositivo de contato líquido/vapor.

Bravo, Rocha e Fair (1985) desenvolveram pioneiramente um modelo de eficiência de transferência de massa para recheios estruturados tipo tela metálica para condições de destilação. Esse modelo supõe que toda a superfície do recheio esteja molhada, mesmo para condições de alto-vácuo, já que isso só se realiza com altas vazões de líquido. Em função dessa premissa, os autores consideraram a área efetiva superficial igual à área total superficial do recheio. Em contrapartida, o efeito da pressão não foi incorporado ao modelo, pois a aplicação dos recheios é para condições de vácuo, envolvendo baixas taxas de líquido, gerando filmes finos com baixa resistência à transferência de massa, com baixa perda de carga. Como partes integrantes do modelo, foram usadas as relações tradicionais de transferência de massa, desenvolvidas para colunas de parede molhada, em que líquido e vapor escoam em contracorrente, tendo sido definido ainda um diâmetro equivalente para o recheio, usando as suas dimensões da altura e da crista, o comprimento da base da corrugação e o ângulo de corrugação, além dos fluxos mássicos efetivos para as fases vapor e líquida. Adicionalmente, foram empregadas as relações de Johnstone e Pigford (1942 apud BRAVO; ROCHA; FAIR, 1985) para o cálculo do coeficiente de transferência de massa para o lado do gás e as relações da teoria da penetração de Higbie (1935), para os coeficientes de transferência de massa para o lado do líquido.

Em seu artigo de 1988, Hufton, Bravo e Fair descrevem uma interessante abordagem de *scale-up* de colunas de destilação laboratoriais direto para escala industrial, de modo a minimizar os custos associados aos experimentos em escala piloto, contendo internos normalmente utilizados em escala industrial. Os autores utilizaram uma coluna de 25 mm de diâmetro, contendo recheio estruturado tipo tela metálica, com 58 cm de altura na separação de etilbenzeno e clorobenzeno, operando a refluxo total. O método de *scale-up* proposto é baseado no modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), em que a resistência à transferência de massa na fase líquida é desprezada, sendo assim, o *HETP* é aproximado à altura da unidade de transferência de massa, em relação à fase vapor, que é calculada tendo-se em mãos o coeficiente de transferência de massa em relação à fase vapor, obtido pelo modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), e a área

específica efetiva do recheio. Neste caso, face à molhabilidade completa da sua superfície, a área efetiva do recheio do tipo tela metálica é considerada igual à nominal. Desse modo, o *HETP* calculado na esfera laboratorial para a industrial pode ser encontrado, conhecendo-se as velocidades superficiais da fase vapor nas duas escalas, assim como, as áreas efetivas dos recheios das colunas de laboratório e industrial.

Foram apresentados por Weiland e Ahlgren (1993) novos dados de transferência de massa e de retenção de líquido para o recheio estruturado Goodle e o ChemPro's Montz A2 (similar ao Sulzer® BX). Os coeficientes de filme para a transferência de massa e as áreas interfaciais efetivas, para o contato gás-líquido, foram medidos por absorção gasosa. Os resultados são apresentados em termos de equações de regressão para o número de Sherwood para transferência de massa, como função do número de Reynolds; já a área interfacial efetiva, como função do fator de carga da coluna (produto da velocidade superficial da fase vapor pela raiz quadrada da densidade dessa mesma fase). O modelo é consistente com os dados experimentais, entretanto, é discordante do modelo proposto por Bravo, Rocha e Fair (1985) em relação ao coeficiente de transferência de massa para o lado do líquido.

Rocha, Bravo e Fair (1993) desenvolveram um modelo mecanístico com o objetivo de analisar e projetar colunas de destilação contendo recheios estruturados de metal corrugado, sendo aplicado também para colunas de absorção e de esgotamento. Nesse artigo, a predição da retenção de líquido no recheio foi peça chave para o desenvolvimento de correlações que pudessem medir com precisão a perda de carga, a capacidade e a eficiência da transferência de massa. Para isso, foi adotado o fluxo nos canais do recheio como uma série de paredes molhadas cuja geometria depende do ângulo e do tamanho da corrugação, onde líquido e gás escoam em contracorrente. No desenvolvimento de seu modelo, Rocha, Bravo e Fair (1993) utilizaram a correlação de Shi e Mersmann (1985 apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993), adequando-a aos seus dados, podendo assim, estimar a área interfacial disponível para transferência de massa e a retenção de líquido existente no recheio. Essas correlações levam em conta o tratamento de superfície, o ângulo de contato sólido-líquido, os dados geométricos do recheio, as propriedades físicas das fases, líquida e vapor, assim como, suas vazões.

A partir daí, foi possível a geração de um modelo de perda de carga, ao longo da coluna, dentro da região de pré-carga que indicasse a capacidade máxima da coluna (*flooding point*) dando prosseguimento ao estudo realizado por Bravo, Rocha e Fair no ano de 1986 (apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993) onde foi calculada a perda de carga

em colunas secas. Todas as correlações foram desenvolvidas para o sistema ar-água e validadas em uma coluna de destilação de 0,43 m de diâmetro e 3 m de altura, operando a refluxo total, na separação de ciclohexano e n-heptano a diferentes pressões. Os valores de perda de carga e de retenção de líquido se adequaram bem aos experimentais, indicando que o modelo pode ser usado para vários líquidos (inorgânicos e orgânicos) dentro de uma ampla faixa de pressão e vazões.

Brunazzi et al. (1995) estudaram a absorção do 1,1,1-tricloroetano de uma corrente de ar pelo absorvente comercial Genosorb 300, em uma coluna de vidro pyrex de 100 mm de diâmetro, contendo recheio estruturado Mellapak 250Y. Os dados experimentais foram usados para formular um modelo para a estimativa da área interfacial de transferência de massa, baseado em dados de retenção de líquido e no cálculo teórico da espessura do filme líquido no recheio. Foi adotado o modelo de Bravo e colaboradores (1992 apud BRUNAZZI et al., 1995) para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa para as fases, líquida e vapor, usando-se, entretanto, um diâmetro hidráulico definido por Shi e Mersmann (1985), como comprimento característico do escoamento da fase vapor no recheio. Como parte integrante do modelo, utilizou-se a correlação de Suess et al. (1992 apud BRUNAZZI et al., 1995) que se adequou muito bem aos dados experimentais, tendo apresentado melhor desempenho do que a correlação de Bravo e colaboradores (1992 apud BRUNAZZI et al., 1995). Através dos testes experimentais, foi observado que a retenção de líquido era a variável de maior influência na predição da área ativa de transferência de massa e que a correta avaliação desse parâmetro é imprescindível, pois afeta também o cálculo do coeficiente global de transferência de massa e, conseqüentemente, a altura da unidade de transferência global baseada na fase vapor. O modelo desenvolvido por Brunazzi e colaboradores (1995) se ajustou de forma apreciável a outros sistemas de absorção citados na literatura, como os de Meier, Stoecker e Weinstein (1977) – sistemas NH_3 -ar-água e SO_2 -ar-água – mostrando-se adequado para ser usado na avaliação da transferência de massa em processos de absorção que utilizem recheios estruturados.

Outro estudo experimental com recheios estruturados Mellapak foi desenvolvido por Laso e colaboradores (1995), em que foi medido o coeficiente de transferência de massa volumétrico k_{La} por meio do método $NTU-HTU$, em uma coluna de 0,295 m de diâmetro e 0,42 m de altura do leito recheado. A coluna operava em regime de contracorrente, onde o oxigênio de água saturada era esgotado por uma corrente de ar. Com a finalidade de se avaliar o efeito da área específica em tal separação, três recheios

foram utilizados, o Mellapak 155 Y, 250 Y e 500 Y, com respectivamente, 152, 250 e 500 m²/m³ de área específica nominal e ângulo de corrugação de 45°. O estudo de esgotamento foi conduzido a diferentes velocidades superficiais de líquido (B) e de gás, de modo a avaliar, também, o efeito desses parâmetros no produto $k_L a_e$. Os resultados experimentais revelam que, qualitativamente, o comportamento de recheios estruturados é o mesmo que o de randômicos. Prova disto é que $k_L a_e$ aumenta quando as vazões de líquido são aumentadas, com velocidades de gás abaixo do ponto de carga. Uma exceção para tal comportamento é exibida pelo recheio 125 Y que para B superiores a 0,01 m/s, ocorre diminuição de $k_L a_e$; efeito atribuído às características geométricas do recheio que possui um diâmetro hidráulico superior aos dos outros recheios e que, por isso, demonstra um regime de fluxo de líquido diferente. Os autores propuseram duas correlações que retratam, quantitativamente, $k_L a_e$ em função de B, uma para o 250 Y e outra para 500 Y e compararam com o desempenho de recheios randômicos de igual área, concluindo que, de fato, recheios estruturados são superiores em termos de capacidade e eficiência.

Na segunda parte do artigo publicado em 1993 (ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993), Rocha, Bravo e Fair (1996) desenvolveram um modelo cujos ingredientes básicos são os coeficientes de transferência de massa das fases gás e líquida e a área interfacial efetiva. Alguns conceitos abordados na primeira parte do artigo, tais como espessura do filme líquido sob o recheio, espalhamento de líquido, retenção de líquido são usados, também, para criação do modelo. Em 1985, Bravo, Rocha e Fair assumiram molhabilidade completa da superfície recheada, o que era razoável na época, pois os recheios utilizados eram do tipo *gauze* (tecido metálico), cuja capilaridade causava espalhamento total de líquido, o que não ocorre no caso de recheios corrugados. Desse modo, uma correlação foi proposta para avaliar o coeficiente de transferência de massa para a fase vapor, baseada na teoria da parede molhada. Para a fase líquida, cuja resistência à transferência de massa é negligenciada por muitos autores, foi utilizada a teoria da penetração com uma modificação no tempo de exposição, onde um fator leva em conta algumas partes do leito onde não há renovação rápida da superfície. Na avaliação da área superficial efetiva, foi utilizada a correlação de Shi e Mersmann (1985 apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1996), modificada na primeira parte do artigo (ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993). Os valores de *HETP* gerados pelo modelo foram comparados a um grande banco de dados disponíveis na literatura que comporta vários tipos de recheios, tamanhos de colunas, misturas e condições operacionais, tendo

apresentado boa adequação aos dados experimentais. O modelo falha ao representar sistemas como butano a altas pressões (20,4 bar). Isso pode estar relacionado com os efeitos de mistura axial que não são cobertos pelo modelo.

Gualito et al. (1997) fazem um refinamento do modelo de Rocha, Bravo e Fair, (1993, 1996), propondo um modelo de segunda geração, ou seja que pudesse prever a transferência de massa e a perda de carga, acontecendo simultaneamente, influenciando um ao outro. Os autores fizeram uma adaptação do modelo para prever o *HETP* e a queda de pressão na coluna a altas pressões, introduzindo um fator de correção de densidade e um fator de área efetiva, aplicáveis para tais pressões. Gualito e seus colaboradores também adaptaram o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) para calcular a eficiência da transferência de massa para recheios estruturados plásticos e cerâmicos. Eles afirmam que o processo de destilação é o mesmo e dependerá da área real de contato entre a fase líquida e a vapor, mas o material do recheio pode afetar a fração e a forma em que a fase líquida molha a superfície sólida do recheio. Sendo assim, novos parâmetros foram calculados para serem empregados em recheios metálicos, cerâmicos e plásticos. Todas as correções feitas com relação ao tipo de recheio e à pressão de operação forneceram um desvio médio de 19 % para *HETP* e 25% para perda de carga em relação aos 150 pontos experimentais de seu banco de dados.

Brunazzi e Pagliant (1997) mostram que para alguns experimentos de absorção de compostos clorados, a resistência do filme líquido contribui apenas em 5 % da resistência global. Já para outros experimentos onde o composto clorado é trocado, essa contribuição aumenta em 30 %, mostrando que desprezar a resistência da fase líquida nem sempre é recomendado. Sabendo desse fato, os autores avaliaram a resistência do filme líquido através do esgotamento de CO_2 , proveniente da água para o ar, com uma coluna de vidro de 100 mm de diâmetro e 2 m de altura, corroborando para criação de seu modelo, baseado nos números adimensionais de Sherwood, Kaptisa e Graetz. Para verificar a eficácia do modelo proposto, foram realizados experimentos de absorção de compostos clorados do ar gasto para absorventes comerciais. Os resultados expressos em $k_L a_c$ são bastante próximos dos valores experimentais. Os autores apontam o efeito da altura da coluna na altura de transferência global, em relação à fase líquida, para alturas maiores que 1 m e números de Reynolds para fase líquida inferiores a 100. Esse efeito não é só devido à má distribuição de líquido, segundo eles, mas à mudança do coeficiente de transferência de massa para fase líquida, porque a retenção de líquido e a

área superficial permanecem constantes quando a altura é modificada, logo o efeito da altura não pode ser negligenciado no projeto de colunas.

Lockett (1998) desenvolveu um método aproximado, usando o modelo rigoroso de Rocha, Bravo e Fair (1996) que se baseia na Teoria do Duplo Filme de transferência de massa. O modelo desenvolvido, função das propriedades físicas das fases, líquida e vapor, e da área superficial do recheio, calcula o *HETP* para uma vazão de vapor de 80% da vazão de inundação. Através do seu modelo, o autor afirma que não é necessário calcular a perda de carga da coluna seca e da coluna molhada, a gravidade efetiva agindo no líquido, a retenção de líquido, a área interfacial efetiva, o coeficiente de transferência de massa para as fases, líquida e vapor, fatores estes desnecessários para o seu modelo. Mesmo que a coluna opere a vazões de vapor diferentes da que corresponde a 80 % da vazão de inundação, é mostrado no seu artigo que o *HETP* não varia muito com a vazão de vapor, mas com as propriedades físicas das fases, líquida e vapor, e com a pressão de operação. O modelo é desenvolvido, também, assumindo ser a inclinação da curva de equilíbrio igual à unidade. Desse modo, o fator de esgotamento, a refluxo total, também é igual à unidade. Lockett recomenda que se o sistema a ser destilado possui constante de equilíbrio diferente da unidade, deve-se recorrer ao modelo original de Rocha, Bravo e Fair (1996).

Um estudo experimental foi conduzido por Verschoof, Olujić e Fair (1999), com vários recheios estruturados comerciais, para determinar o efeito de suas geometrias no comportamento hidráulico. Para tal, os dados do sistema ar-água foram usados para os estudos hidráulicos conjuntamente com os dados de destilação do sistema ciclohexano/n-heptano que proveram informações adicionais de transferência de massa e da hidrodinâmica desses recheios. Esse estudo teve a finalidade de superar as limitações dos modelos existentes na literatura que prevêm a perda de carga e a taxa de transferência de massa somente para região de pré-carregamento. Uma correlação foi proposta para identificação do ponto de carga, função do diâmetro hidráulico do canal triangular do fluxo de gás, das velocidades superficiais das fases, líquida e vapor, das propriedades físicas dessas fases e do ângulo de corrugação. Adicionalmente, outra correlação foi proposta para o cálculo da perda de carga acima do ponto de carga, usando-se um fator de correção. A comparação dos dados experimentais com aqueles gerados pelas correlações desenvolvidas indica que, para fins de engenharia, o modelo de Verschoof, Olujić e Fair (1999) representa bem a hidráulica de recheios estruturados.

Olujić, Kamerbeek e Graauw (1999) desenvolveram um modelo para predição da transferência de massa global em recheios estruturados, baseados na geometria macro dos mesmos. Diferentemente dos modelos já existentes, foi introduzido um novo parâmetro, o diâmetro hidráulico de um canal triangular formado pela interseção de duas placas corrugadas, como comprimento característico, presente nas correlações hidrodinâmicas e de transferência de massa. Foram utilizadas as mesmas correlações do artigo de Rocha, Bravo e Fair (1996) para estimar as velocidades efetivas das fases gás e líquida, assim como, a correlação do coeficiente de transferência de massa para a fase líquida, baseada na teoria da penetração. Em relação à estimativa da retenção de líquido, foi assumido como sendo o produto da área superficial do recheio e a espessura do filme (determinado pela fórmula de Nusselt para filmes descendentes em paredes inclinadas, no regime laminar). A retenção de líquido estimado por Rocha, Bravo e Fair (1996) foi relacionado com a perda de carga na coluna e no artigo de Olujić, Kamerbeek e Graauw (1999), esses dois parâmetros são tratados de forma independente. A estimativa da área interfacial molhada é função da fração da superfície ocupada por vazios, pois a correlação foi desenvolvida com base nos dados do recheio da Montz[®] e da velocidade superficial do líquido. O coeficiente de transferência de massa para a fase vapor é estimado dividindo-o em duas parcelas, para o regime laminar e para o turbulento, já que se assume que o regime de escoamento cobre a região de transição. Os autores mostram que seu modelo reproduz as mesmas tendências, com relação ao *HETP*, k_G e k_L que os modelos conhecidos, entretanto, algumas melhorias devem ser feitas na área superficial efetiva que representa a chave para o sucesso de um método generalizado de predição do desempenho de recheios estruturados.

Uma análise de desempenho do recheio estruturado Mellapak 250 Y da Sulzer[®] foi realizado por Fitz, Kunesh e Shariat (1999) numa coluna de destilação de escala industrial de 1,2 m de diâmetro. Nesse estudo, foram utilizados os sistemas o-xileno/p-xileno, i-butano/ n-butano e ciclohexano/n-heptano. Os testes foram realizados a refluxo total com a pressão variando de 0,02 a 27,6 bar, em duas colunas distintas, uma para os testes de baixa pressão e outra para os de alta pressão. Foram utilizados também dois tipos de distribuidores; para baixas e altas vazões de líquido. Resultados de capacidades, eficiência de separação e perda de carga são apresentados e comparados aos modelos de Rocha/Gualito (1993, 1996, 1997), Billet/Schultes (1995, 1998) e Spiegel e Meier (1992, 1994 apud FITZ; KUNESH; SHARIAT, 1999). O modelo de Rocha/Gualito (1993, 1996, 1997) funcionou muito bem a pressões moderadas, entretanto previu um

decréscimo na eficiência a altas pressões, assim como nos sistemas a vácuo, com baixas vazões de líquido. O modelo de Billet/Schultes (1995, 1998) se adequa de forma precisa aos dados experimentais de eficiência, exceto para os sistemas de butanos a 6,9 e 11,4 bar e de xilenos a 0,02 bar, nos quais a eficiência é subestimada. O sucesso desse modelo se deve à regressão de alguns parâmetros que são ajustados aos dados experimentais. O modelo de Spiegel e Meier (1992, 1994) prediz bem os dados de perda de carga, exceto para altas pressões. Já o modelo de Rocha/Gualito (1993, 1996, 1997) prediz de forma eficiente os dados de perda de carga a altas pressões, entretanto, em pressões baixas e moderadas, o modelo de Spiegel e Meier (1992, 1994) se adequou melhor aos dados experimentais. Fitz et al. (1999) também observaram uma região de aumento de *HETP* a pressões de 11,4 bar nos sistemas de butano, sendo sensível ao modo de distribuição de líquido utilizado. Eles apontam o *backmixing* de líquido como causa da perda de eficiência desse sistema.

Olujić (1999) realizou um estudo hidráulico com o recheio B1-250 da Montz[®] na tentativa de verificar o efeito do diâmetro da coluna na capacidade e na perda de carga. Foi usado o sistema ar/água, à temperatura ambiente, com colunas cujos diâmetros internos eram de 0,2 m, 0,45 m, 0,8 m e 1,4 m. Os resultados mostraram que a perda de carga aumentava, quando o diâmetro e, conseqüentemente a capacidade, diminuía. O autor observou que esse efeito se intensificava para diâmetros inferiores a 1 m e quando a altura de um elemento de recheio se aproximava do diâmetro da coluna. Tais resultados indicam que dados experimentais obtidos em escalas laboratoriais e/ou piloto superestimam a perda de carga e, conseqüentemente, o diâmetro, quando se deseja projetar unidades industriais. O autor ainda esclarece que o aumento da perda de carga em colunas de menor diâmetro pode ser atribuído ao grande número de mudanças de direção do fluxo gasoso e ao aumento do inventário de líquido nas proximidades da parede, devido aos *wall wipers* (chicanas para redirecionar o líquido de volta para a coluna), diminuindo, assim, a área transversal livre para a passagem de gás. Tal situação pode ser minimizada, aumentando-se o ângulo da corrugação, reduzindo-se a altura do elemento de recheio ou aumentando-se as dimensões da corrugação. Olujić (1999) declara que seu modelo incorpora o efeito do tamanho da coluna e prediz resultados conservadores para a escala industrial, entretanto, para colunas com pequeno diâmetro seu modelo deve ser melhorado, pois tende a superestimar a capacidade, se comparado aos dados experimentais.

Uma modificação da equação de Lockett (1998) para estimativa de *HETP* para recheios estruturados foi realizada por Carrillo, Martin e Rosello (2000). A equação modificada permite a estimativa de eficiência para vários recheios e diversas áreas superficiais, e não apenas para o Flexipac da Koch-Glitsch® para o qual a equação havia sido originalmente desenvolvida. Outro fator de correção também foi proposto de modo a corrigir o efeito da pressão nos sistemas ciclohexano/heptano e clorobenzeno/etilbenzeno. Outra correlação para o recheio Sulzer® BX foi proposta, função da vazão de vapor (fator de grande influência no *HETP* de recheios de tecido metálico), da densidade das fases líquida e vapor, assim como da pressão do sistema. Os *HETP*'s calculados pela equação se ajustaram bem aos dados experimentais da literatura.

Um estudo comparativo entre os modelos desenvolvidos na Universidade do Texas em Austin (ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993, 1996) e na Universidade de Tecnologia de Delft, na Holanda (OLUJIC et al., 1999) foi realizado por Fair e colaboradores (2000). Misturas de ciclohexano e n-heptano foram separadas em colunas, operando a refluxo total, variando do vácuo a altas pressões, com recheios da Montz® de ângulos de 45° e 60° com a horizontal, áreas superficiais de 250 e 400 m²/m³, feitos de metal expandido perfurado ou *shallow embossed* não-perfurado. Resultados mostraram que o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) superestima a perda de carga e subestima a eficiência de transferência de massa. Já o modelo Delft prediz *HETP*'s maiores para as condições de vácuo do que para as condições atmosféricas, o que em si já contradiz tudo o que se sabe a respeito de recheios estruturados. Com relação aos ângulos de corrugação, o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) se adequou melhor aos experimentos realizados com recheios de 45° e o de Delft, aos de 60°. De um modo geral, ambos os modelos calculam *HETP*'s próximos quando o ângulo de corrugação é mudado, evidenciando que tal parâmetro não influi muito na transferência de massa, diferentemente do observado experimentalmente. Os autores acreditam que a correta estimativa da área superficial efetiva é a chave para a confiabilidade dos modelos. Para tanto, sugeriu-se a adaptação da correlação de Onda (1968 apud FAIR et al., 2000) para recheios estruturados.

Face à oportunidade proporcionada por J. Montz para testar a influência da geometria de corrugação no desempenho dos recheios BSH (metal expandido perfurado) e B1 (superfície com sulcos rasos, não-perfurada), Olujić, Seibert e Fair (2000) estudaram o efeito do ângulo de corrugação, da área superficial e do tratamento de superfície na perda de carga, na capacidade e na eficiência de transferência de massa

desses recheios, com diferentes áreas ($250\text{-}400\text{ m}^2/\text{m}^3$) e ângulos (45° e 60°). A maioria dos dados de desempenho publicados, até então, eram baseados no ângulo de corrugação de 45° , em áreas de $220\text{-}250\text{ m}^2/\text{m}^3$ e alguns fabricantes já produziam alguns recheios de 60° , na tentativa de aumentar a capacidade dos mesmos. Experimentos conduzidos com o sistema ciclohexano-heptano, a refluxo total, foram realizados em uma coluna cuja altura de leito era de 3,3 m, onde foi objetivada a separação, com a pressão de operação variando de 0,33 a 4,14 bar. Os resultados mostraram que o aumento da pressão melhora a transferência de massa com o aumento da vazão de vapor utilizada, entretanto, esse efeito não é válido para recheios de alta área específica, pois a eficiência destes últimos se mantém praticamente independente da vazão de vapor, até as proximidades do ponto de carga. Outra observação diz respeito ao aumento do ângulo de corrugação: há uma diminuição suave da perda de carga com o aumento da capacidade e do *HETP*. Constatou-se que a presença de vazios na superfície do recheio BSH aumentava sua capacidade frente ao B1, em contrapartida, este apresentou *HETP*'s menores que o BSH, na região de pré-carga, devido ao seu tratamento de superfície e à sua geometria.

Pelkonen et al. (2001) em seu artigo disponibilizaram de informações técnicas para o projeto de colunas de destilação em escala piloto – medidores de pressão, temperatura, fluxo mássico, volumétrico, amostradores no recheio, assim como, a operação contínua dessas plantas. Os autores apresentaram também o perfil de composição na destilação de misturas como metanol/acetonitrila/água, metanol/2-propanol/água, operando a refluxo total, em colunas recheadas (Sulzer® BX, Montzpak e Rombopak) à pressão atmosférica. A contribuição do seu estudo, afirmam os autores, se situa nos perfis de composição obtidos na coluna, que podem ser usados para investigação do equilíbrio de fases e dos efeitos de transferência de massa, quando a carga é um sistema não-ideal (existência de azeotropia, por exemplo) como as testadas nesse estudo.

Olujić et al. (2001) conduziram um estudo experimental sobre algumas modificações em recheios estruturados, com o propósito de aumentar a capacidade dos mesmos, sem o custo de perda na eficiência, tendo sido escolhido o recheio B1 da Montz® para alcançar tal objetivo. Os autores propuseram, como mudanças estruturais do recheio, a inserção de placas lisas entre as corrugadas, seja na parte inferior ou na superior do elemento de recheio, assim como, o aumento da relação altura/base dos canais triangulares da placa corrugada em consideração à geometria padrão do recheio

B1, com subsequente inserção de placas lisas na parte superior do elemento de recheio. Adicionalmente, Olujić e colaboradores (2001) apresentaram um novo recheio, o Montz-Pak M, que apresenta curvaturas na parte inferior de suas placas corrugadas (minimizam a turbulência entre as fases líquida e vapor entre os elementos de recheio). Para determinar a eficiência de cada recheio, foram realizados testes a refluxo total com o sistema ciclohexano/n-heptano, à pressão atmosférica, em uma coluna com diâmetro de 0,43 m e 3,3 m de altura de leito recheado. Os testes hidráulicos foram conduzidos em uma coluna de 0,45 m de diâmetro e 2,0 m de altura de leito recheado com o sistema ar/água. Os resultados dos testes hidráulicos mostraram que houve aumento na capacidade, com a inserção das placas lisas entre as corrugadas. Entretanto, houve perda de eficiência, causados por má distribuição de líquido quando as placas estavam na parte superior do elemento e por problemas de “estrangulamento” (*bottlenecking*), entre as fases, líquida e vapor, na transição entre os elementos, quando as placas se encontravam na parte inferior. Já os resultados do recheio Montz-Pak M foram bem promissores, pois a capacidade aumentou em 20 %, em comparação com o recheio B1. Em relação à sua eficiência, para baixas vazões de vapor, o Montz-Pak M possui *HETP*'s superiores aos encontrados para mesmas condições com o recheio B1, contudo para vazões próximas ou superiores ao ponto de carregamento do último, são encontrados *HETP*'s similares, o que indica que o recheio Montz-Pak M seja uma boa opção para se trabalhar em altas vazões, onde os recheios com geometria padrão falham. O modelo Delft, segundo os autores, mostrou-se bem versátil, pois acompanhou todas as modificações geométricas feitas nos recheios, gerando resultados conservadores e próximos aos experimentais para cada modificação.

Olujić e colaboradores (2003) descreveram um estudo experimental realizado com a nova geração dos recheios de alta capacidade da Montz®. A principal característica desses é a curvatura suave na parte inferior da corrugação com aumento do diâmetro hidráulico. Outro desenvolvimento que tem sido utilizado no projeto de recheios estruturados é a redução da espessura de suas placas. Uma coluna de 3,3 m de altura e 0,43 m de diâmetro foi utilizada, operando nos testes a refluxo total na separação de ciclohexano/n-heptano a 0,17, 0,33, 1,03 e 4,14 bar. Os resultados mostram que os recheios com placas mais finas apresentam melhor eficiência do que os de geometria padrão, operando praticamente com a mesma capacidade. Os recheios de alta capacidade se mostraram aptos a operar com altas vazões de vapor, entretanto o ganho de capacidade é acompanhado por perda de eficiência, que é mais pronunciado

no ponto de carga. Estima-se que o recheio com área superficial maior ($350 \text{ m}^2/\text{m}^3$) e modificados geometricamente tenham uma redução de 10-20 % na eficiência se comparados aos recheios com geometria padrão. Já em relação à capacidade, ter-se-ia um ganho de 30 %, para uma perda de carga de 3 mbar/m.

Murrieta e colaboradores (2004) estudaram o esgotamento de uma corrente de água por uma corrente de ar, usando recheios do tipo Intalox, Flexipac e Sulzer® BX na coluna do grupo SRP (Separations Research Program, da Universidade do Texas, em Austin) de 0,43 m de diâmetro e 2 m de recheio. A contribuição de seu estudo reside no fato de que geralmente na destilação a resistência à transferência de massa encontra-se na fase vapor, entretanto, em sistemas com alta volatilidade, uma significativa porção da resistência global à transferência de massa se deve à fase líquida, sendo necessário estimá-la corretamente, segundo os autores. Experimentos foram conduzidos a diversas vazões de gás e de líquido, de modo a se estimar o coeficiente de transferência de massa volumétrico $k_L a_v$. Foi usada a correlação proposta por Bravo, Rocha e Fair (1992 apud MURRIETA et al., 2004) para estimar a área interfacial efetiva e, assim, calcular o k_L experimental e compará-lo com aquele obtido através da teoria da penetração, adaptada por Rocha, Bravo e Fair (1996). Os resultados mostram que a vazão de gás tem pouca influência sobre k_L e que a teoria de penetração pode ser usada para estimar tal coeficiente, entretanto, faz-se necessário o uso de um fator de correção (C_E) sugerido por Rocha, Bravo e Fair (1996), que leva em conta as mudanças nas vazões de líquido que, por sua vez, afetam os tempos de residência. Os valores de C_E encontrados por Murrieta et al. (2004) variam entre 1,0 e 2,0 para os recheios estudados. Os autores assinalam, no entanto, que poucos experimentos são realizados com líquidos cujas propriedades sejam diferentes da água e que tal verificação experimental torna-se necessária, tendo em vista o modelo proposto levar em conta propriedades físicas, tais como difusividade, viscosidade, densidade e tensão superficial.

Uma completa avaliação do modelo Delft foi feita por Fair e colaboradores (2000), mostrando que tal modelo superestima a área de transferência de massa em recheios estruturados. Para remediar isto, Olujić e colaboradores (2004) adaptaram a correlação de Onda (1968 apud Olujić et al., 2004) para recheios estruturados. De modo a testar a nova correlação obtida, experimentos a refluxo total com a mistura ciclohexano/n-heptano foram realizados na coluna de destilação da Universidade do Texas, com diâmetro nominal de 0,43 m, variando a pressão de 0,33 a 4,14 bar. Foram usados, como internos, os recheios B1 e o BSH da Montz®, com áreas nominais de 250

e $400 \text{ m}^2/\text{m}^3$ e ângulos de corrugação de 45° e 60° , respectivamente. Diante dos resultados experimentais, que ainda não se adequavam aos calculados pela equação de Onda modificada, Olujić e colaboradores (2004) fizeram uma nova mudança na correlação, incorporando os efeitos da área superficial, do ângulo de corrugação e da pressão operacional. Essa nova modificação foi satisfatória, pois houve concordância entre os resultados experimentais e os de valores de *HETP* obtidos pelo modelo, com exceção dos estimados para o recheio B1-400.60 ($400 \text{ m}^2/\text{m}^3$ e 60°), em que o modelo falhou em prever a eficiência, a baixas vazões de vapor a qualquer nível de pressão. Os autores atribuem essa falha à dificuldade de molhabilidade da superfície para o tipo de recheio da série B1.

Tomando como base modelos e dados experimentais encontrados na literatura, Wang, Yuan e Yu (2006) propuseram um método para estimativa da área interfacial efetiva de recheios estruturados, sob pressões elevadas. O modelo desenvolvido é uma modificação da correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996), em que foram incorporadas a razão de densidades das fases líquida e gás e a velocidade da fase gás, parâmetros influenciáveis pelo aumento da pressão operacional. Para validação do método, dados experimentais foram obtidos em uma coluna do FRI (*Fractionation Research Inc.*) de 1,2 m de diâmetro e 3,78 m de altura, equipada com o recheio Mellapak 250 Y, usando o sistema $\text{C}_4/\text{i-C}_4$ na faixa de 0,69-2,76 MPa. A confiabilidade da correlação obtida foi averiguada através da comparação de dados experimentais reportados na literatura, com variações nas dimensões da coluna, nos níveis de pressão e nos tipos de recheios. O modelo de Gualito et al. (1997) também foi utilizado nessa comparação, por ser considerado o melhor modelo para estimativa da área interfacial efetiva até o momento. Os resultados mostraram, no entanto, que o modelo de Wang Wang, Yuan e Yu (2006) se adequou mais aos dados experimentais do que o de Gualito e colaboradores (1997), revelando que os parâmetros incorporados à correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996) são de extrema importância para avaliação da área efetiva de transferência de massa, nos sistemas de destilação sob altas pressões.

Na última década, vários trabalhos a respeito de recheios estruturados, em colunas de destilação, vêm sendo desenvolvidos à luz dessa ferramenta poderosa que é o CFD (Fluidodinâmica Computacional), numa tentativa de se estudar a formação do filme líquido escoando em colunas de recheio para a estimativa da área efetivamente molhada, utilizada no cálculo do desempenho de colunas de destilação (MIGUEZ et al., 2007). No entanto, os efeitos do tratamento de superfície, do ângulo de corrugação dos

recheios e das propriedades físicas dos sistemas, na formação do filme líquido, ainda não foram investigados de maneira conclusiva, não apenas em termos de modelos disponíveis na literatura como nos trabalhos recentes em CFD.

Além disso, tem-se investido em pesquisas com novas geometrias de recheios estruturados com objetivo de se aumentar a capacidade desses recheios, sem detrimento de sua eficiência (OLUJIC et al., 2003), contribuindo para uma redução dos custos operacionais, em termos de uso de combustíveis fósseis e emissões atmosféricas.

III. Materiais e Métodos

III.1. Descrição da Unidade de Destilação QVF

A unidade de destilação, utilizada no presente trabalho foi adquirida através de um Projeto CTPETRO, denominado OTIMDEST, que visava ao projeto e à otimização da destilação de óleos pesados para a obtenção de óleos lubrificantes básicos, pela rota de hidrorrefino. O Projeto foi concebido através de um Convênio com a FINEP, PETROBRAS e UFRJ, esta representada pela FUJB. Com a verba da FINEP, foi adquirida a coluna de destilação, de diâmetro nominal de 40 mm e 2,2 m de altura, que opera continuamente, em alto vácuo, contendo recheio estruturado da Sulzer®. A unidade apresenta grande versatilidade tanto em termos de carga, podendo ser introduzida em três lugares diferentes na coluna, como em termos de pressão operacional, variando da pressão atmosférica até o vácuo de 1 (um) mbar.

A coluna possui as especificações técnicas descritas na Tabela III.1 e o seu projeto encontra-se esquematizado na Figura III.1.

Tabela III.1. Especificações técnicas da unidade de destilação QVF

Capacidade	Vasos	V1, V3, V4, V5	6 litros
		V2	0,25 litros
Potência de Aquecimento	Pré-aquecedor da carga	H1	500 W
	Refrervedor	H2	2400 W
	Aquecimento da coluna	H7 – H16	2260 W
Trocadores de Calor	Condensador	H3	0,3 m ²
	Resfriador do produto de topo	H4	0,3 m ²
	Resfriador do produto de fundo	H5	0,2 m ²
Diâmetro Nominal	Coluna	C1, C2	40 mm, 50 mm
Bombas	Alimentação (Engrenagens)	P1	1 – 82 ml/min
	Vácuo (Diafragma)	P2	2,5 m ³ /h

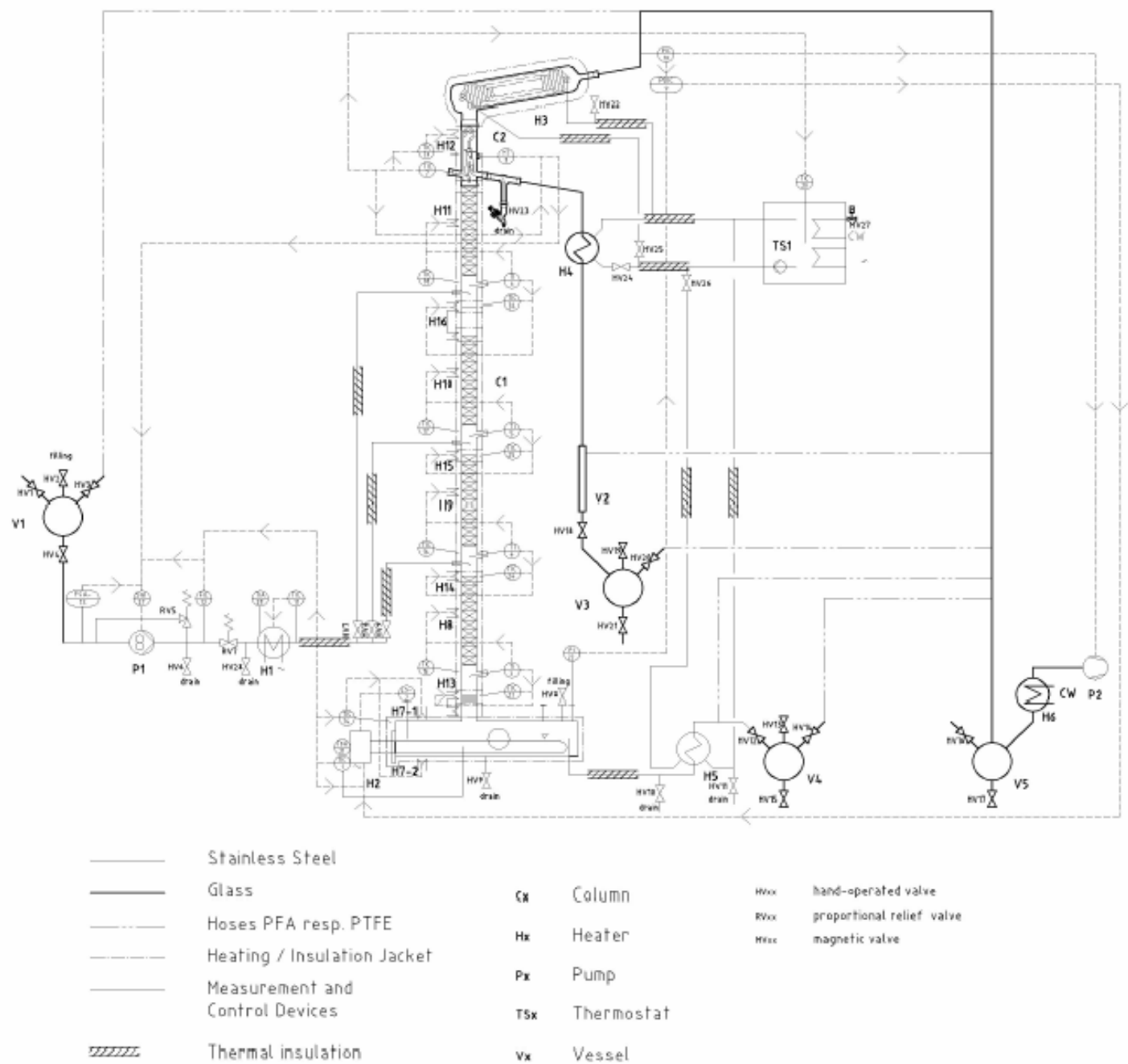


Figura III.1. Representação esquemática da unidade de destilação QVF

A coluna possui, como dispositivo de contato líquido/vapor, o recheio *Sulzer DX*. Esse recheio se insere na segunda geração de recheios estruturados e é feito de chapas de tecido metálico corrugado (*gauze metal*). Essas chapas corrugadas são montadas paralelas umas às outras, em camadas circulares de mesmo diâmetro que o casco da coluna. O líquido é distribuído no topo da coluna, formando um filme que escoar sobre a superfície do recheio, enquanto o vapor sobe pelo mesmo, de modo tortuoso, através das superfícies molhadas (Caldas e Paschoal, 1991). Esse recheio pode ser visualizado na Figura III.2 e as suas características geométricas estão descritas na Tabela III.2.



Figura III.2. Recheio estruturado DX da Sulzer®

Tabela III.2. Características geométricas do recheio estruturado DX da Sulzer®

Altura de corrugação (h)	2,9 mm
Base da corrugação (b)	6,4 mm
Ângulo de corrugação	60°
Área superficial específica (a_p)	900 m ² /m ³
Fração de vazios	93,7 %
Faixa de diâmetro recomendado	30-125 mm

Fonte: Comunicação via e-mail com Eng. Spiegel da Sulzer®

A coluna possui como sistema operacional o programa de controle de processo WinErs. A visualização da tela principal do programa pode ser vista na Figura III.3. Através do WinErs, se pode fixar o *set-point* de cada variável do processo, tais como, razão de refluxo, temperatura do refeedor, temperatura e vazão da alimentação,

pressão de operação, perda de carga na coluna, temperatura do óleo térmico que condensa o vapor de topo, que vai para o condensador, e temperaturas das jaquetas de aquecimento da coluna. Foram agrupados na Tabela III.3 os pontos de controle e a posição dessas variáveis podem ser visualizadas na Figura III.1.

Tabela III.3. Pontos de controle e medida da unidade de destilação QVF

TAG	Descrição
TIC-1	Controlador da temperatura do líquido no refeedor
LS-2	Controlador do nível do refeedor
TI-3 a TI-6	Medidor da temperatura do vapor ao longo das seções recheadas
TIC-7	Controlador da temperatura do vapor de topo
KS-8	Divisor de refluxo de topo
PDIC-9	Controlador da perda de carga na coluna
PIC-10	Controlador da pressão no topo da unidade
TIC-11	Controlador da temperatura da carga
FIC-12	Medidor da vazão da carga
FSA-13	Controle do medidor da vazão de alimentação
TIC-14 a TIC-19	Controlador de temperatura das <i>heating jackets</i>
TI-20	Medidor de temperatura do óleo térmico
TSA-21	Limitador da temperatura do refeedor
PI-22	Medidor da pressão no refeedor
TIC-23 a TIC-26	Controlador de temperatura das <i>heating jackets</i>
SQI-27	Controlador de velocidade de rotação da bomba de alimentação
TIA-28	Medidor da temperatura do pré-aquecedor da carga

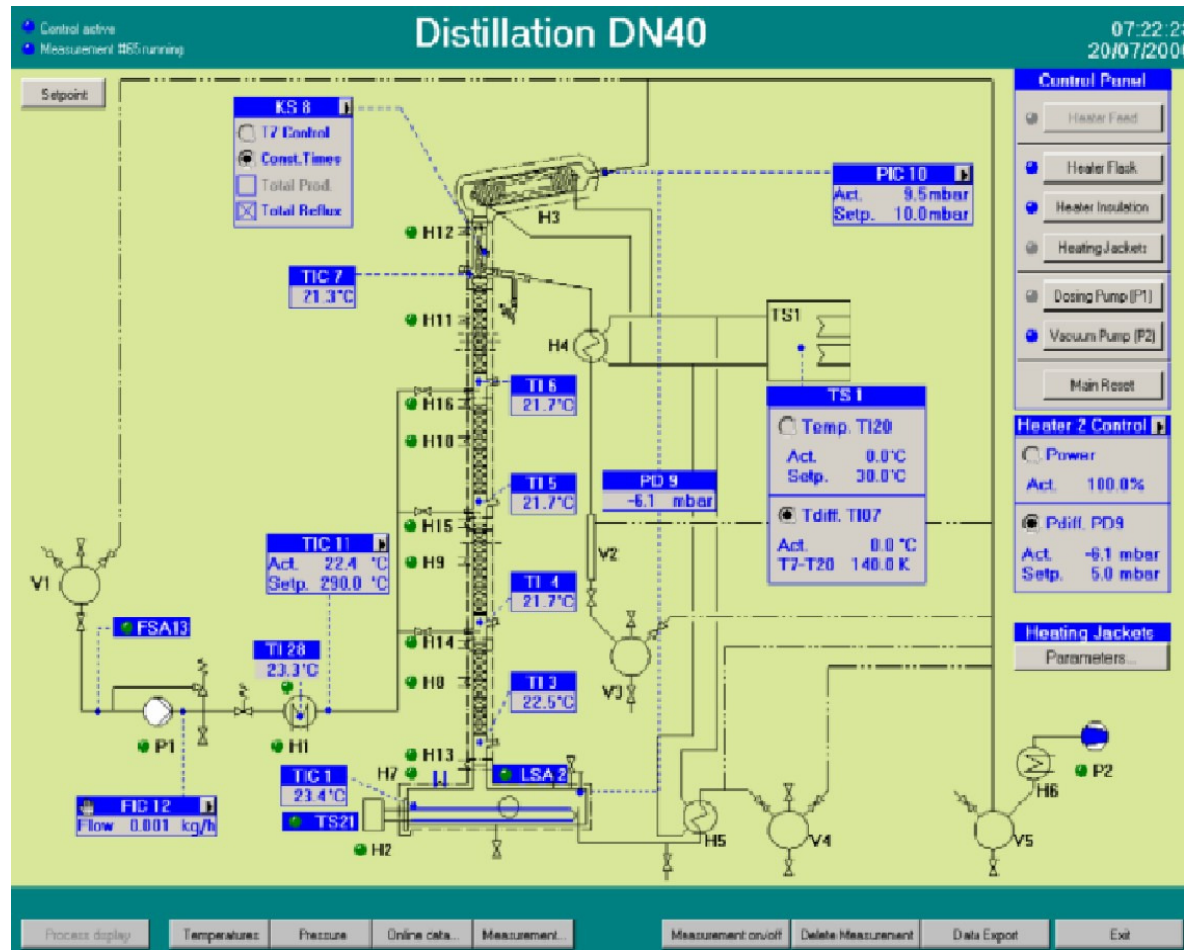


Figura III.3. Sistema operacional WinErs

A Figura III.4 mostra a coluna de destilação da QVF, que se encontra no LADEQ (Laboratório do Departamento de Engenharia Química) da UFRJ, onde foram realizados os testes experimentais. Atualmente, a unidade de destilação tem um sistema de exaustão muito eficiente que não está mostrado na foto.



Figura III.4. Coluna de destilação – LADEQ – UFRJ

III.2. Limitações da Unidade de Destilação Contínua da QVF

III.2.1. Vazão de Produto de Fundo

Durante o projeto e a fabricação da coluna de destilação DN40, simulações foram realizadas utilizando o software comercial PRO/II[®], a fim de se determinar as condições operacionais ótimas para separar a mistura de óleos básicos lubrificantes: Neutro Médio e *Bright Stock* (Orlando Jr., 2005).

De acordo com os resultados obtidos nessas simulações, dentre as variáveis operacionais escolhidas, tais como: razão de refluxo, temperatura de entrada da carga, vazão de produto de fundo, pressão operacional e local de entrada da carga, a variável que mais influenciava a caracterização dos produtos obtidos era a vazão de produto de fundo, entretanto, a unidade de destilação DN40 não possui sistema de medida para essa variável. Ou seja, a vazão de produto de fundo é estimada através do balanço de massa

entre a vazão da alimentação, que é medida pelo medidor do fluxo de carga, e pela vazão do produto de topo, que também pode ser medida pelo nível em um recipiente graduado e um cronômetro.

Assim, uma das variáveis mais importantes de atuação direta na caracterização dos produtos obtidos, apontada pela simulação, não pode ser usada experimentalmente de modo a influenciar a qualidade do Neutro Médio obtido no topo e do *Bright Stock*, obtido no fundo. Sendo assim, as variáveis investigadas nos testes foram: razão de refluxo, vazão de alimentação, temperatura de alimentação, pressão operacional e localização da carga.

III.2.2. Vazão de Alimentação

A coluna de destilação DN40 é altamente instrumentada, sendo o sistema de alimentação constituído de uma bomba de engrenagens, um fluxômetro, um vaso de alimentação e uma válvula de alívio. Através do sistema operacional WinErs, a vazão de alimentação é fixada, a bomba de engrenagens acionada e o fluxômetro mede a vazão alimentada à coluna. A coluna de destilação possui um controlador que atua juntamente com o fluxômetro de modo a ajustar, de forma ideal, a vazão de alimentação requerida.

Antes do início dos experimentos deste trabalho, o fluxômetro sofreu uma descalibração, e para não atrasar mais ainda os experimentos, optamos por acionar a bomba no modo manual. Dessa maneira, se utilizava uma curva de calibração (vazão x velocidade de rotação) para averiguar a vazão alimentada.

Após o início dos experimentos, com a carga NM/BS, a bomba teve suas engrenagens danificadas por sólidos contidos nessa carga. A solução encontrada para que fosse dada continuidade aos experimentos foi o ajuste da vazão de alimentação pela válvula de alívio, sendo a carga introduzida na unidade, pelo uso do vácuo.

Problemas posteriores com a válvula de alívio provocaram sua substituição por uma outra válvula micrométrica de ajuste manual e mais fácil e, assim, com a ajuda de uma balança podia-se controlar a massa de carga que entrava na coluna, calculando-se a vazão média de alimentação.

III.2.3. Temperatura de Topo

Após visita do engenheiro alemão Wolfgang Groeschel da QVF, em outubro de 2005, para efetuar o *troubleshooting* da unidade e finalmente entregá-la, após os ajustes

necessários, tais como aumento da potência do refeedor de 1,0 para 2,4 kW, observou-se em um teste com a mistura NM/BS, que a temperatura do vapor, em contato com o divisor de refluxo, excedera a 250 °C. O manual da coluna de destilação explicitava que a temperatura no topo não poderia exceder esse valor. Mais tarde, em contato com o Eng. Gröeschel, este afirmou que essa limitação se devia ao divisor de refluxo e não pelo condensador em si, que é feito de vidro borossilicato, e que agüenta temperaturas bem superiores. Para evitar tal situação, já que o divisor de fluxo é feito de outro tipo de vidro e possui estrutura delicada, a temperatura de topo foi limitada a 250 °C e toda vez que esse valor era ultrapassado, ocorria o desligamento automático do refeedor, de modo a diminuir a vaporização da mistura ao longo da coluna, reduzindo assim a temperatura de topo.

III.2.4. Temperatura de Fundo

Outra limitação da unidade de destilação, construída pela QVF, é a da temperatura do líquido no refeedor, pois o medidor de temperatura do mesmo está limitado a 350 °C. Quando essa temperatura é excedida, ocorre o desligamento automático do refeedor. A limitação dessa temperatura se deve ao visor de vidro existente no refeedor, para facilitar a visualização do nível de líquido no mesmo.

III.2.5. Amostragem do Produto de Fundo

A coleta do produto de fundo se dá através de um “ladrão” que há no interior do refeedor. Desse modo, quando se inicia a operação contínua, o produto de fundo se encaminha para o seu vaso coletor como “se fosse o sobrenadante de uma caixa d’água cheia”. O problema desse sistema é que, no modo de partida da unidade, quando o material do refeedor (carga) é aquecido, para se chegar ao *steady-state*, há uma expansão volumétrica da carga que acaba saindo pelo ladrão e que vai sendo recolhido na linha que conecta o refeedor e o vaso coletor de produto de fundo. Esse tipo de problema demorou a ser detectado pela equipe de projeto, sendo assim, as análises de curvas de destilação revelavam uma semelhança entre o produto de fundo e a carga. Tentou-se resolver esse problema, em primeira instância, amostrando o produto de fundo diretamente do refeedor, pois se achava que, depois de finalizado o experimento, o que estava no refeedor já seria o produto de fundo. Contudo, avaliou-se que a potência do refeedor (2,4 kW) era insuficiente para transformar totalmente o conteúdo do mesmo (12 litros de mistura alimentada) em produto de fundo, pois

análises dessa amostragem ainda indicavam semelhança com a carga. Um fato interessante é que unidades contínuas de laboratório em geral não necessitam de um volume tão grande no refeedor, facilitando, por exemplo, à chegada ao regime permanente, em um período de tempo menor. No nosso caso, para se conseguir operar, levava-se 3 horas para alcançar 350 °C no fundo e mais cerca de 2 horas para o perfil de temperatura se estabelecer na coluna a refluxo total.

A solução encontrada, então, foi a idealização de uma retirada lateral no final da seção recheada. Essa modificação foi realizada em outro projeto CTPETRO denominado LUBDEST, através de um Convênio com FINEP, PETROBRAS e UFRJ, representado também pela FUJB. Essa e outras modificações feitas na unidade serão mostradas na seção III.7.

III.3. Operação da Unidade de Destilação Contínua da QVF

A operação contínua da unidade de destilação segue, em uma descrição bem simplificada, conforme a seqüência abaixo, independentemente da carga a ser processada:

1. Enchimento do refeedor, em aproximadamente 12 litros, fazendo-se vácuo na coluna.
2. Ligar a bomba de vácuo e fixar a pressão de operação desejada.
3. Aquecimento da mistura do refeedor – a temperatura na condição de regime permanente era definida através da simulação da operação contínua, através do software PRO II.
4. Acionar as jaquetas de aquecimento da coluna, quando fosse atingindo o ponto de bolha da mistura.
5. Ligar o banho térmico que direciona o fluido frio para o condensador quando o vapor atingir o topo da coluna, assim como, a água de resfriamento do fluido térmico (água de torneira).
6. Deixar a unidade em refluxo total até que fosse atingido o perfil de temperaturas desejado na coluna, de acordo com a simulação da corrida no regime permanente.
7. Tendo atingido o perfil de temperatura, esperar pelo menos 30 minutos, para se observar se há estabilização das temperaturas e da pressão da unidade.

8. Começar a operação contínua, fixando a razão de refluxo, a temperatura, a posição e a vazão da alimentação.
9. Medir a vazão de produto de topo, de modo a determinar, pelo balanço de massa na coluna, a vazão de produto de fundo.
10. Operar continuamente a coluna até esgotar o balão de alimentação.
11. Pesagem dos produtos obtidos para verificação do balanço de massa.

III.4. Curvas de Destilação

Na caracterização dos produtos gerados em cada experimento, curvas de destilação foram requeridas para o controle da destilação e garantia da pureza dos produtos obtidos. Entretanto, como as cargas usadas em cada etapa deste trabalho são diferentes, a escolha correta do método de caracterização por curva de destilação é imprescindível.

Um dos métodos de caracterização mais usados na indústria do petróleo é o da destilação simulada (DS), conceito introduzido na década de 60, que passou a fornecer informações bastante confiáveis em um intervalo de tempo menor. Na DS, o principal objetivo é simular um processo de destilação, como o próprio nome sugere, através do uso da cromatografia gasosa, em que os componentes da amostra analisada eluem na coluna cromatográfica, em ordem crescente de pontos de ebulição. Assim, operado em condições apropriadas, um cromatógrafo a gás funciona como uma unidade de microdestilação altamente eficiente (FERREIRA; AQUINO NETO, 2005).

A tecnologia utilizada nesse processo é baseada na cromatografia gasosa, inicialmente proposta com a utilização de colunas recheadas. A partir de 1973, a ASTM passou a estabelecer metodologias padronizadas de análise por destilação simulada: D-3710, D-2887 e D-5307, todas publicadas no “ASTM Standards on Chromatography”. Com o advento da DS, baseada em ensaios cromatográficos, os métodos de destilação convencionais passaram a ser denominados de destilação física, como uma forma de diferenciação entre os diferentes processos (FERREIRA; AQUINO NETO, 2005).

A análise cromatográfica por destilação simulada deve ser capaz de fornecer, como resultado final, uma curva de destilação semelhante àquela gerada pelo método convencional PEV (Ponto de Ebulição Verdadeiro), apresentada na Figura III.5. A diferença é que essa curva passa a ser obtida em um intervalo de tempo menor, e os

valores de PFE (Ponto Final de Ebulição) alcançados são bem mais altos (FERREIRA; AQUINO NETO, 2005).

Dentre os métodos de DS, podem-se destacar os denominados D-3710, D-5307 e D-2887, estes reconhecidos pela ASTM; o D-2887 estendido e o HT-750, não reconhecidos pela ASTM. A Tabela III.4 mostra o tipo de amostra empregada em cada método. Já a Figura III.6 apresenta, para quatro desses métodos, a abrangência com relação ao número máximo de átomos de carbono de compostos passíveis de análise.

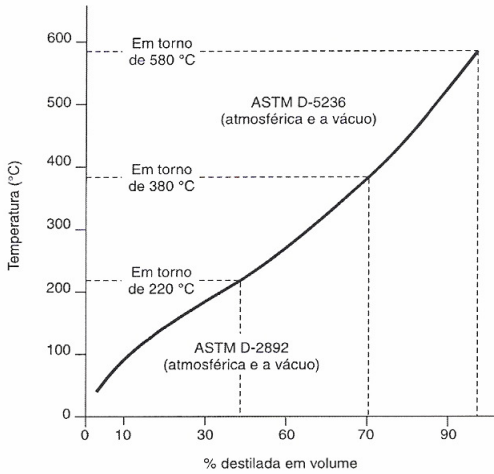


Figura III.5. Curva de destilação obtida pelo método PEV
(FERREIRA; AQUINO NETO, 2005)

Tabela III.4. Métodos de DS e os respectivos tipos de amostra
(FERREIRA; AQUINO NETO, 2005)

Método	ASTM D-3710	ASTM D-2887	ASTM D-5307	HT-750
Amostra	Gasolina	Querosene	Petróleo	Gasóleo pesado
	Nafta	Diesel		Neutro leve
		Gasóleo leve		Neutro médio
		Gasóleo pesado		Neutro pesado
		Neutro leve		<i>Bright Stock</i>
		Neutro médio		Resíduos
		Neutro pesado		

A Tabela III.5 compara alguns métodos de destilação física (três primeiras linhas) com os de DS. Uma análise da referida tabela mostram que os métodos de DS

apresentam melhor reprodutibilidade e possui tempos de análise menores quando comparados aos de destilação física. A automação, assim como a menor intervenção do operador, garante aos métodos de DS as reprodutibilidades observadas.

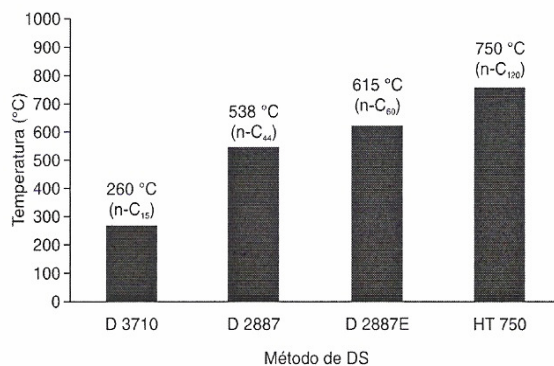


Figura III.6. Abrangência dos métodos de DS em termos do número de carbonos da amostra (FERREIRA; AQUINO NETO, 2005)

Tabela III.5. Comparação dos métodos de DS x métodos de destilação física (FERREIRA; AQUINO NETO, 2005)

Método	PFE (°C)	Tempo de Análise (h)	Calibração	Reprodutibilidade (°C)
D-2892	370	20	Manual	30
D-86	370	1	Manual	10
D-1160	550	3	Manual	20
D-3710	260	0,5	Automática	3
D-2887	538	0,5	Automática	2

III.5. Condições Operacionais para a Carga C10-C13

Com a finalidade de se estimar a eficiência do recheio *Sulzer DX*, foram idealizadas duas corridas, cada uma com sua respectiva replicata, para uma carga contendo majoritariamente decano, undecano, dodecano e tridecano. A primeira tinha como objetivo separar decano com 98 % de pureza no topo e a segunda, separar decano e undecano, com a mesma pureza no topo. As caracterizações das cargas e de todos os produtos gerados nas corridas podem ser vistas no Anexo I.

No Capítulo IV, será discutida cada uma das etapas do cálculo de número de estágios necessários, através dos métodos aproximados para destilação multicomponente e da simulação da coluna de destilação que geraram as condições operacionais, para cada corrida, e que podem ser visualizadas na Tabela III.6.

Tabela III.6. Condições operacionais para carga C10-C13

Separação de 98 % de pureza de C10 ⁺ no topo	
Pressão	800 mbar
Temperatura do refeedor	201 °C
Vazão de alimentação	3 kg/h
Seção de alimentação	MEIO
Temperatura de alimentação	25 °C
Razão de Refluxo	5
Diferencial de pressão topo/fundo	5-10 mbar

Separação de 98 % de pureza de C11 ⁺ no topo	
Pressão	800 mbar
Temperatura do refeedor	213 °C
Vazão de alimentação	3 kg/h
Seção de alimentação	MEIO
Temperatura de alimentação	25 °C
Razão de Refluxo	3
Diferencial de pressão topo/fundo	5-10 mbar

III.6. Condições Operacionais para a Carga NM/BS

O procedimento para processar a mistura NM/BS foi bem diferente daquele utilizado com a carga C10-C13, pois alguns parâmetros já haviam sido definidos anteriormente por Orlando Jr. (2005), como por exemplo, a pressão operacional, que fora definida em 10 mbar. O trabalho de simulação, na presente tese, para a carga NM/BS foi um aprimoramento das simulações realizadas no decorrer do projeto OTIMDEST, pois, nessa época, não se tinha conhecimento de algumas limitações da

coluna. A Tabela III.7 mostra o planejamento experimental proposto, antes da montagem da coluna, e a Tabela III.8 mostra o planejamento posterior, executado nesta tese. Os dados de entrada das simulações para o novo planejamento serão apresentados no capítulo IV.

A investigação da influência de alguns parâmetros operacionais nas composições de topo e de fundo para a carga NM/BS foi estudada por Orlando Jr. (2005), idealizando a Tabela III.7. Os resultados do trabalho podem ser vistos nas Figuras III.7 a III.14, seguintes, onde cada condição operacional simulada é representada pelos pontos e as linhas contínuas, as curvas de destilação HT-750 do Neutro Médio e do *Bright Stock*, obtidas experimentalmente pelo Laboratório de Avaliação de Petróleos no CENPES/PETROBRAS:

- A influência da pressão de operação pode ser vista nas Figuras III.7 e III.8. Foram estudados três níveis de pressão: 10, 15 e 20 mm Hg, os quais mostraram que a composição de topo e de fundo era a mesma para tais níveis, pois os pontos da curvas ASTM D-2887 são coincidentes. Tal indicação revela que esses incrementos de pressão não afetam a composição dos produtos de topo e de fundo, quando se processa tal carga.
- Nas Figuras III.9 e III.10, a temperatura de alimentação da carga é a variável a ser otimizada. Entretanto, assim como foi com a pressão, as curvas ASTM D-2887 geradas para a temperatura de 275 ° e 300 °C são iguais, revelando que essa variável também não possui grande influência nas composições de topo e de fundo.
- A influência da vazão de produto de fundo pode ser vista nas Figuras III.11 e III.12, onde a vazão de 0,6 l/h gera resultados mais próximos das curvas de destilação simulada do BS e do NM. Quando a vazão utilizada na simulação é 0,7 l/h, os resultados de destilação simulada apresentam desvios maiores que quando a vazão é 0,6 l/h. Ao contrário das outras variáveis operacionais citadas, diferentes vazões de produto de fundo produzem composições de topo e de fundo diferentes.
- A influência da razão de refluxo pode ser analisada nas Figuras III.13 e III.14, em que as razões de refluxo de 0,5 e 1 só geram diferenças na composição de topo com 90 % de massa vaporizada, sendo a razão de 0,5 a que possui menor desvio em relação à curva do NM. Com relação ao BS, as curvas geradas com razão de refluxo 0,5 e 1 são coincidentes.

De uma forma geral, pode-se dizer que a única variável operacional estudada que tenha causado mudanças nas composições de topo e fundo quando alterada é a vazão de produto de fundo. Por essa razão, o planejamento da Tabela III.7 incluiu a vazão de produto de fundo como variável de estudo.

Tabela III.7. Planejamento experimental proposto antes da montagem da coluna

Caso	P (mm Hg)	T _F (°C)	B (l/h)	RR
1	10	275	0,6	0,5
2				1
3			0,7	0,5
4				1
5		300	0,6	0,5
6				1
7			0,7	0,5
8				1
9	15	275	0,6	0,5
10				1
11			0,7	0,5
12				1
13		300	0,6	0,5
14				1
15			0,7	0,5
16				1
17	20	275	0,6	0,5
18				1
19			0,7	0,5
20				1
21		300	0,6	0,5
22				1
23			0,7	0,5
24				1

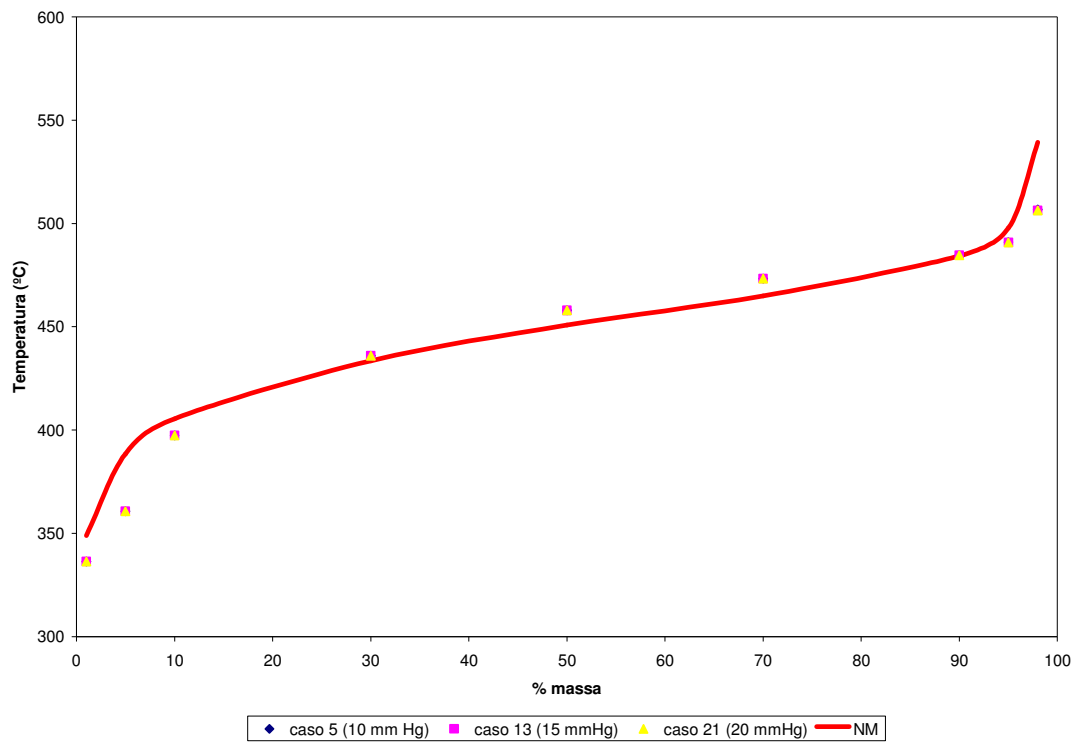


Figura III.7. Influência da pressão de operação na composição de topo

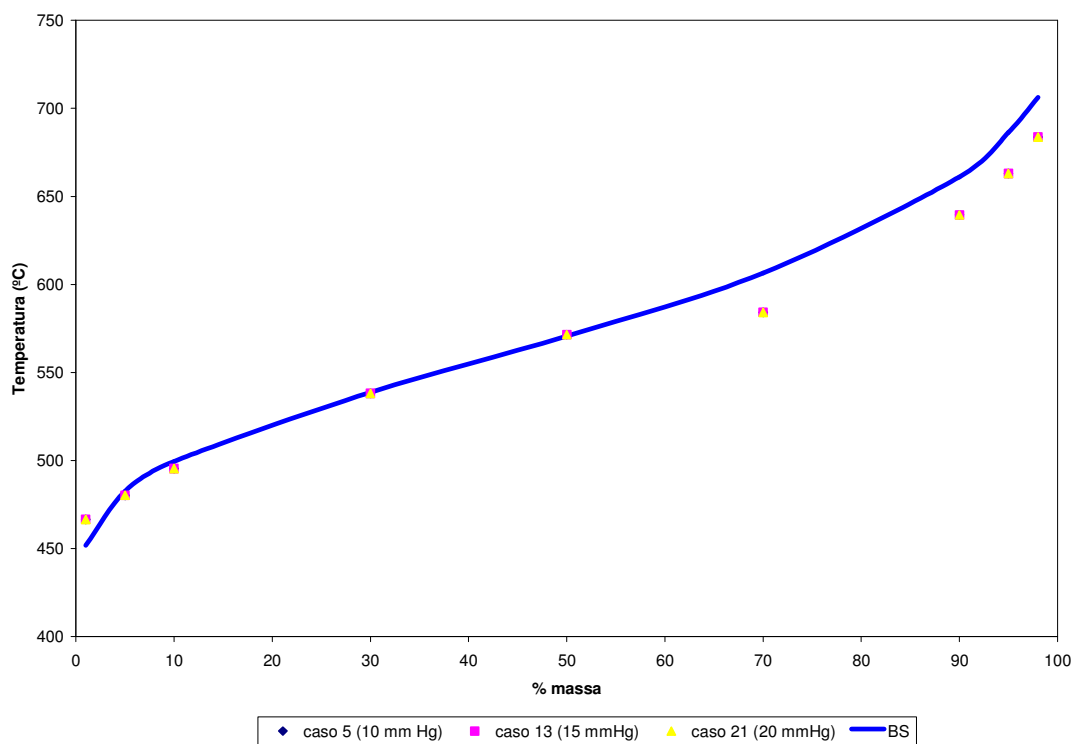


Figura III.8. Influência da pressão de operação na composição no fundo

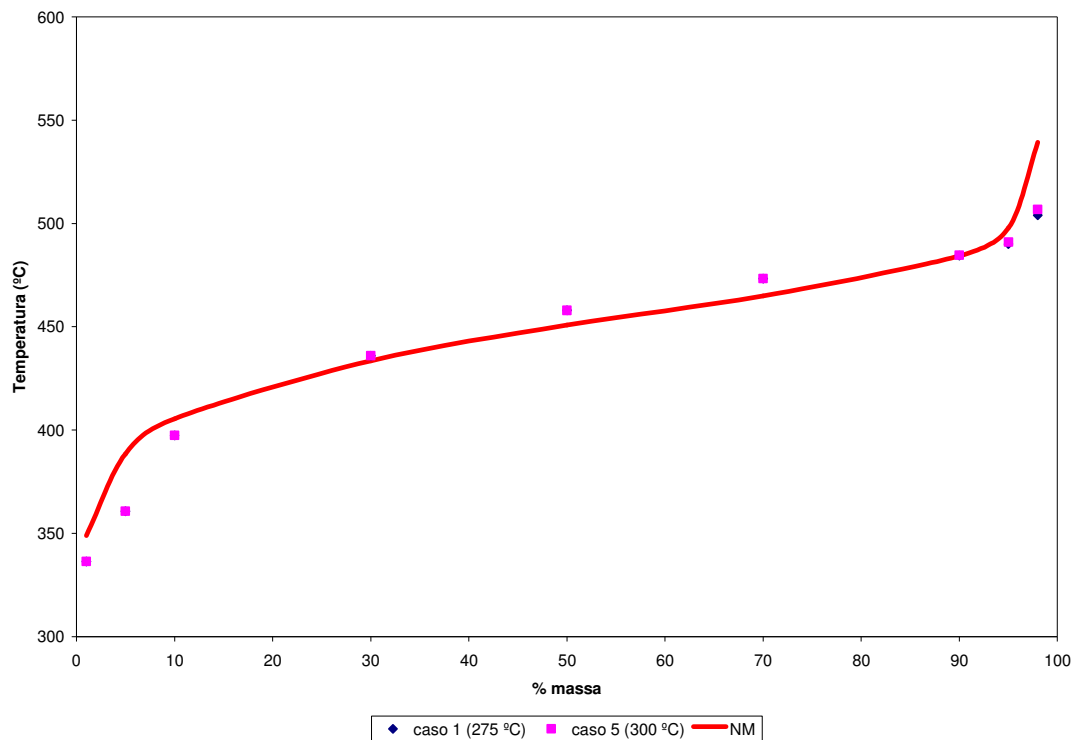


Figura III.9. Influência da temperatura de alimentação na composição de topo

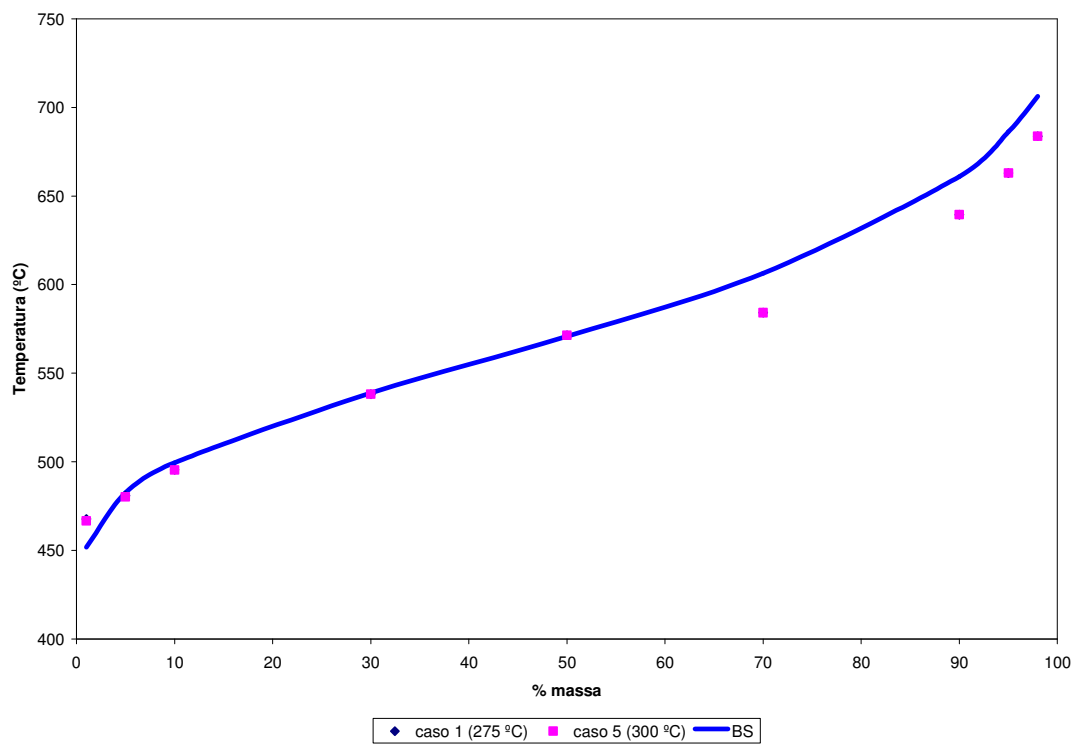


Figura III.10. Influência da temperatura de alimentação na composição de fundo

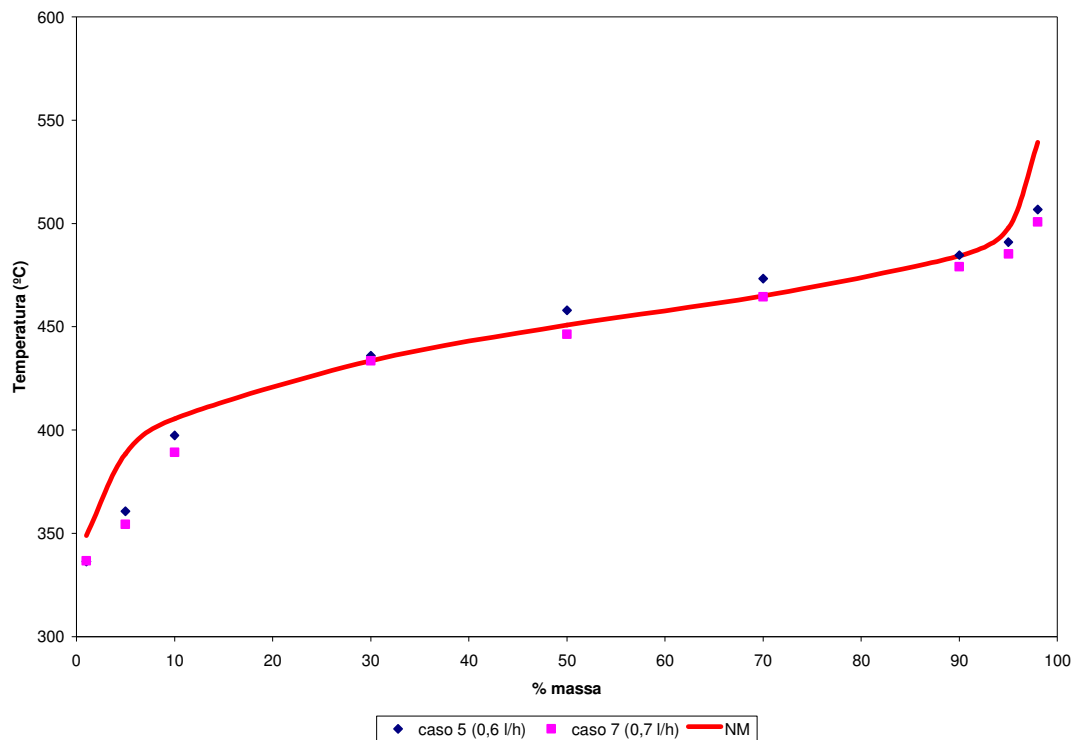


Figura III.11. Influência da vazão de produto de fundo na composição de topo

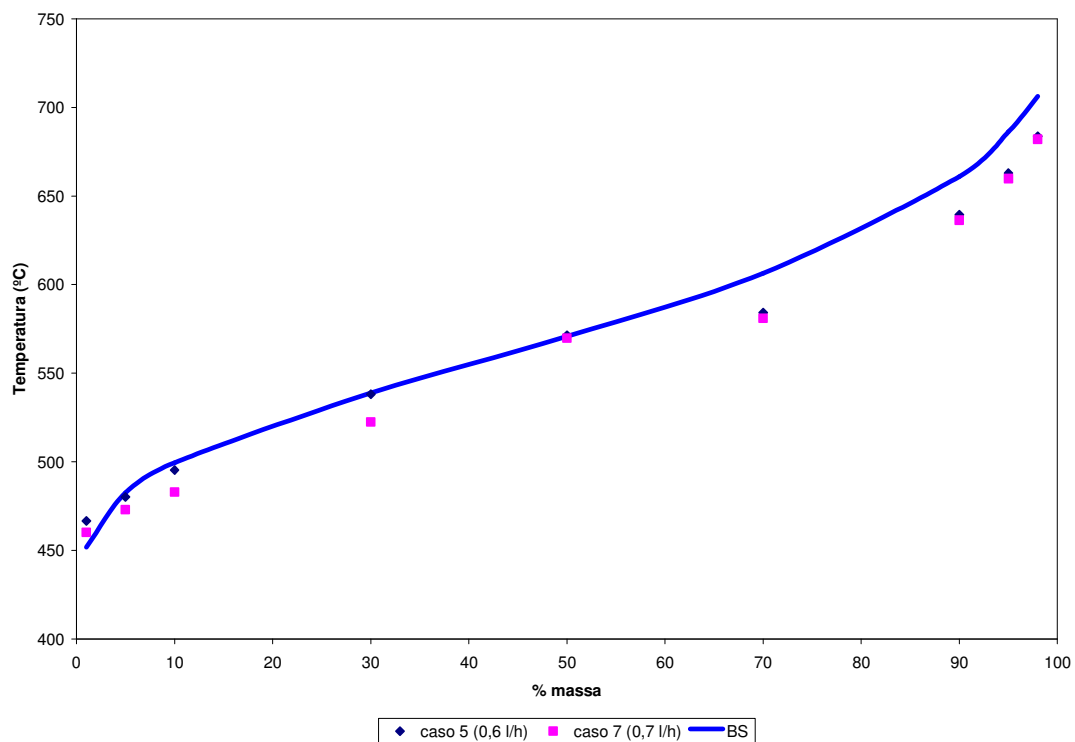


Figura III.12. Influência da vazão de produto de fundo na composição de fundo

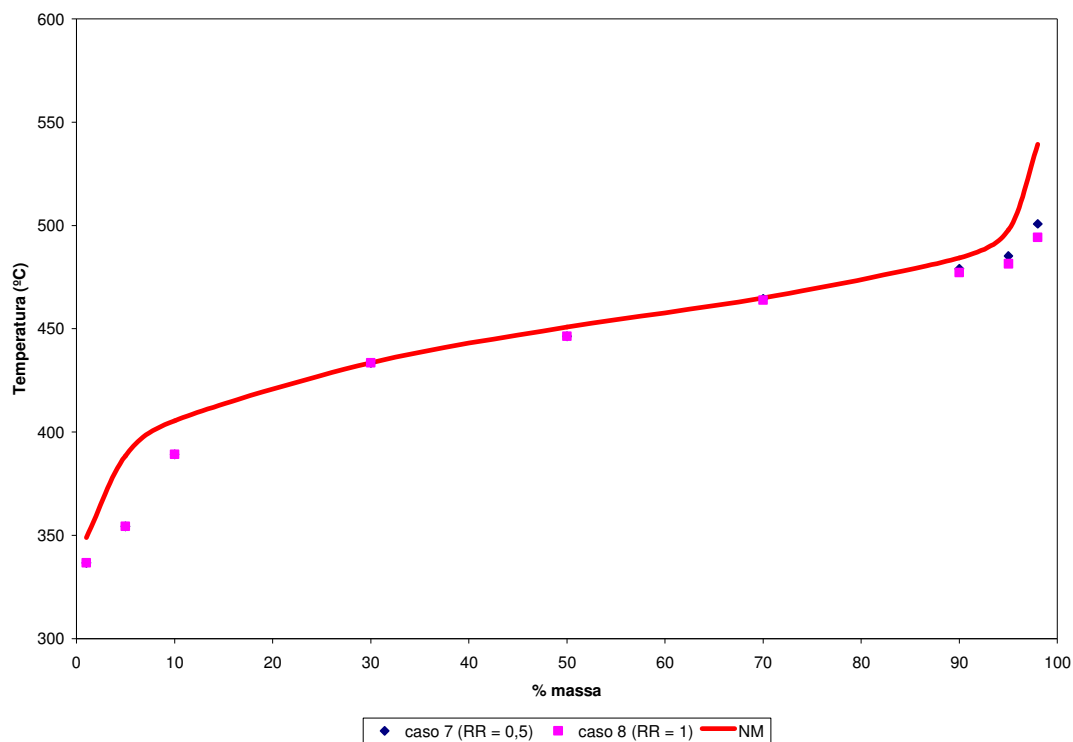


Figura III.13. Influência da razão de refluxo na composição de topo

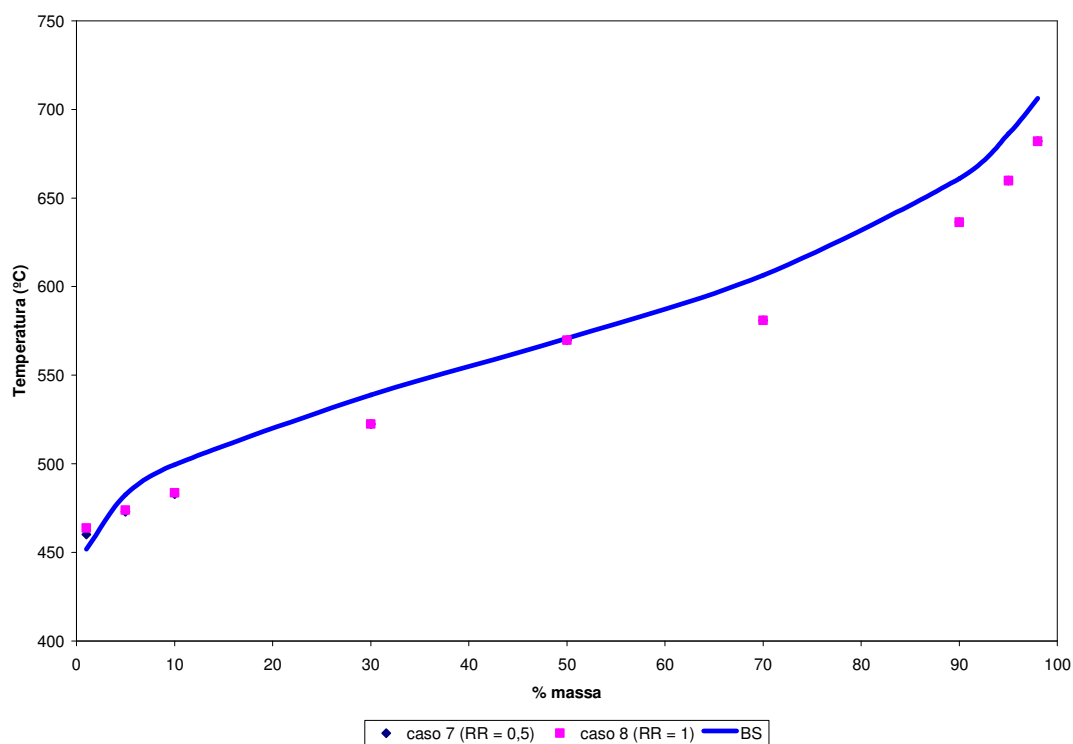


Figura III.14. Influência da razão de refluxo na composição de fundo

Como foi explicitado na seção III.2.1, a vazão de produto de fundo não podia ser medida, quando da montagem da coluna, assim, uma nova programação (Tabela III.8) de experimentos foi organizada de modo a constatar se realmente as outras variáveis operacionais apresentavam ou não alguma influência sobre a caracterização dos produtos de topo e fundo. A perda de carga adotada para os experimentos foi de 5 mbar.

Tabela III.8. Nova programação da unidade para os testes com a mistura NM/BS

Pressão = 10 mbar - Temp. Refervedor = 350 °C - F = 1 kg/h			
Corrida	RR	Alimentação	Temp. Carga (°C)
1	1	Topo	230 °C
2	2	Topo	
3	1	Meio	
Pressão = 10 mbar - Temp. Refervedor = 350 °C - F = 1 kg/h			
Corrida	RR	Alimentação	Temp. Carga (°C)
4	1	Topo	270
5	2		
6	3		
7	1	Meio	280
8	2		
9	3		
10	1	Fundo	290
11	2		
12	3		
Pressão = 1 mbar - Temp. Refervedor = 350 °C - F = 1 kg/h			
Corrida	RR	Alimentação	Temp. Carga (°C)
13	1	Meio	280
14	2		
Pressão = 10 mbar - Temp. Refervedor = 350 °C - F = 2 kg/h			
Corrida	RR	Alimentação	Temp. Carga (°C)
15	1	Meio	280 °C
Pressão = 10 mbar - Temp. Refervedor = 350 °C - F = 0,5 kg/h			
Corrida	RR	Alimentação	Temp. Carga (°C)
16	1	Meio	280 °C

III.7. Modificação da Unidade QVF

Para sanar o problema de amostragem de produto de fundo da coluna QVF, explicitado na seção III.2.5, foi montada uma retirada lateral no fundo da última seção recheada. O custo dessa operação foi a remoção de 4 elementos de recheio, ou seja, 0,22 m de altura, significando uma perda de estágios teóricos.

A Figura III.15 mostra a coluna antes da colocação das retiradas laterais, onde o vaso A assinalado pode conter, quando em operação, os superleves não-condensáveis e já o vaso B, recolhe o produto de topo.

Na Figura III.16, os vasos A e B possuem a mesma função daquela antes da modificação da unidade. Enquanto os vasos C e D, adicionados na modificação, possuem a função de recolher o produto da retirada lateral de topo (vaso C) e o produto de fundo, não mais retirado do refeedor, mas do fundo da coluna.

Para verificar a influência nos resultados da nova retirada de produto de fundo, foram reproduzidos os experimentos da Tabela III.6 com a carga C10-C13. Tais experimentos foram comparados com aqueles obtidos antes da modificação, para avaliar se houve perda de eficiência, em termos de composição do produto de topo e de fundo.

As vantagens da colocação da nova retirada de produto de fundo no processamento da carga NM/BS não puderam ser verificadas no presente trabalho, pois a coluna está, no momento, em fase final de instalação das modificações quanto a troca de sensores de pressão e do material do divisor de refluxo, que antes era de vidro e agora passa a ser de aço inoxidável.

A influência da colocação da retirada lateral, no topo da coluna, na composição dos produtos obtidos a partir da carga NM/BS também não será avaliada neste trabalho.

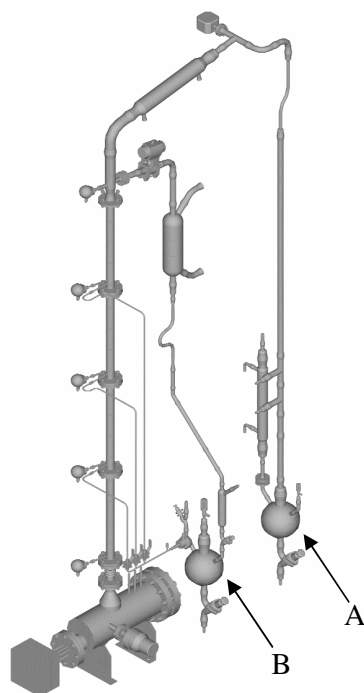


Figura III.15. Unidade QVF antes da modificação

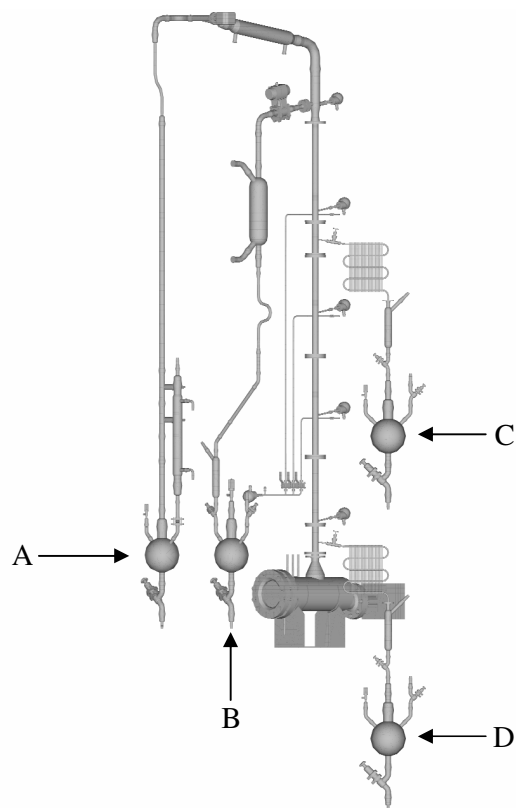


Figura III.16. Unidade QVF após modificação

III.8. Caracterização dos Produtos

Diante do que foi explicado sobre curvas de destilação na seção anterior, a Tabela III.9 mostra as análises escolhidas para a caracterização de cada carga, assim como, as metodologias empregadas. Todas as análises feitas foram realizadas no Laboratório de Avaliação de Petróleos no CENPES/PETROBRAS.

Na caracterização da amostra C10-C13, foram requisitadas análises de cromatografia gasosa para identificação do percentual de cada n-parafina contida na amostra de modo a determinar a eficiência de separação da coluna.

Tabela III.9. Análises requeridas na caracterização dos produtos

Amostra	Análise	Método
C10-C13	Densidade	ISO 12185
	Viscosidade	ASTM D-445
	Curva de destilação física	ASTM D-86
	Cromatografia gasosa	Metodologia Petrobras
NM/BS	Densidade	ISO 12185
	Viscosidade	ASTM D-445
	Curva de destilação simulada	HT-750 (Metodologia Petrobras)

IV. Simulação de Coluna de Destilação utilizando o Software Comercial PRO/II®

Uma etapa de grande importância para se obter as condições operacionais ótimas dos experimentos realizados neste trabalho, seja com a carga C10-C13, seja com a mistura de óleos básicos lubrificantes, foi a simulação utilizando o software PRO/II®. Nessa simulação, em que se usou o módulo da coluna de destilação rigorosa, podem-se prever resultados quanto à qualidade de cortes ou à pureza de produtos.

A simulação da coluna de destilação com a carga C10-C13 objetivou realizar duas diferentes separações – uma delas seria o corte do C10⁻, com pureza de 98 % no topo da coluna; o outro corte tinha o objetivo de separar C11⁻, com pureza de 98 % no topo, a fim de se determinar os parâmetros operacionais da unidade de destilação QVF. Entretanto, além do software PRO/II®, foi necessária a programação, em plataforma MatLab®, do modelo aproximado de destilação multicomponente, onde se obtém o número de estágios teóricos e a razão de refluxo operacional, para a separação de misturas multicompostas, já que um dos dados de entrada desse módulo de coluna de destilação no PRO/II® é o número de estágios ideais para a referida separação.

A simulação da coluna de destilação, na separação dos óleos básicos lubrificantes, Neutro Médio e *Bright Stock*, também foi realizada com o software PRO/II®, porém foi apenas adaptada para a obtenção dos parâmetros operacionais da unidade QVF (perfis de temperatura e caracterização dos produtos obtidos) e não concebida desde o princípio, já que trabalhos anteriores (ORLANDO Jr., 2005) e relatórios do OTIMDEST já haviam sido realizados com esse propósito, conforme discutido no Capítulo III.

Os objetivos da simulação da destilação de cada carga diferem entre si, pois ao se simularem os cortes com a carga C10-C13, pretendia-se encontrar as condições ótimas para a realização dos cortes de C10⁻ e C11⁻ com 98 % de pureza no topo, ou seja: temperatura do refeedor, razão de refluxo, temperatura e vazão de alimentação, vazões dos produtos de topo e de fundo e pressão operacional. Já com a mistura de óleos lubrificantes, todos esses parâmetros operacionais já haviam sido estabelecidos, anteriormente, como mostrado na Tabela III.6, e planejava-se apenas estudar a influência desses parâmetros na caracterização dos produtos de topo e fundo (NM e BS, respectivamente). De uma forma geral, a simulação da destilação de cada carga, percorria caminhos reversos. Na simulação com a carga C10-C13, a pureza foi previamente especificada e pretendia-se determinar as condições operacionais para

obtenção dessa pureza. Já com relação à carga NM/BS, as condições operacionais foram especificadas, de modo, a se encontrar as caracterizações dos produtos de topo e de fundo, mais próximas possíveis da dos óleos básicos que compuseram a carga.

As próximas seções mostrarão os dados de entrada empregados, assim como, as especificações da simulação da coluna de destilação para a realização dos cortes das cargas NM/BS e C10-C13, além da metodologia empregada para a obtenção do número de estágios teóricos, na separação da carga C10-C13.

IV.1. Método Aproximado para Destilação Multicomponente

A metodologia utilizada para obtenção do número de estágios teóricos na separação da carga C10-C13 segue a seqüência abaixo e pode ser encontrada em linguagem MatLab® no Apêndice IV.

- i. Obtenção dos dados de equilíbrio líquido-vapor e propriedades físicas e termodinâmicas da mistura C10-C13

As constantes de Antoine para a estimativa da pressão de vapor dos componentes puros foram obtidas pela regressão dos dados de pressão de vapor, em função da temperatura, encontrados no *CHEMICAL ENGINEERS' HANDBOOK* (PERRY; GREEN, 1984), usando o software Statistica®, versão 6.0. A relação de Antoine é dada pela eq. IV.1 onde os coeficientes estimados para cada composto encontram-se na Tabela IV.1:

$$\ln P_{sat} = A - \frac{B}{T + C} \quad (IV.1)$$

onde A, B e C – constantes da Equação de Antoine

P_{sat} – pressão de vapor do componente, bar

T – temperatura do sistema, K

Outra propriedade física a ser obtida para a mistura C10-C13 é a capacidade térmica específica (c_p). Dados dessa propriedade foram encontrados no *CHEMICAL ENGINEERS' HANDBOOK* (PERRY; GREEN, 1984) e são válidos entre 0 e 50 °C. A Tabela IV.2 mostra os c_p 's dos componentes puros.

Tabela IV.1. Coeficientes da equação de Antoine

Componente	A	B	C
n-C10	10,05787	3929,302	- 56,5722
n-C11	11,27985	4983,342	- 27,1458
n-C12	9,813810	4019,224	- 79,7941
n-C13	12,65094	6486,206	5,533018

Tabela IV.2. Capacidade térmica específica do líquido

Componente	c_p [J/(kmol °C)] x 10^{-5}
n-C10	2,97
n-C11	3,27
n-C12	3,54
n-C13	3,84

A capacidade térmica específica da mistura foi obtida pela seguinte relação:

$$c_p = \sum_i^{NC} x_{Fi} c_{pi} \quad (\text{IV.2})$$

onde c_p – capacidade térmica específica da mistura, J/(kmol °C)

c_{pi} – capacidade térmica específica do componente puro, J/(kmol °C)

x_{Fi} – fração molar do componente na mistura

i – componente

NC – número de componentes

O calor latente de vaporização é também uma propriedade termodinâmica a ser estimada e para isso utilizou-se a equação de Clapeyron (SMITH; VAN NESS; ABBOTT, 2000) para sistemas bifásicos:

$$\frac{dP_{sat}}{dT} = \frac{\Delta H^{lv}}{T \Delta V^{lv}} \quad (\text{IV.3})$$

onde $\frac{dP_{sat}}{dT}$ – variação da pressão de vapor com a temperatura do sistema

ΔH^{lv} – calor latente de vaporização

ΔV^{lv} – variação de volume molar que ocorrem quando da transição do componente da fase líquido para fase vapor

T – temperatura do sistema

Na vaporização a baixas pressões, podem ser introduzidas aproximações aceitáveis na equação IV.3 supondo-se que a fase vapor seja um gás ideal e que o volume molar do líquido seja desprezível, quando comparado ao volume molar do vapor, tornando-a mais simples e fácil de usar:

$$\Delta H^{lv} = -R \frac{d \ln P_{sat}}{d(1/T)} \quad (IV.4)$$

onde R – constante universal dos gases, 8314 J/(kmol K)

P_{sat} – pressão de saturação do componente, bar

T – temperatura do sistema, K

O calor latente de vaporização da mistura em uma determinada temperatura T é dado pela seguinte expressão:

$$\Delta H_{mist}^{lv} = \sum_i^{NC} x_i \Delta H_i^{lv} = RT^2 \sum_i^{NC} x_i \frac{B_i}{(T + C_i)^2} \quad (IV.5)$$

onde ΔH_{mist}^{lv} – calor latente de vaporização da mistura, J/kmol

ΔH_i^{lv} – calor latente de vaporização do componente puro, J/kmol

B_i e C_i – constantes de Antoine para o componente puro

i – componente

NC – número de componentes

T – temperatura do sistema, K

ii. Estimativas da temperatura de topo e de fundo da coluna de destilação

A temperatura de topo foi estimada através do cálculo do ponto de orvalho, conhecendo-se previamente a composição da fase vapor, através das purezas especificadas para o produto de topo, considerando-se condensação total dessa fase. Já a temperatura de fundo foi estimada através do cálculo do ponto de bolha com a composição especificada para o produto de fundo.

Como mencionado acima, a especificação da pureza dos produtos de topo e de fundo é de suma importância para os cálculos dos pontos de bolha e de orvalho. Desse modo, deve-se ter em mente quais os componentes distribuídos e quais os não-distribuídos. A Tabela IV.3 mostra a distribuição dos componentes nos produtos de topo e de fundo.

Tabela IV.3. Distribuição dos componentes nos produtos de topo e de fundo

Componente	Corte de 98 % de pureza do C10 ⁻ no topo				Corte de 98 % de pureza do C11 ⁻ no topo			
	CL	CP	CD	CND	CL	CP	CD	CND
C10	X		X					X
C11		X	X		X		X	
C12				X		X	X	
C13				X				X

CL – Chave Leve

CP – Chave Pesado

CD – Componente Distribuído

CND – Componente Não-Distribuído

A Tabela IV.3 mostra que para o corte de 98 % de pureza do C10⁻ no topo, o componente chave-leve é o C10 e o pesado, o C11, e, por definição, esses componentes serão sempre distribuídos e presentes nos produtos de topo e de fundo. Já os componentes C12 e C13 são componentes não-distribuídos presentes somente no produto de fundo. Para o corte de 98 % de pureza do C11⁻ no produto de topo, o componente chave-leve é o C11 e o chave-pesado, o C12, tendo como componente não-distribuído o C10, no topo, e o C13, no fundo.

Adicionalmente, os produtos de fundo foram especificados com impureza de 2% de C10⁻, para o corte de 98 % de pureza de C10⁻ no topo, e 2 % de C11⁻ para o corte de 98 % de pureza de C11⁻ no topo.

Dadas as especificações de composição dos produtos de topo e de fundo, aliando-se a isso o conhecimento dos componentes distribuídos e dos não-distribuídos, o balanço de massa pode ser feito para se estimar as vazões dos produtos de topo e de fundo, assim como a composição exata de cada componente nos mesmos e, desse modo, poder calcular o ponto de bolha, de acordo com a equação

$$\sum_i^{NC} y_i = \sum_i^{NC} K_i x_i = 1,0 \quad (\text{IV.6})$$

e o ponto de orvalho segundo a equação

$$\sum_i^{NC} x_i = \sum_i^{NC} \frac{y_i}{K_i} = 1,0 \quad (\text{IV.7})$$

onde x_i – composição molar na fase líquida do componente i

y_i – composição molar na fase vapor do componente i

K_i – fator de separação do componente i

NC – número de componentes

A constante de equilíbrio é dada pela eq. IV.8, onde se faz uso da equação de Antoine e de suas constantes A, B e C, para se determinar a pressão de vapor do componente, sabendo-se previamente a pressão operacional na coluna:

$$K_i = \frac{P_{sat}^i}{P} \quad (\text{IV.8})$$

onde P_{sat}^i – pressão de vapor do componente i no sistema

P – pressão operacional

Para o corte de 98 % de pureza de C10⁻ no produto de topo, a equação de ponto de bolha chega à forma final para determinação da temperatura no fundo da coluna:

$$\left(x_{C10} \exp\left(A_{C10} - \frac{B_{C10}}{T_F + C_{C10}} \right) + x_{C11} \exp\left(A_{C11} - \frac{B_{C11}}{T_F + C_{C11}} \right) + x_{C12} \exp\left(A_{C12} - \frac{B_{C12}}{T_F + C_{C12}} \right) + x_{C13} \exp\left(A_{C13} - \frac{B_{C13}}{T_F + C_{C13}} \right) \right) = P \quad (\text{IV.9})$$

onde A_i, B_i, C_i – constantes da equação de Antoine para o componente i

x_i – composição do produto de fundo

T_F – temperatura do fundo da coluna

P – pressão operacional

Já para o corte de 98 % de pureza de $C11^-$ no topo, a equação de ponto de bolha é a seguinte:

$$\left(x_{C11} \exp\left(A_{C11} - \frac{B_{C11}}{T_F + C_{C11}} \right) + x_{C12} \exp\left(A_{C12} - \frac{B_{C12}}{T_F + C_{C12}} \right) + x_{C13} \exp\left(A_{C13} - \frac{B_{C13}}{T_F + C_{C13}} \right) \right) = P \quad (\text{IV.10})$$

onde A_i, B_i, C_i – constantes da equação de Antoine para o componente i

x_i – composição do produto de fundo

T_F – temperatura do fundo da coluna

P – pressão operacional

As equações para o cálculo do ponto de orvalho, na determinação da temperatura de topo são dadas pelas eq. IV.11 e IV.12 para os cortes de 98 % de pureza de $C10^-$ no topo e 98 % de pureza de $C11^-$ no topo, respectivamente:

$$\left(\frac{y_{C10}}{\exp\left(A_{C10} - \frac{B_{C10}}{T_T + C_{C10}} \right)} + \frac{y_{C11}}{\exp\left(A_{C11} - \frac{B_{C11}}{T_T + C_{C11}} \right)} \right) = \frac{1}{P} \quad (\text{IV.11})$$

$$\left(\frac{y_{C10}}{\exp\left(A_{C10} - \frac{B_{C10}}{T_T + C_{C10}} \right)} + \frac{y_{C11}}{\exp\left(A_{C11} - \frac{B_{C11}}{T_T + C_{C11}} \right)} + \frac{y_{C12}}{\exp\left(A_{C12} - \frac{B_{C12}}{T_T + C_{C12}} \right)} \right) = \frac{1}{P} \quad (\text{IV.12})$$

onde A_i, B_i, C_i – constantes da equação de Antoine para o componente i

y_i – composição do produto de topo

T_T – temperatura do topo da coluna

P – pressão operacional

As equações dos pontos de bolha e de orvalho foram resolvidas pelo método numérico de Newton-Raphson, com tolerância de 10^{-4} .

iii. Escolha da pressão operacional

A escolha da pressão operacional estava condicionada à temperatura de orvalho gerada pela mesma, pois se sabia previamente, através dos experimentos realizados até então, que a condensação total do vapor de topo se fazia de modo satisfatório quando a diferença de temperatura entre o óleo térmico de resfriamento do condensador e a temperatura desse vapor era igual a 140 °C.

O esquema de troca térmica que ocorre no condensador funciona por meio de um banho que bombeia óleo térmico para o topo, que troca calor com o vapor e o condensa. O óleo, então, retorna para o banho, para resfriamento com água da torneira, e, assim, pode ser novamente reciclado para o topo, em um regime contínuo de troca de calor. Desse modo, os cálculos de ponto de bolha foram realizados, sabendo-se que a temperatura mínima de entrada do óleo térmico no condensador, em regime permanente de troca térmica, é de 30 °C, para encontrar a pressão operacional em que a temperatura de condensação fosse aproximadamente 165-170 °C. Após alguns cálculos de tentativas e erros, foi encontrada a pressão de 800 mbar, que foi usada em todos os cálculos de ponto de bolha e de orvalho, na determinação das temperaturas de fundo e de topo da coluna, respectivamente.

iv. Cálculo das volatilidades relativas

Uma ferramenta importante a se determinar quando se deseja calcular o número de estágios teóricos mínimos para uma dada separação na destilação é a volatilidade relativa. Considerando-se uma mistura binária, a volatilidade relativa é definida em termos das concentrações no equilíbrio

$$\alpha_{AB} = \frac{K_A}{K_B} = \frac{y_{Ae}/x_{Ae}}{y_{Be}/x_{Be}} \quad (\text{IV.13})$$

onde α_{AB} – volatilidade do componente A em relação ao B

K_A – fator de separação do componente A

K_B – fator de separação do componente B

y_{Ae} – fração molar do componente A no vapor quando em equilíbrio

y_{Be} – fração molar do componente B no vapor quando em equilíbrio

x_{Ae} – fração molar do componente A no líquido quando em equilíbrio

x_{Be} – fração molar do componente B no líquido quando em equilíbrio

Uma mistura ideal, como a carga C10-C13, de hidrocarbonetos da mesma família e tamanho de moléculas semelhante, segue a Lei de Raoult, em que a volatilidade relativa pode ser calculada pela razão entre as pressões de vapor. Logo

$$\alpha_{AB} = \frac{y_{Ae} / x_{Ae}}{y_{Be} / x_{Be}} = \frac{P_{sat}^A}{P_{sat}^B} \quad (IV.14)$$

onde P_{sat}^A – pressão de vapor do componente A

P_{sat}^B – pressão de vapor do componente B

No caso de uma mistura multicomponente ideal, a volatilidade de um componente da mistura é obtida tendo-se um componente de referência, que geralmente é o chave-pesado, sendo a razão das pressões de vapor desses componentes, obtidas pela equação de Antoine. Assim

$$\alpha_i = \frac{K_i}{K_{CP}} = \frac{P_{sat}^i}{P_{sat}^{CP}} \quad (IV.15)$$

onde α_i – volatilidade relativa do componente i

K_i – constante de equilíbrio do componente i

K_{CP} – constante de equilíbrio do componente chave-pesado

P_{sat}^i – pressão de vapor do componente i

P_{sat}^{CP} – pressão de vapor do componente chave-pesado

A fim de se determinar corretamente o número de estágios teóricos em destilação, a volatilidade relativa do componente deve ser estimada nas temperaturas de equilíbrio da carga, do topo e do fundo da coluna, assim

$$\alpha_i = \sqrt[3]{\alpha_{Fi} \alpha_{Di} \alpha_{Bi}} \quad (\text{IV.16})$$

onde α_{Fi} – volatilidade relativa do componente i na temperatura de equilíbrio da carga
 α_{Di} – volatilidade relativa do componente i na temperatura de equilíbrio de topo
 α_{Bi} – volatilidade relativa do componente i na temperatura de equilíbrio de fundo

Quando não há equilíbrio líquido-vapor na carga, a volatilidade relativa do componente pode ser estimada por

$$\alpha_i = \sqrt{\alpha_{Di} \alpha_{Bi}} \quad (\text{IV.17})$$

v. Condição térmica da carga

No prato ou na seção recheada onde a carga é admitida, as vazões de líquido, de vapor ou de ambas mudam nesse local, dependendo da condição térmica da carga, que pode estar nas seguintes formas: líquido saturado, líquido sub-resfriado, vapor saturado, vapor superaquecido ou parcialmente vaporizada. Neste trabalho, a carga foi admitida na coluna como líquido sub-resfriado; nesse caso, parte do vapor que se dirige da seção de esgotamento para a de retificação é condensado no prato de entrada da carga. Desse modo, a vazão do líquido que deixa o prato de carga, indo para a seção de esgotamento engloba, além do líquido oriundo da seção de retificação, a carga líquida e a parte do vapor que se condensou, face ao sub-resfriamento da carga. Assim, a vazão de líquido na seção de esgotamento é bem superior à da seção de retificação. A condição térmica da carga e seu efeito nas vazões de líquido e de vapor na coluna podem ser ilustradas pela Figura IV.1.

Todos os cinco tipos de carga podem ser caracterizados pelo uso do fator denotado por **q**, definido como a quantidade de mols na vazão de líquido da seção de esgotamento proveniente da carga. No cálculo aproximado, assumiu-se admissão de carga líquida sub-resfriada, entretanto, a influência da condição térmica da carga será investigada nas próximas seções com o uso do software PRO/II®.

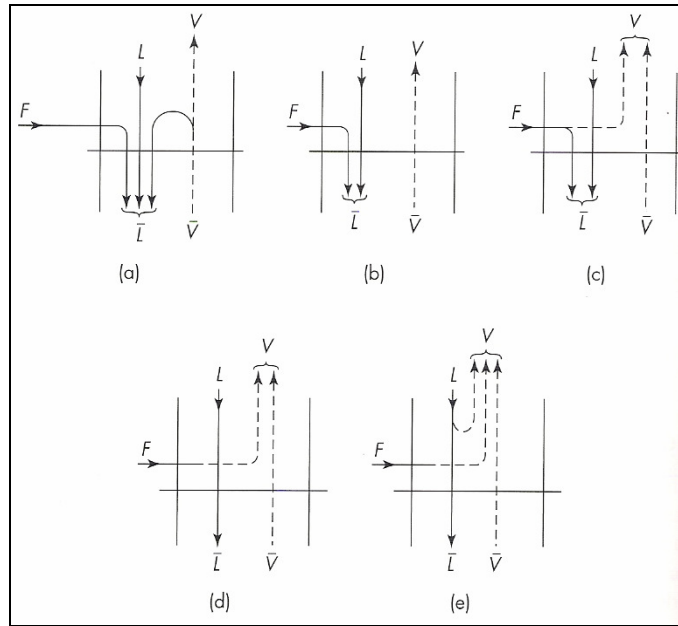


Figura IV.1. Vazão de líquido e de vapor no prato de entrada de carga de acordo com a condição térmica da carga: (a) líquido subresfriado; (b) líquido saturado; (c) carga parcialmente vaporizada; (d) vapor saturado; (e) vapor superaquecido
(McCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005)

O fator q pode ser calculado, para carga líquida sub-resfriada, por intermédio da seguinte equação

$$q = 1 + \frac{c_p (T_B - T_C)}{\Delta H^{lv}} \quad (\text{IV.16})$$

onde q – quantidade de mols na vazão de líquido da seção de esgotamento proveniente da carga

c_p – capacidade térmica específica da carga, J/(kmol°C)

T_B – temperatura de bolha da carga na pressão operacional, °C

T_C – temperatura de entrada da carga, °C

ΔH^{lv} – calor latente de vaporização da mistura, J/kmol

A capacidade térmica específica da carga e o calor latente de vaporização da mistura foram determinados de acordo com as equações IV.2 e IV.5, respectivamente. Já a temperatura de bolha da carga, na pressão operacional da coluna, foi determinada

por cálculo de ponto de bolha, de acordo com equação resolvida iterativamente pelo Método de Newton Raphson, com tolerância de 10^{-4} .

$$\left(x_{F,C10} \exp\left(A_{C10} - \frac{B_{C10}}{T_B + C_{C10}}\right) + x_{F,C11} \exp\left(A_{C11} - \frac{B_{C11}}{T_B + C_{C11}}\right) + x_{F,C12} \exp\left(A_{C12} - \frac{B_{C12}}{T_B + C_{C12}}\right) + x_{F,C13} \exp\left(A_{C13} - \frac{B_{C13}}{T_B + C_{C13}}\right) \right) = P \quad (\text{IV.17})$$

onde A_i, B_i, C_i – constantes da equação de Antoine para o componente i

$x_{F,i}$ – composição molar do componente i na carga

T_B – temperatura de bolha da carga

P – pressão operacional

vi. Cálculo da razão de refluxo mínima – Método aproximado de Underwood

Um método aproximado, embora bastante preciso, para a determinação da razão de refluxo mínima, na separação de misturas multicompostas, foi desenvolvido por Underwood (McCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005). Por esse método, as volatilidades relativas de cada componente, são consideradas constantes nas zonas invariantes, superior e inferior.

As zonas invariantes são áreas onde as composições das fases, líquido e vapor, não mudam de estágio para estágio, situando-se acima ou abaixo do estágio de alimentação. Essas zonas são similares às regiões de *pinch* da destilação binária, mas não necessariamente ocorrem no prato de alimentação.

Através de balanços de massa dos componentes distribuídos e dos não-distribuídos nas zonas invariantes, Underwood (McCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005) concebeu uma equação (equação IV.19), cujo número de raízes é dado pela equação IV.18. Porém, somente uma raiz satisfaz a equação que calcula a razão de refluxo mínima para realizar a separação (equação IV.20), cujo valor se situa entre as volatilidades relativas dos componentes chaves:

$$N_R = N_C - 1 \quad (\text{IV.18})$$

em que, N_R – número de raízes obtidas pela equação de Underwood

N_C – número de componentes distribuídos

A equação de Underwood é dada por:

$$1 - q = \sum \frac{\alpha_i x_{Fi}}{\alpha_i - \phi} \quad (\text{IV.19})$$

onde q – quantidade de mols na vazão de líquido da seção de esgotamento proveniente da carga

α_i – volatilidade relativa do componente i

x_{Fi} – fração molar do componente i na alimentação

ϕ – raiz da equação

O valor de ϕ é, então, usado para o cálculo da razão de refluxo mínima:

$$R_{Dm} + 1 = \sum \frac{\alpha_i x_{Di}}{\alpha_i - \phi} \quad (\text{IV.20})$$

onde R_{Dm} – razão de refluxo mínima

α_i – volatilidade relativa do componente i

x_{Di} – fração molar do componente i no destilado

ϕ – raiz da equação

É preciso ter-se em mente que na eq. IV.19 todos os componentes presentes na carga fazem parte do somatório, enquanto que na eq. IV.20 somente os componentes encontrados no destilado são incluídos no somatório.

No presente trabalho, o número de componentes distribuídos é dois (componentes chave-leve e chave-pesado), tanto para separação de C10⁺ com 98 % de pureza no topo, como para a separação de C11⁺ com 98 % de pureza no topo; sendo assim, a equação de Underwood gera somente uma raiz.

É necessário definir-se, também, uma margem de aumento da razão de refluxo operacional (R_D) com relação à mínima. Geralmente, costuma-se usar uma razão R_D/R_{Dm} variando de 1,1 a 1,3, entretanto, neste trabalho, relações maiores serão utilizadas de modo a se obter um número de estágios condizente com os dados de eficiência de recheios encontrados na literatura.

vii. Cálculo do número mínimo de estágios

A equação de Fenske se aplica a dois componentes i e j quaisquer, em uma planta convencional, operando a refluxo total. Nesse caso, a equação toma a seguinte forma

$$N_{\min} = \frac{\ln \left[\frac{(x_{Di} / x_{Bi})}{(x_{Dj} / x_{Bj})} \right]}{\alpha_{ij}} - 1 \quad (\text{IV.21})$$

onde N_{\min} – número mínimo de estágios

x_{Di} – composição do chave-leve no destilado

x_{Bi} – composição do chave-leve no produto de fundo

x_{Dj} – composição do chave-pesado no destilado

x_{Bj} – composição do chave-pesado no produto de fundo

α_{ij} – volatilidade relativa do chave-leve em relação ao chave-pesado, eqs. IV.15-17

viii. Cálculo do número de estágios ideais – correlação de Gilliland

Embora um cálculo preciso do número de estágios necessários à separação de uma mistura multicomponente deva ser realizado por computadores, um método simples e empírico, concebido por Gilliland (McCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005), foi utilizado neste trabalho para estimativas preliminares do número de estágios. A correlação requer conhecimento somente do número de estágios a refluxo total e a razão de refluxo mínima, sendo limitada a sistemas ideais com volatilidades relativas próximas, podendo ser visualizada na Figura IV.2.

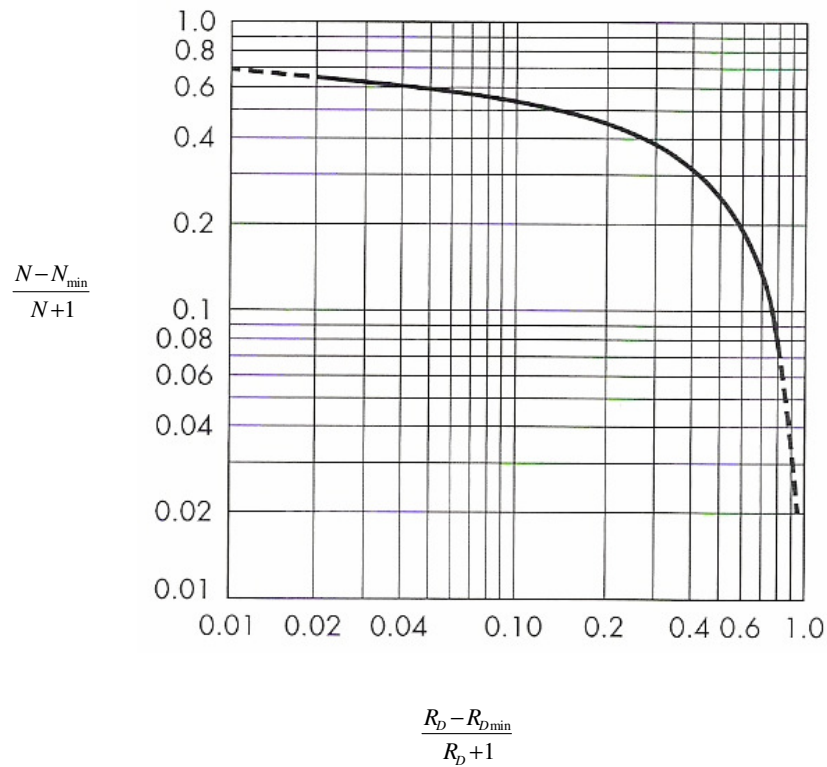


Figura IV.2. Correlação de Gilliland (McCABE; SMITH; HARRIOTT, 2005)

Para melhor aplicação do cálculo do número de estágios, a correlação de Gilliland foi regredida tomando a seguinte forma (MOLOKANOV et al, 1971):

$$Y = 1 - \exp \left[\left(\frac{1 + 54,4 \cdot X}{11 + 117,2 \cdot X} \right) \cdot \left(\frac{X - 1}{\sqrt{X}} \right) \right] \quad (\text{IV.21})$$

em que

$$X = \left(\frac{R_D - R_{D\min}}{R_D + 1} \right) \quad (\text{IV.22})$$

$$N = \left(\frac{N_{\min} + Y}{1 - Y} \right) \quad (\text{IV.23})$$

onde R_D – razão de refluxo operacional
 $R_{D\min}$ – razão de refluxo mínima
 N_{\min} – número de estágios mínimos
 N – número de estágios ideais

IV.2. Resultado do Método Aproximado

No método aproximado apresentado no item anterior, faz-se necessária, porém, a especificação de algumas composições e vazões para realizar o balanço de massa na coluna e, assim, estabelecer as vazões dos produtos de topo e de fundo e suas composições. A Tabela IV.4 mostra as especificações usadas neste trabalho para resolução do método aproximado.

Há de se notar, através da análise da composição da carga no Apêndice II.1 que a mistura C10-C13 possui componentes que se estendem desde C8 (octano) até C14 (tetradecano), porém a faixa C8-C9 possui composição diminuta, quase desprezível, e por isso esses componentes foram adicionados à composição do componente C10, representando essa junção de componentes pelo símbolo C10⁻. O mesmo foi feito para o componente C14, cuja composição foi somada à do componente C13, representando a soma por C13⁺. Essa abordagem tende a simplificar os cálculos, transformando a carga de 7 em 4 componentes, sem prejudicar a precisão do método já que os componentes desprezados somam menos de 1 % da composição mássica da mistura. Deve ficar claro também que nos cortes com 98 % de pureza de C11⁻ no produto de topo, o símbolo C11⁻ abrange os componentes C8 a C11.

Tabela IV.4. Especificações usadas no método aproximado

Vazão de alimentação			
3 kg/h			
Composição molar da carga			
C10 ⁻ = 0,110 C11 = 0,310 C12 = 0,312 C13 ⁺ = 0,268			
Composição dos produtos			
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻		Corte 98 % de pureza de C11 ⁻	
Produto de Topo	Produto de Fundo	Produto de Topo	Produto de Fundo
98 % de pureza de C10 ⁻ (fração molar igual a 0,98)	2 % de contaminação de C10 ⁻ (fração molar igual a 0,02)	2 % de contaminação de C12 ⁺ (fração molar igual a 0,02)	2 % de contaminação de C11 ⁻ (fração molar igual a 0,02)

A Tabela IV.5 mostra os resultados do balanço de massa: vazão de alimentação (F), vazão de produto de topo (D), vazão de produto de fundo (B) e as composições dos componentes nesses produtos.

Tabela IV.5. Balanço de massa e composições dos produtos de topo e de fundo

Balanço de massa			
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻		Corte 98 % de pureza de C11 ⁻	
F = 3,00 kg/h		F = 3,00 kg/h	
D = 0,24 kg/h		D = 1,14 kg/h	
B = 2,76 kg/h		B = 1,86 kg/h	
Composição molar dos produtos			
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻		Corte 98 % de pureza de C11 ⁻	
Produto de Topo	Produto de Fundo	Produto de Topo	Produto de Fundo
C10⁻ = 0,98	C10⁻ = 0,02	C10 ⁻ = 0,26	C10 ⁻ = -
C11 = 0,02	C11 = 0,34	C11 = 0,72	C11 = 0,02
C12 = -	C12 = 0,34	C12 = 0,02	C12 = 0,52
C13 ⁺ = -	C13 ⁺ = 0,30	C13 ⁺ = -	C13 ⁺ = 0,46

A Tabela IV.6 sumariza, na forma seqüencial, os resultados obtidos pela metodologia proposta para a estimativa do número de estágios ideais na obtenção dos cortes propostos.

Tabela IV.6. Resultados do método aproximado para estimativa do número de estágios ideais

Pressão operacional	
800 mbar	
Temperatura de topo	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
166,22 °C	183,32 °C
Temperatura de fundo	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
201,71 °C	214,01 °C

Volatilidades relativas	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
$\alpha_{C10} = 1,75$	$\alpha_{C10} = 2,82$
$\alpha_{C11} = 1,00$	$\alpha_{C11} = 1,68$
$\alpha_{C12} = 0,59$	$\alpha_{C12} = 1,00$
$\alpha_{C13} = 0,35$	$\alpha_{C13} = 0,61$
Temperatura de bolha na composição da carga 196,80 °C	
Condição térmica da carga Capacidade térmica específica - $c_p = 3,48 \text{ E}+05 \text{ J/(kmol °C)}$ Temperatura da carga - $T_F = 25 \text{ °C}$ $\Delta H_{mist}^{lv} = 5,44 \text{ E}+07 \text{ J/kmol}^{(1)}$ $q = 2,1^{(2)}$	
Raiz da eq. IV.18 (ϕ)	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
$\phi = 1,27$	$\phi = 1,16$
Razão de refluxo mínima (R_{Dmin})	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
2,5344	1,6434
Razão de refluxo operacional (R_D)	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
$R_D/R_{Dmin} = 1,5$ $R_D = 3,80$	$R_D/R_{Dmin} = 1,8$ $R_D = 2,96$
Número mínimo de estágios	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
12,0	13,3
Número de estágios ⁽³⁾	
Corte 98 % de pureza de C10 ⁻	Corte 98 % de pureza de C11 ⁻
20	20

(1) Calor latente de vaporização na composição e condições da carga

(2) Número de mols na vazão de líquido da seção de esgotamento proveniente da carga

(3) Número de estágios excetuando-se o refeedor.

Pode-se observar na Tabela IV.6 que as relações entre a razão de refluxo operacional e a razão de refluxo mínima são diferentes para cada corte. Isso se justifica pelo fato de a diferença de volatilidade entre o chave-leve e o chave-pesado, para o corte de 98 % de pureza de C11⁻ no topo, ser menor do que para o caso do corte de 98 % de pureza de C10⁻ no topo, levando à utilização de maiores razões de refluxo, a fim de se atingir a separação especificada. Assim, para que o leito apresentasse 20 estágios teóricos para ambos os cortes, o que significa um *HETP* de 0,11 m/estágio para coluna QVF de 2,2 m de altura – altíssima eficiência –, deveriam ser utilizadas diferentes razões de refluxo. Os cálculos indicavam que se a mesma relação entre a razão de refluxo operacional e a razão mínima para o corte de 98 % de pureza de C10⁻ no topo ($R_D/R_{Dmin} = 1,5$) fosse usada no corte de 98 % de pureza de C11⁻ no topo, o número de estágios, para o segundo caso, seria de 27 estágios (*HETP* = 0,08 m/estágio), eficiência ainda não relatada para nenhum recheio comercial, mesmo para os de tipo tecido metálico, na literatura. Sendo assim, decidiu-se usar uma relação entre as razões de refluxo que pudessem gerar *HETP*'s mais factíveis (*HETP* próximo de 0,1 m).

IV.3. Simulação da Coluna de Destilação no PRO/II[®] usando a carga C10-C13

Após a etapa de estimativa do número de estágios teóricos, pode-se então simular o módulo de coluna de destilação rigorosa no software PRO/II[®] para obtenção das condições operacionais ótimas, para a separação de 98 % de pureza de C10⁻ no topo e na de 98 % de pureza de C11⁻ no topo.

A coluna de destilação simulada teve os seguintes dados de entrada:

- a. Composição da carga (C₈-C₁₄) segundo Apêndice II.1;
- b. Equação de estado Soave-Redlich-Kwong (SRK) que prediz muito bem as propriedades físicas e os parâmetros termodinâmicos, assim como, o equilíbrio líquido-vapor para hidrocarbonetos de uma forma geral;
- c. Número de pratos teóricos de 20, um refeedor parcial do tipo *kettle* e um condensador total;
- d. Vazão de alimentação de 3 kg/h;
- e. Pressão de topo de 800 mbar e perda de carga de 5 mbar em toda coluna.
- f. Local de alimentação: topo, meio ou fundo.
- g. Especificações:

- Corte de 98 % de pureza de C10⁻: fração molar de 0,02 para o C11⁺ no topo e fração molar de 0,02 para o C10⁻ no fundo.
 - Corte de 98 % de pureza de C11⁻: fração molar de 0,02 para o C12⁺ no topo e fração molar de 0,02 para o C11⁻ no fundo.
- h. Variáveis: cargas térmicas do refeedor e do condensador.

A descrição completa do módulo de destilação e o passo-a-passo para a sua simulação encontram-se em Orlando Jr. (2005).

De modo a verificar os cálculos do ponto de orvalho relatados na seção IV.1, foram simulados diversos níveis de pressão para a coluna de destilação, no corte de 98% de pureza de C10⁻ no topo, com alimentação no meio da coluna (estágio 11). A Tabela IV.7 mostram os resultados de temperatura de topo \times pressão operacional, constatando-se que somente a partir de 800 mbar, o corte poderia ser realizado de acordo com o item iii da seção IV.1.

Tabela IV.7. Resultados de pressão operacional \times temperatura de topo

Pressão (mbar)	Temperatura de topo (°C)
350	135,9
500	147,7
800	164,9
1000	173,1

Assim, foram realizadas simulações variando a temperatura da carga, a pressão operacional e o local da alimentação, a fim de se encontrar a menor razão de refluxo que atendesse às especificações de composição do produto de topo, do produto de fundo e da temperatura do refeedor simulada que seria usada experimentalmente.

Para a separação de 98 % de pureza de C10⁻, foram simulados dois níveis de pressão operacional com a carga entrando no meio da coluna: 800 e 1000 mbar. A Tabela IV.8 mostra que, à pressão atmosférica, as razões de refluxo para diferentes temperaturas de carga são menores do que a 800 mbar, considerando 20 estágios teóricos. Essa observação demonstra que o aumento de pressão promove a diminuição da pressão de vapor dos componentes e, conseqüentemente, aumenta a volatilidade

relativa do C10 em relação C11, facilitando a separação dos mesmos por meio de uma menor razão de refluxo.

A Tabela IV.8 também demonstra que a condição de líquido resfriado a 25 °C proporciona menores razões de refluxo, independentemente do nível de pressão. De acordo com o item v da seção IV.1, quanto menor a temperatura da carga, maior é o grau de condensação dos pesados contidos no vapor que ascende para a seção de retificação, restando somente os componentes mais leves, requisitando menor razão de refluxo para a separação.

Embora a pressão de 1000 mbar também se mostre uma boa condição para se operar, pois não demanda uso de vácuo, entretanto, encontrou-se vazamento na linha de alimentação que somente cessava quando se tinha vácuo na mesma e, por isso, escolheu-se a pressão de 800 mbar para realizar os testes.

A simulação do melhor local de entrada de carga mostrou que alimentação sendo realizada no meio da coluna demandava menores razões de refluxo. A Tabela IV.9 mostra o estágio em que a alimentação foi feita e pode-se observar que quando a carga entrava no topo, a separação se tornava mais difícil com somente uma seção de retificação, deixando a coluna na condição de refluxo total. Já com a carga entrando no fundo, a razão de refluxo não foi muito diferente da alimentação central, porém o esgotamento do C10 em uma única seção de fundo dificultaria a separação.

Tabela IV.8. Influência da pressão operacional na razão de refluxo

Pressão (mbar)	Temperatura da carga (°C)	Razão de refluxo
800	25	5,0
	100	6,4
	200	13,8
1000	25	5,5
	100	7,2
	200	14,8

Tabela IV.9. Influência do local da alimentação na razão de refluxo

Pressão (mbar)	Temp.Topo (°C)	Temp.Carga (°C)	Alimentação	Razão de refluxo
800	164,9	25	topo (N = 5)	23,6
			meio (N = 11)	5,0
			fundo (N = 17)	7,2

Desse modo, são verificadas as condições operacionais, descritas no capítulo III, na Tabela III.4, para realização do corte de 98 % de pureza de C10⁻ no topo:

- Pressão: 800 mbar
- Temperatura do retervedor: 202 °C
- Temperatura do topo: 165 °C
- Razão de refluxo = 5
- Vazão de alimentação: 3 kg/h
- Temperatura de alimentação: 25 °C
- Alimentação: MEIO

As simulações dos cortes de 98 % de pureza de C11⁻ no topo foram realizadas a 800 mbar para fins de comparação com a separação de 98 % de pureza de C10⁻ no topo. A Tabela IV.10 mostra a influência da temperatura da carga na razão de refluxo – alimentação no meio da coluna (N = 11) – que segue a mesma tendência das simulações com C10 como chave-leve, reiterando que temperaturas baixas na condição de líquido subresfriado promovem um melhor fracionamento, em termos de razão de refluxo.

Tabela IV.10. Influência da condição térmica da carga na razão de refluxo

Pressão (mbar)	Temperatura da carga (°C)	Razão de refluxo
800	25	2,7
	100	2,9
	200	4,63

A simulação do estágio ótimo de carga mostra novamente que a alimentação no meio da coluna requer menores razões de refluxo, como ocorreu no caso da separação de 98 % de pureza de C_{10}^- no topo, conforme a Tabela IV.11.

Tabela IV.12. Influência da localização da carga na razão de refluxo

Pressão (mbar)	Temp.Topo (°C)	Temp.Carga (°C)	Alimentação	Razão de refluxo
800	177,4	25	topo (N = 5))	5,8
			meio (N = 11)	2,7
			fundo (N = 17)	4,5

Assim, são comprovadas as condições operacionais ótimas, descritas anteriormente na Tabela III.4:

- Pressão: 800 mbar
- Temp. Reboiler: 213,9 °C
- Temp. Topo: 177,4 °C
- Vazão Alimentação: 3 kg/h
- Temp. Alimentação: 25 °C
- Alimentação: MEIO
- RR=3

Os resultados das simulações e dos experimentos realizados nas condições ótimas em termos de propriedades físicas, curvas de destilação e de composição dos produtos de topo e de fundo serão relatados no Capítulo VI.

IV.4. Simulação da Coluna de Destilação no PRO/II® usando a carga NM/BS

De acordo com a programação dos experimentos feita na Tabela III.6, as simulações foram realizadas de modo a avaliar o grau de separação da mistura de óleos básicos Neutro Médio e *Bright Stock*. Para tal, o módulo *coluna de destilação* do PRO/II® teve os seguintes dados de entrada:

- a. Composição da carga (NM/BS), obtida através da análise de destilação simulada, Apêndice II.2, e densidade da mistura de óleos básicos;
- b. Equação de estado Soave-Redlich-Kwong (SRK), que prediz muito bem as propriedades físicas e os parâmetros termodinâmicos, assim como, o equilíbrio líquido-vapor para hidrocarbonetos;
- c. Número de pratos teóricos de 16 (dado obtido do projeto OTIMDEST), um refeedor parcial do tipo *kettle* e um condensador total;
- d. Vazão de alimentação, de acordo com a Tabela III.6, variando com o experimento realizado;
- e. Local de alimentação: topo (estágio 5), meio (estágio 9) e fundo (estágio 13);
- f. Pressão operacional de topo da coluna, de acordo com a Tabela III.6, variando com o experimento realizado, e perda de carga de 5 mbar em toda coluna;
- g. Especificações:
 - Razão de refluxo (varia de experimento a experimento);
 - Temperatura do refeedor de 350 °C.
- h. Variáveis: cargas térmicas do refeedor e condensador.

A comparação dos resultados provenientes da simulação com o software PRO/II[®] e aqueles obtidos experimentalmente será descrita no capítulo VI. As curvas de destilação simulada dos produtos de topo e de fundo obtidos como resultados das simulações das corridas realizadas se encontram no Apêndice III.2.1.

V. Modelos para Estimativa de *HETP* em Colunas de Destilação Contendo Recheios Estruturados

V.1. Eficiência do Recheio na Destilação – *HETP*

Inicialmente, no projeto dos equipamentos de separação, os dispositivos de contato líquido-vapor mais utilizados eram os pratos e o cálculo do número de estágios ideais foi rapidamente desenvolvido, juntamente com o conceito de eficiência do prato. Contudo, nas torres recheadas, a eficiência de transferência de massa vincula-se ao contato contínuo em contracorrente e às taxas de transferência de massa e de energia entre as fases líquida e vapor (CALDAS et al., 2003).

A metodologia mais usada, ainda hoje, para o cálculo da altura de uma torre de destilação recheada usa o conceito de *HETP* (Altura Equivalente ao Prato Teórico). Introduzido para possibilitar a comparação entre colunas de pratos e de recheio, o *HETP* é definido como

$$HETP = \frac{Z}{N} \quad (V.1)$$

na qual, Z é a altura de leito necessária para se obter a separação equivalente aos N estágios teóricos. Assim, avaliando-se adequadamente o número teórico de estágios através de programas rigorosos, ou até mesmo pelo método aproximado, para destilação de misturas binárias (Método de McCabe-Thiele), chega-se à altura de leito recheado, simplesmente através de sua multiplicação pelo *HETP* do recheio (CALDAS et al., 2003).

De acordo com Kister (1992), a eficiência de uma torre recheada depende de alguns fatores, entre os quais se destacam;

- Geometria e tipo de recheio: Geralmente, a eficiência aumenta (*HETP* decresce) com o aumento da área superficial do recheio, proporcionado pela diminuição do tamanho do recheio quando se usam recheios randômicos, ou pelo estreitamento do tamanho dos canais, para os estruturados.
- Vazões de líquido (L) e vapor (V): Para uma operação com razão L/V constante na região abaixo da retenção de líquido, geralmente as vazões de líquido e de vapor têm pequeno efeito no *HETP* de recheios randômicos. Já para os recheios

estruturados, o *HETP* aumenta com o inventário de líquido na coluna. E o efeito é mais pronunciado em recheios do tipo tecido metálico e menos nos de placa metálica. Com maior espaço para o contato L/V, o *HETP* dos recheios de placa metálica é, usualmente, independente das vazões de líquido e de vapor.

Na Figura V.1, o ponto A representa a taxa mínima de líquido para que haja molhabilidade do leito, de modo a não causar prejuízos à eficiência do recheio. O ponto B indica o início do carregamento. Segundo Kister (1992), torres recheadas devem ser projetadas para operar na região A-B, que possui maior estabilidade quando os requisitos são molhabilidade do recheio, transferência de massa e, essencialmente, eficiência constante. O autor assinala que a região B-F deva ser evitada no projeto de torres recheadas devido à sua proximidade do ponto de inundação, embora proporcione a melhor eficiência. Ele também explica a melhoria na eficiência do recheio na região B-E por causa do aumento da retenção de líquido, fazendo com que haja maior transferência de massa entre as fases líquida e vapor. Entretanto, esse comportamento tem vida curta (*short-lived*) e com a aproximação do ponto de inundação, a eficiência passa por um máximo (ponto E) e, então, decresce (região E-C) devido ao arraste excessivo de líquido pela fase vapor (*entrainment*).

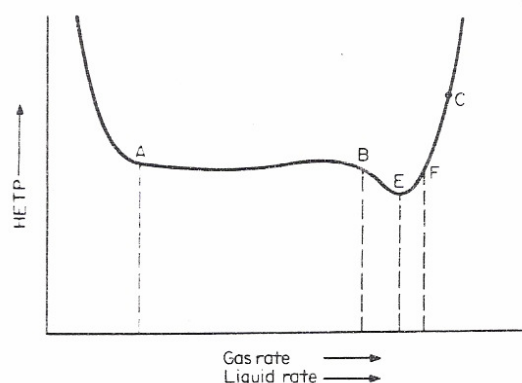


Figura V.1. Comportamento típico de recheios de placa metálica, em função das vazões de líquido e de vapor (KISTER, 1992)

A Figura V.2 mostra o decréscimo de eficiência de recheios do tipo tecido metálico, em função das vazões de líquido e de vapor. Segundo Kister (1992), esse tipo de recheio é mais susceptível ao arraste do que os corrugados. Também é mostrado na figura um limite de faixa operacional em que se pode trabalhar sem atingir o ponto de inundação, a partir do qual há perda considerável de eficiência.

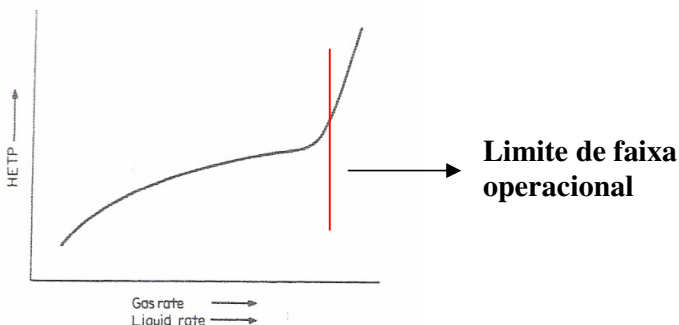


Figura V.2. Comportamento típico de recheios do tipo tecido metálico com as vazões de líquido e vapor (KISTER,1992)

- Distribuição: A má distribuição de líquido, assim como a de vapor, apresenta um forte efeito prejudicial à eficiência de recheios randômicos e estruturados.
- Razão L/V: A maioria das torres recheadas, nos estudos para estimativa da eficiência de recheios, opera em refluxo total. Alguns testes sugerem que, tanto para recheios estruturados como para randômicos, a eficiência a refluxo finito seja similar àquela de refluxo total.
- Pressão: Geralmente a pressão tem pequeno efeito no *HETP* de recheios estruturados pelo menos entre 1-2 psia. Em alto vácuo (< 1 psia), existem dados que sinalizam ser a eficiência decrescente com a diminuição da pressão para os recheios randômicos, devido à baixa molhabilidade ou à má-distribuição de líquido. Para destilação a altas pressões (entre 200 e 300 psia), há evidências de que a eficiência de recheios estruturados diminui com o aumento da pressão.
- Propriedades físicas: Alguns autores afirmam que o *HETP*, tanto de recheios randômicos como dos estruturados, seja insensível a propriedades de sistemas não-aquosos. Entretanto, para sistemas ricos em água, o *HETP* de recheios estruturados tende a ser muito maior do que nos sistemas não-aquosos.
- Má molhabilidade: Com sistemas aquosos-orgânicos, o *HETP* tende a aumentar na extremidade da coluna rica em água, tanto para recheios estruturados como para os randômicos.

De acordo com Caldas e colaboradores (2003), existem basicamente quatro métodos gerais para a previsão da eficiência de uma torre recheada em escala comercial:

- Comparação com uma instalação bastante similar e para a qual os dados de desempenho estejam disponíveis;
- Uso de um método empírico ou estatístico de previsão de eficiência;
- Extrapolação direta de dados experimentais, obtidos cuidadosamente em planta piloto;
- Através de modelos de transferência de massa teóricos ou semiteóricos.

Como a unidade de destilação QVF se enquadra na escala laboratorial, apesar de possuir 2,2 m de altura, a previsão de *HETP* do recheio Sulzer DX do tipo tecido metálico se fará através de métodos empíricos e por modelos de transferência de massa teóricos, pois os dados disponíveis na literatura são para colunas em escala piloto, como por exemplo, a coluna do grupo SRP (*Separations Research Program*), da Universidade do Texas, que possui 0,45 m de diâmetro ou as industriais, como a do grupo FRI (*Fractionation Research, Inc.*), com diâmetro superior a 1 m, sendo impossível a comparação dos dados de desempenho. Já a extrapolação da escala piloto para a laboratorial fica impossibilitada, pois a perda de carga que ocorre em uma escala é diferente da outra, favorecendo a um superdimensionamento no projeto de novas colunas (KISTER,1992).

Sendo assim, nas próximas seções serão apresentados os modelos teóricos de transferência de massa e o modelo empírico, escolhidos para avaliação do desempenho do recheio Sulzer DX.

V.2. *HETP* através de Métodos Empíricos – Correlação de Carrillo, Martin e Rosello (2000)

Ao longo dos anos, diversas regras práticas ou empíricas vêm sendo propostas para a estimativa de eficiência de recheios. Dentre os modelos mais recentes, pode ser citado o de Carrillo, Martin e Rosello (2000), que propuseram uma correlação para estimativa de *HETP* de recheios do tipo tecido metálico, baseada em dados de desempenho do recheio Sulzer BX. Para isso, os autores compuseram um banco de dados com os sistemas trans/cis-decaline, etilbenzeno/estireno, o-xileno/p-xileno, metanol/etanol, ciclohexano/heptano e etilenoglicol/propilenoglicol, numa faixa de pressão de 20 a 760 mmHg e para um fluxo de vapor tal que $F_v = 1,5 \text{ m/s (kg/m}^3)^{0,5}$.

A correlação proposta por Carrillo, Martin e Rosello (2000) está representada pela eq. V.2.

$$HETP = \frac{P\sqrt{\rho_l}}{(2712 + 82,0P) \left[1 + 1,505 \left(\frac{\rho_v}{\rho_l} \right)^{0,25} \right]^2} F_v^{0,42} \quad (V.2)$$

onde $HETP$ - altura equivalente ao prato teórico, m

P - pressão do sistema, mmHg

F - fator de carga da fase vapor, m/s $(\text{kg/m}^3)^{0,5}$

ρ_l - densidade da fase líquida, kg/m^3

ρ_v - densidade da fase vapor, kg/m^3

Um fator importante, que aparece em todos os modelos, é o fator de carga da fase vapor – F_v (F_s ou F_G), pois o $HETP$ é usualmente reportado em função desse parâmetro. O F_v é definido pela seguinte expressão

$$F_v = u_{gs} \sqrt{\rho_v} \quad (V.3)$$

onde u_{gs} é a velocidade superficial da fase vapor, em m/s, definida na equação V.8.

V.3. $HETP$ através de Modelos de Transferência de Massa Teóricos

O desempenho de uma coluna recheada, em destilação ou absorção, é freqüentemente expresso pelo $HETP$. De acordo com a Teoria do Duplo Filme, a relação entre o $HETP$ e a altura da unidade de transferência de massa para a fase vapor (HTU_G) e para a fase líquida (HTU_L) é dada por (WANG; YUAN; YU, 2005):

$$HETP = \frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} (HTU_G + \lambda HTU_L) \quad (V.4)$$

onde λ é o fator de esgotamento, definido como a razão entre a inclinação da curva de equilíbrio e a inclinação da reta de operação, dado pela eq. V.5

$$\lambda = \frac{m}{(L/V)} = \frac{\alpha_{lk}}{[1 + (\alpha_{lk} - 1)x_{lk}]^2} \left(\frac{V}{L} \right) \quad (\text{V.5})$$

$$\alpha_{lk} = \frac{y_{lk}/x_{lk}}{y_{hk}/x_{hk}} \quad (\text{V.6})$$

onde m - inclinação da curva de equilíbrio

L - vazão de líquido, kgmol/s

V - vazão de vapor, kgmol/s

α_{lk} - volatilidade relativa do componente chave-leve

x_{lk} - fração molar do componente chave-leve na fase líquida

y_{lk} - fração molar do componente chave-leve na fase vapor

x_{hk} - fração molar do componente chave-pesado na fase líquida

y_{hk} - fração molar do componente chave-pesado na fase vapor

Combinando a equação V.4 com as definições de HTU_G e HTU_L , baseadas na força-motriz para transferência de massa através dos filmes líquido e gasoso do Modelo do Duplo Filme, pode-se chegar à expressão (WANG; YUAN; YU, 2005)

$$HETP = \frac{\ln \lambda}{\lambda - 1} \left(\frac{u_{Gs}}{k_G a_e} + \lambda \frac{u_{Ls}}{k_L a_e} \right) \quad (\text{V.7})$$

em que u_{Gs} e u_{Ls} são as velocidades superficiais da fase líquido e vapor, respectivamente, em m/s, definidas por

$$u_{Gs} = \frac{4M_G}{\rho_G \pi d_c^2} \quad (\text{V.8})$$

$$u_{Ls} = \frac{4M_L}{\rho_L \pi d_c^2} \quad (\text{V.9})$$

em que M_G - vazão mássica da fase vapor, kg/s

M_L - vazão mássica da fase líquida, kg/s

d_c - diâmetro da coluna, m

ρ_l - densidade da fase líquida, kg/m³

ρ_v - densidade da fase vapor, kg/m³

e k_G e k_L são os coeficientes de transferência de massa das fases vapor e líquida, respectivamente, e a_e é a área interfacial efetiva, provida pelo recheio, à transferência de massa.

Desse modo, a precisão do modelo dado pela eq. V.7 depende, por sua vez, da acurácia das correlações utilizadas na predição dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor e líquido e da área interfacial efetiva. No presente estudo, foram escolhidos os modelos de Bravo, Rocha e Fair (1985), Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996), Brunazzi e Pagliant (1997) e Olujić et al. (2004) que propõem correlações para o cálculo desses três parâmetros. Adicionalmente, foi proposta neste trabalho, uma nova abordagem do modelo Bravo, Rocha e Fair (1985), que se mostrou a melhor opção para a estimativa de *HETP* de recheios do tipo tecido metálico. .

V.3.1. Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985)

Bravo, Rocha e Fair (1985) desenvolveram o primeiro modelo para estimativa de eficiência de colunas contendo recheios estruturados do tipo tecido metálico, no caso Sulzer BX. O modelo é baseado na Teoria do Duplo Filme, onde k_G é determinado via transferência de massa em colunas de parede molhada, enquanto k_L se baseia na teoria da penetração, em que o tempo de exposição é tomado como o tempo de residência para o líquido passar pelas corrugações de um elemento de recheio a outro. O coeficiente de transferência de massa para o lado gás é dado pela expressão

$$Sh = 0,0338 Re^{0,8} Sc^{0,333} \quad (V.10)$$

em que Sh é o número de Sherwood, Re é o número de Reynolds e Sc , o de Schmidt, definidos pelas expressões

$$Sh = \frac{k_G d_{eq}}{D_G} \quad (V.11)$$

$$Re = \frac{d_{eq} \rho_G (u_{G,ef} + u_{L,ef})}{\mu_G} \quad (V.12)$$

$$Sc = \frac{\mu_G}{\rho_G D_G} \quad (V.13)$$

em que d_{eq} - diâmetro equivalente dos canais triangulares, para o fluxo das fases líquida e vapor, m

D_G - difusividade da fase vapor, m^2/s

k_G - coeficientes de transferência de massa da fase vapor, m/s

ρ_G - densidade da fase vapor, kg/m^3

μ_G - viscosidade da fase vapor, $kg/m \cdot s$

Os parâmetros hidráulicos dos canais do recheio são definidos pelas expressões de diâmetro equivalente (d_{eq}) e perímetro molhado:

$$d_{eq} = Bh \left[\frac{1}{B + 2S} + \frac{1}{2S} \right] \quad (V.14)$$

$$P = \frac{P_t + P_d}{2} \quad (V.15)$$

$$P_t = \frac{4S + 2B}{Bh} \quad (V.16)$$

$$P_d = \frac{4S}{Bh} \quad (V.17)$$

em que B - base da corrugação, m

S - lado da corrugação, m

h - altura da corrugação, m

P - perímetro disponível para fluxo das fases por unidade de área superficial da torre, m/m^2

P_t - perímetro por unidade de área superficial da torre considerando a área transversal do canal do recheio como um triângulo, m/m^2

P_d - perímetro por unidade de área superficial da torre considerando a área transversal do canal do recheio como um diamante, m/m^2

A Figura V.3 mostra os detalhes dos canais do recheio, considerando a área transversal de triângulo e de um diamante, assim como, suas características geométricas (S, B e h).

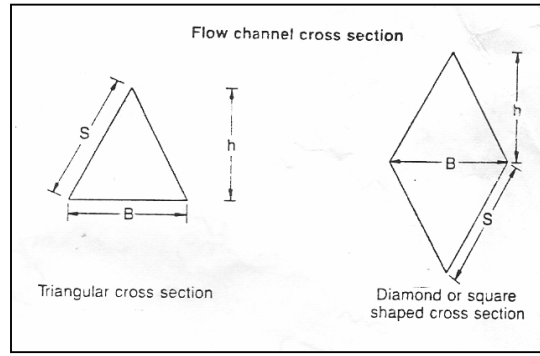


Figura V.3. Seções transversais dos canais do recheio (BRAVO; ROCHA; FAIR, 1985)

A velocidade efetiva da fase vapor é calculada pela expressão

$$u_{G,ef} = \frac{u_{Gs}}{\varepsilon \sin \alpha} \quad (V.18)$$

em que u_{Gs} - velocidade superficial da fase vapor, m/s

ε - porosidade do recheio

α - ângulo de corrugação, °

A velocidade efetiva da fase líquida no leito recheado é baseada na relação do filme descendente para fluxo laminar:

$$u_{L,ef} = \left(\frac{3\Gamma}{2\rho_L} \right) \left(\frac{\rho_L^2 g}{3\mu_L \Gamma} \right)^{0,333} \quad (V.19)$$

$$\Gamma = \frac{M_L}{P \cdot A} \quad (V.20)$$

onde $u_{L,ef}$ - velocidade efetiva da fase líquida no leito recheado, m/s

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

g - aceleração da gravidade, m/s²

Γ - vazão de líquido baseada no perímetro molhado, kg/m·s

M_L - vazão mássica da fase líquida, kg/s

A - área da seção transversal da torre, m²

P - perímetro disponível para fluxo das fases por unidade de área superficial da torre, m/m²

O coeficiente de transferência de massa para a fase líquida é dado pela teoria da penetração, pois os autores afirmam que a contribuição do líquido para a resistência total é, em geral, pequena em destilação e uma abordagem mais simples para estimativa do coeficiente seria aceitável, podendo ser, então, calculado pela expressão:

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L u_{L,ef}}{\pi S}} \quad (V.21)$$

onde D_L é a difusividade da fase líquida, m^2/s .

Como o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) considera molhabilidade total da superfície, devido à ação capilar dos recheios do tipo tecido metálico, pode-se escrever

$$a_e = a_p \quad (V.22)$$

em que a_p é a área superficial nominal do recheio, m^2/m^3 .

V.3.2. Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)

Dando continuidade ao trabalho de Bravo, Rocha e Fair (1985), Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) fizeram algumas modificações no modelo, estendendo-o para o estudo de recheios do tipo Mellapak (placa metálica). Entre as principais modificações, pode-se mencionar a retenção de líquido, cuja estimativa correta, segundo os autores, permite o desenvolvimento de modelos para cálculo de eficiência de recheios estruturados mais rigorosos. Diferentemente do primeiro modelo (BRAVO; ROCHA; FAIR, 1985), Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) classificam seu modelo como de segunda geração, em que a eficiência do recheio não pode ser estimada sem a determinação de alguns parâmetros inerentes à hidráulica do recheio.

Com relação à transferência de massa na fase vapor, a correlação para parede molhada é mantida (eq. V.10), com ajustes no diâmetro hidráulico, que agora passa a ser o lado da corrugação, na constante e nos expoentes dos números adimensionais da correlação. Assim, os números de Sherwood, Reynolds e Schmidt combinados tomam a seguinte forma

$$\frac{k_g S}{D_g} = 0,054 \left[\frac{(U_{Ge} + U_{Le}) \rho_g S}{\mu_g} \right]^{0,8} \left(\frac{\mu_g}{D_g \rho_g} \right)^{0,33} \quad (\text{V.23})$$

onde k_g - coeficiente de transferência de massa da fase vapor, m/s

S - lado da corrugação, m

D_g - difusividade da fase vapor, m^2/s

ρ_g - densidade da fase vapor, kg/m^3

μ_g - viscosidade da fase vapor, $\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$

e as velocidades efetivas das fases vapor (U_{Ge}) e líquido (U_{Le}), em m/s, são definidas como

$$U_{Ge} = \frac{U_{Gs}}{\varepsilon(1 - h_L) \sin \theta} \quad (\text{V.24})$$

$$U_{Le} = \frac{U_{Ls}}{\varepsilon h_L \sin \theta} \quad (\text{V.25})$$

onde U_{Gs} - velocidade superficial da fase vapor, m/s

U_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

ε - porosidade do recheio

θ - ângulo de corrugação, °

h_L - retenção de líquido

A correlação para estimativa da retenção de líquido se baseia na adaptação das correlações de Shi e Mersmann (1985), para estimativa da área interfacial efetiva, podendo ser escrita por

$$h_L = \left(4 \frac{F_t}{S} \right)^{2/3} \left[\frac{3 \mu_L U_{Ls}}{\rho_L (\sin \theta) \varepsilon g_{eff}} \right]^{1/3} \quad (\text{V.26})$$

onde h_L - retenção de líquido

F_t - fator de correção da retenção total de líquido

S - lado da corrugação, m

μ_L - viscosidade da fase líquida, $\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$

U_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

θ - ângulo de corrugação, °

ε - porosidade do recheio

g_{eff} - gravidade efetiva, m/s²

O termo F_t , na equação V.26, é um fator de correção que leva em conta a superfície do recheio que não é molhada quando a retenção de líquido ocorre no leito recheado. Já a gravidade efetiva representa a força agindo no líquido quando este se move de modo descendente através do recheio. O fluxo de líquido, sobre a ação dessa gravidade, pode ser comparado ao fluxo em colunas de paredes molhadas, conforme a Figura V.4. Todos esses parâmetros são definidos pelas expressões:

$$F_t = 29,12 (We Fr)_{Ls}^{0,15} \frac{S^{0,359}}{Re_{Ls}^{0,2} \varepsilon^{0,6} (1 - 0,93 \cos \gamma) (\sin \theta)^{0,3}} \quad (V.27)$$

$$g_{eff} = g \left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L} \right) \left[1 - \left(\frac{\Delta P / \Delta Z}{(\Delta P / \Delta Z)_{flood}} \right) \right] \quad (V.28)$$

onde S - lado da corrugação, m

ε - porosidade do recheio

θ - ângulo de corrugação, °

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

ρ_G - densidade da fase vapor, kg/m³

$\Delta P / \Delta Z$ - perda de carga operacional no leito recheado, Pa

$(\Delta P / \Delta Z)_{flood}$ - perda de carga quando há inundação no leito recheado, Pa

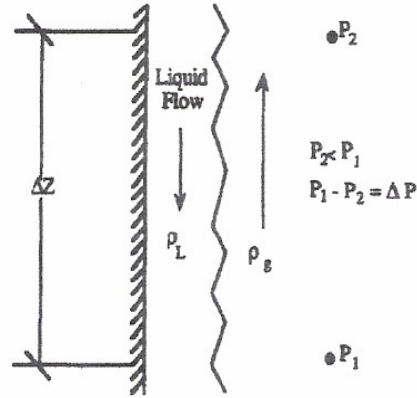


Figura V.4. Fluxo do filme líquido na superfície do elemento de um recheio estruturado
(ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993)

Adicionalmente, os números adimensionais de Reynolds (Re), Weber (We) e Froude (Fr) para a fase líquida são definidos por

$$Re_{Ls} = \frac{U_{Ls} S \rho_L}{\mu_L} \quad (V.29)$$

$$We_{Ls} = \frac{\rho_L S U_{Ls}^2}{\sigma} \quad (V.30)$$

$$Fr_{Ls} = \frac{U_{Ls}^2}{S g} \quad (V.31)$$

onde U_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

S - lado da corrugação, m

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

μ_L - viscosidade da fase líquida, kg/m·s

σ - tensão superficial do líquido, N/m

Assim como, o ângulo de contato entre o filme líquido e a superfície sólida do recheio (γ , °), é definido, no nosso caso, para líquido com tensão superficial abaixo de 0,055 N/m (carga C10-C13), por

$$\cos \gamma = 0,9 \quad (V.32)$$

O modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) oferece correlações para estimativa da perda de carga operacional e na condição de inundação. Entretanto, como será discutido no capítulo VI, essas correlações não se aplicam a colunas de pequenos diâmetros, somente para plantas pilotos e industriais, sendo assim, esses parâmetros foram medidos experimentalmente na coluna QVF e aplicados diretamente na equação V.28, para estimativa do parâmetro denominado gravidade efetiva.

Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) também mantiveram o Modelo da Penetração para avaliar a transferência de massa na fase líquida, mas reconhecendo que, para alguns sistemas, o tempo de exposição não é simplesmente função da velocidade efetiva do líquido e do comprimento da corrugação, como no modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985). Pesquisas na Universidade do Texas indicaram que, para casos em que a resistência na fase líquida era significativa, a teoria da penetração pode ser utilizada desde que fosse modificada com relação ao tempo de exposição:

$$t_e = \frac{S}{C_E U_{Le}} \quad (V.33)$$

onde t_e - tempo de exposição, s

S - lado da corrugação, m

U_{Le} - velocidade efetiva da fase líquida no leito recheado, m/s

e C_E é o fator de correção, menor que a unidade, que leva em conta as partes do leito recheado em que não há renovação rápida da superfície (bolsões estagnantes). Experimentos com o sistema oxigênio-ar-água (MURRIETA, 1991 apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993, 1996) mostraram que, para vários recheios estruturados, $C_E \sim 0,9$ – valor utilizado no Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996). Entretanto, baseado em trabalho recente de Murrieta et al. (2004), decidiu-se usar neste trabalho o fator de correção $C_E \sim 0,7$. Tal valor foi atribuído pelos autores ao mesmo sistema oxigênio-ar-água, mas para o recheio Sulzer BX, recheio estruturado do tipo tecido metálico, semelhante ao recheio Sulzer DX, utilizado como interno da Unidade QVF.

Desse modo, o coeficiente de transferência de massa para fase líquida pode ser estimado pela relação:

$$k_L = 2 \left(\frac{D_L C_E U_{Le}}{\pi S} \right)^{1/2} \quad (\text{V.34})$$

onde k_L - coeficiente de transferência de massa para fase líquida, m/s

D_L - difusividade da fase líquida, m²/s

O Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) baseia-se na relação de Shi e Mersmann (1985) para avaliar a área superficial efetiva, válida para recheios do tipo placa metálica. Assim, os autores utilizam a seguinte correlação para predizer a área molhada de superfícies de recheios do tipo tecido metálico, descartando a molhabilidade completa da superfície, assumida anteriormente por Bravo, Rocha e Fair (1985):

$$\beta = \frac{a_e}{a_p} = 1 - 1,203 \left(\frac{U_{Ls}^2}{S g} \right)^{0,111} \quad (\text{V.35})$$

onde β - fração da superfície usada para transferência de massa

a_e - área superficial usada na transferência de massa, m²/m³

a_p - área superficial nominal do recheio, m²/m³

U_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

S - lado da corrugação, m

g - aceleração da gravidade, m/s²

em que o acréscimo nas vazões de líquido não aumentam β , comportamento oposto ao de recheios do tipo placa metálica. A Figura V.2 ilustra o desempenho de recheios do tipo tecido metálico, com relação ao aumento de vazões de líquido e de vapor, confirmando o efeito prejudicial mostrado pela eq. V.35, em que o acréscimo nas vazões de líquido ocasiona o aumento do *HETP*.

V.3.3. Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997)

A eficiência da transferência de massa em colunas de absorção, equipadas com recheios estruturados, foi investigada experimentalmente por Brunazzi e Pagliant (1997). Os recheios analisados nesse trabalho foram o Mellapak 250 Y (folhas corrugadas de metal ou de plástico) e o Sulzer BX (tecido plástico). Os autores apontam

que muitos trabalhos na literatura têm sido publicados com o objetivo de avaliar a eficiência de colunas contendo recheios estruturados, entretanto, a eficiência é relatada em função da eficiência global de transferência de massa ou do coeficiente de transferência de massa do gás, deixando de examinar o coeficiente de transferência de massa do líquido, pressupondo ser desprezível a resistência no lado do líquido. Assim, Brunazzi e Pagliant (1997) examinaram o filme líquido e identificaram uma relação que permite determinar a contribuição desse filme à eficiência global de transferência de massa mais cuidadosamente, incorporando no seu modelo a influência da altura do leito.

Nawrocki e Chuang (1996), em seu trabalho de absorção, mostraram em um gráfico log-log que a relação entre o número de Sherwood para a fase líquida (Sh_L) e o inverso do número de Graetz (Gz) é uma reta, de forma que observações experimentais permitiram assumir que

$$Sh_L \propto Gz^B \quad (V.36)$$

Considerando os recheios estruturados uma série de placas paralelas e inclinadas, é razoável supor que a eq. V.36 possa ser usada para estimar o coeficiente de transferência de massa da fase líquida. Entretanto Brunazzi e Pagliant (1997) fizeram modificações nessa relação, baseados no trabalho de Ponter e Au-Yeung (1982 apud BRUNAZZI; PAGLIANT, 1997), pois no caso de recheios estruturados, há muitas junções entre os elementos de recheio, diferentemente de pratos inclinados. Essas modificações são incorporadas em um fator de mistura, função do número de Reynolds (Re_L) e do número de Kaptisa (Ka) que levam em conta a mistura, que ocorre na fase líquida entre os elementos de recheio, à medida que o líquido desce na coluna.

Desse modo, a equação sugerida por Nawrocki e Chuang (1996) pode ser modificada para levar em conta os efeitos de mistura, assumindo a seguinte forma:

$$Sh_L = A \frac{Gz^B}{Ka^C} \quad (V.37)$$

em que A, B e C são constantes e os números adimensionais de Sherwood para fase líquida (Sh_L), de Kaptisa (Ka) e de Graetz (Gz) são dados pelas expressões abaixo:

$$Sh_L = \frac{k_L d}{D_L} \quad (V.38)$$

$$Ka = \frac{\sigma^3 \rho_L}{\mu_L^4 g} \quad (V.39)$$

$$Gz = Re_L Sc_L \frac{\delta}{H} \quad (V.40)$$

onde k_L - coeficiente de transferência de massa para fase líquida, m/s

D_L - difusividade da fase líquida, m²/s

d - dimensão característica do filme líquido, m

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

μ_L - viscosidade da fase líquida, kg/m·s

σ - tensão superficial do líquido, N/m

g - aceleração da gravidade, m/s²

Re_L - número de Reynolds para fase líquida

Sc_L - número de Schmidt para fase líquida $\left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_L} \right)$

δ - espessura do filme líquido, m

H - distância de fluxo, m

Brunazzi e Pagliant (1997) definem uma distância de fluxo H que representa o caminho percorrido pelo líquido, do topo ao fundo da coluna, ao longo do leito recheado:

$$H = \frac{Z}{\sin \alpha} \quad (V.41)$$

onde Z é a altura da torre, m

α é o ângulo da linha de descida mais acentuada em que o líquido flui no recheio, °

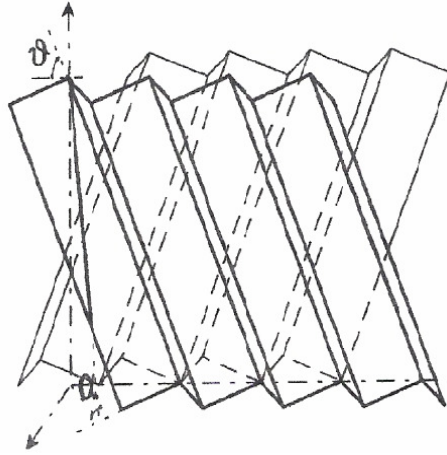


Figura V.5. Diagrama esquemático de um recheio estruturado
(BRUNAZZI; PAGLIANT, 1997)

A Figura V.5 mostra o ângulo de corrugação representado por ϑ , assim como, o ângulo da linha de descida mais acentuada em que o líquido flui no recheio, α , que pode ser estimado pela correlação de Spekuljak e Billet (1987 apud OLUJIĆ et al., 2004):

$$\alpha = \arctan \left[\frac{\cos(90 - \vartheta)}{\sin(90 - \vartheta) \cos \left[\arctan \left(\frac{b}{2h} \right) \right]} \right] \quad (\text{V.42})$$

onde b - base da corrugação, m
 h - altura da corrugação, m

Outra particularidade do Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997) é a dimensão característica do filme líquido, d , que é usada nos números de Reynolds e de Sherwood, função da espessura do filme líquido (δ), para líquidos Newtonianos e para fluxos em regime laminar, definida da seguinte maneira:

$$\delta = \left(\frac{3 \mu_L}{\rho_L g \sin \alpha} \frac{U_{SL}}{h_L \sin \alpha} \right) \quad (\text{V.43})$$

$$d = 4 \delta \quad (\text{V.44})$$

$$\text{Re}_L = \frac{\rho_L d U_{L,eff}}{\mu_L} \quad (\text{V.45})$$

onde U_{SL} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

$U_{L,eff}$ - velocidade efetiva da fase líquida, m/s

Adicionalmente, as velocidades efetivas da fase líquida e da fase vapor ($U_{G,eff}$) são definidas por:

$$U_{L,eff} = \frac{U_{SL}}{h_L \sin \alpha} \quad (V.46)$$

$$U_{G,eff} = \frac{U_{SG}}{(e - h_L) \sin \vartheta} \quad (V.47)$$

onde e - porosidade do recheio

h_L - retenção de líquido

Para determinação da retenção de líquido dinâmico no recheio, Brunazzi e Pagliant (1997) sugerem a utilização da correlação de Suess e Spiegel (1992 apud BRUNAZZI; PAGLIANT, 1997):

$$h_L = c a_g^{0,83} (3600 U_{SL})^x \left(\frac{\mu_L}{\mu_{L,0}} \right)^{0,25} \quad (V.48)$$

em que $c = 0,0169$ $x = 0,37$ para $U_{SL} < 0,011$ m/s

$c = 0,0075$ $x = 0,59$ para $U_{SL} > 0,011$ m/s

onde a_g - área superficial nominal do recheio, m²/m³

$\mu_{L,0}$ - viscosidade da água a 20 °C, kg/m·s

Finalmente, o coeficiente de transferência de massa para fase líquida pode ser obtido pela seguinte expressão:

$$k_L = A \frac{D_L}{d} \left(\frac{\mu_L^4 g}{\sigma^3 \rho_L} \right)^B \left(\frac{\delta \sin \alpha}{Z} \frac{U_{L,eff} d}{D_L} \right)^C \quad (V.49)$$

em que as constantes A, B, C são definidas pelos autores para o recheio Sulzer BX plástico:

$$A = 63,10$$

$$B = 0,676$$

$$C = 0,09$$

Com o objetivo de determinar a eficiência da transferência de massa em recheios estruturados, Brunazzi e Pagliant (1997) sugerem a utilização da correlação do coeficiente de transferência de massa da fase vapor, obtido por Rocha, Bravo e Fair (1996), mas com as velocidades efetivas das fases, líquido e vapor, obtidas por Brunazzi e Pagliant (1997). O diâmetro equivalente também é modificado, deixando de ser o lado da corrugação (S) e passando a ser o introduzido por Shi e Mersmann (1985):

$$Sh_G = 0,054 \left[\frac{(U_{G,eff} + U_{L,eff}) \rho_G d_e}{\mu_G} \right]^{0,8} \left(\frac{\mu_G}{\rho_G D_G} \right)^{0,33} \quad (V.50)$$

$$d_e = \frac{4e}{a_g} \quad (V.51)$$

onde d_e - diâmetro equivalente dos canais do recheio estruturado, m

D_G - difusividade da fase vapor, m^2/s

O último parâmetro a ser determinado para que se possa calcular o *HETP* do recheio é a área efetiva usada na transferência de massa. Sendo assim, Brunazzi et al. (1995) desenvolveram uma correlação para estimativa dessa área

$$\frac{a_e}{a_g} = \frac{d_e}{4} \left(\frac{h_L}{e} \right)^{1,5} \left[\frac{\rho_L g e (\sin \vartheta)^2}{3 \mu_L U_{SL}} \right]^{0,5} \quad (V.52)$$

No entanto, a área estimada por essa equação é superior à nominal do recheio em questão, Sulzer DX, devido ao fato de ter sido validada para recheios do tipo Mellapak, cuja molhabilidade é diferente daquela obtida com recheios do tipo tecido metálico. Desse modo, decidiu-se usar a correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996), eq. V.35,

desenvolvida exclusivamente para estimativa de área efetiva de recheios do tipo tecido metálico, mas com a mudança no diâmetro equivalente (d_e):

$$\frac{a_e}{a_g} = 1 - 1,203 \left(\frac{U^2}{d_e g} \right)^{0,111} \quad (\text{V.53})$$

V.3.4. Modelo de Olujić e colaboradores (2004)

O modelo Delft foi primeiramente desenvolvido por Olujić (1997), tendo passado por aperfeiçoamentos (OLUJIĆ et al., 1999-2004). Esse modelo, desenvolvido para recheios corrugados, considera o fluxo gasoso como um contínuo *zig-zag* através dos canais triangulares das corrugações, devido à rotação dos elementos de recheio em um ângulo de 90° com relação ao elemento logo acima no leito. A Fig. V.6 mostra em detalhes a organização de um leito recheado, assim como a rotação de seus elementos, enquanto a Fig. V.7 mostra o movimento em *zig-zag* percorrido pelo fluxo gasoso.

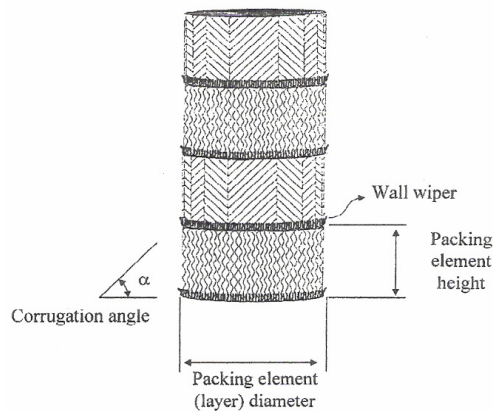


Figura V.6. Ilustração geométrica dos elementos de recheio corrugado no leito (OLUJIĆ; KAMERBEEK; GRAAUW, 1999)

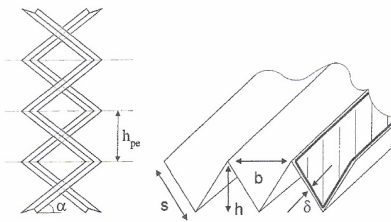


Figura V.7. Geometria básica e dimensões do canal triangular do recheio estruturado (OLUJIĆ; KAMERBEEK; GRAAUW, 1999)

Olujic e colaboradores (2004) definem alguns parâmetros geométricos do leito e do recheio em si, para que possam ser usadas as correlações dos coeficientes de transferência de massa. Dentre esses, se destaca o comprimento do canal do fluxo de gás em um elemento de recheio, dado pela equação

$$l_{G,pe} = \frac{h_{pe}}{\sin \alpha} \quad (V.54)$$

onde $l_{G,pe}$ - comprimento do canal do fluxo de gás em um elemento de recheio, m

h_{pe} - altura de um elemento de recheio, m

α - ângulo de inclinação da corrugação do recheio, °

Há também o diâmetro equivalente (hidráulico) do canal triangular do fluxo gasoso, especificado pela altura (h), o lado (s) e a base (b) da corrugação, com os lados da corrugação, cobertos por um filme líquido de espessura constante δ , mostrados na Figura V.7:

$$d_{hG} = \frac{\frac{(bh - 2\delta s)^2}{bh}}{\left[\left(\frac{bh - 2\delta s}{2h} \right)^2 + \left(\frac{bh - 2\delta s}{b} \right)^2 \right]^{0,5} + \frac{bh - 2\delta s}{2h}} \quad (V.55)$$

onde d_{hG} - diâmetro equivalente (hidráulico) do canal triangular do fluxo gasoso, m

Os autores definem outro parâmetro que é a fração em forma de V da seção transversal do canal triangular de fluxo gasoso, ocupado pelo filme líquido (φ), expresso pela equação

$$\varphi = \frac{2s}{b + 2s} \quad (V.56)$$

onde b - base da corrugação, m

s - lado da corrugação, m

As velocidades efetivas das fases, líquido e vapor, usadas no modelo são definidas como

$$u_{Ge} = \frac{u_{Gs}}{(\varepsilon - h_L) \sin \alpha} \quad (V.57)$$

$$u_{Le} = \frac{u_{Ls}}{\varepsilon h_L \sin \alpha_L} \quad (V.58)$$

onde u_{Ge} - velocidade efetiva da fase vapor, m/s
 u_{Le} - velocidade efetiva da fase líquida, m/s
 u_{Gs} - velocidade superficial da fase vapor, m/s
 u_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s
 ε - porosidade do recheio
 h_L - retenção de líquido
 α - ângulo de inclinação da corrugação, °
 α_L - ângulo da linha de descida mais acentuada em que o líquido flui no recheio, °

Assim como no Modelo de Brunazzi et al. (1997), a correlação de Spekuljak e Billet (1987 apud OLUJIC et al., 2004) será usada para calcular α_L :

$$\alpha_L = \arctan \left[\frac{\cos(90 - \alpha)}{\sin(90 - \alpha) \cos \left[\arctan \left(\frac{b}{2h} \right) \right]} \right] \quad (V.59)$$

A retenção de líquido é estimada pelo produto entre a área nominal superficial do recheio e a espessura do filme líquido:

$$h_L = \delta \cdot a_p \quad (V.60)$$

onde δ - espessura do filme líquido, m
 a_p - área nominal superficial do recheio, m²/m³

Olujć, Kamerbeek e Graauw (1999) afirmam, baseados em evidências experimentais, que a retenção de líquido não é afetado significativamente pela vazão de gás na região de pré-carga, o que implica que a espessura do filme líquido pode ser determinada através de correlações desenvolvidas para filmes líquidos na ausência de fluxo de gás, em contracorrente. Assumindo ser laminar o fluxo do filme líquido sobre a superfície recheada, a espessura do filme pode ser estimada pela correlação de Nusselt para filmes descendentes, adaptada para paredes inclinadas, podendo ser assim expressa

$$\delta = \left(\frac{3\mu_L u_{Ls}}{\rho_L g a_p \sin \alpha_L} \right) \quad (V.61)$$

onde δ - espessura do filme líquido, m

μ_L - viscosidade da fase líquida, kg/m·s

u_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

g - aceleração da gravidade, m/s²

a_p - área nominal superficial do recheio, m²/m³

α_L - ângulo da linha de descida mais acentuada em que o líquido flui no recheio, °

Tendo sido definidos todos os parâmetros geométricos e hidráulicos dos modelos, as correlações dos coeficientes de transferência de massa das fases, líquido e vapor, assim como a correlação para estimativa da área interfacial de contato, usada na transferência de massa entre as fases, podem ser apresentadas.

Olujć (1997) inovou quando apresentou sua correlação para estimativa do coeficiente de transferência de massa para fase vapor, fazendo uma analogia com a transferência de calor. O autor leva em conta no modelo um fenômeno comum, a transição do regime laminar para o turbulento, de modo que o coeficiente de transferência de massa global da fase vapor é representado pela média das contribuições de fluxo individuais do regime laminar e turbulento:

$$k_G = \sqrt{k_{G,lam}^2 + k_{G,turb}^2} \quad (V.62)$$

com

$$k_{G,lam} = \frac{Sh_{G,lam} D_G}{d_{hG}} \quad (V.63)$$

e

$$k_{G,turb} = \frac{Sh_{G,turb} D_G}{d_{hG}} \quad (V.64)$$

onde k_G - coeficiente de transferência de massa global da fase vapor, m/s

$k_{G,lam}$ - coeficiente de transferência de massa da fase vapor no regime laminar, m/s

$k_{G,turb}$ - coeficiente de transferência de massa da fase vapor no regime turbulento, m/s

$Sh_{G,lam}$ - número de Sherwood para fase vapor no regime laminar

$Sh_{G,turb}$ - número de Sherwood para fase vapor no regime turbulento

D_G - difusividade da fase vapor, m²/s

d_{hG} - diâmetro hidráulico do canal triangular do fluxo gasoso, m

Os números de Sherwood para fase vapor no regime laminar e no regime turbulento são dados pelas expressões:

$$Sh_{G,lam} = 0.664 Sc_G^{1/3} \sqrt{Re_{Gvr} \frac{d_{hG}}{l_{G,pe}}} \quad (V.65)$$

$$Sh_{G,turb} = \frac{Re_{Gvr} Sc_G \frac{\xi_{GL} \varphi}{8}}{1 + 12.7 \sqrt{\frac{\xi_{GL} \varphi}{8}} (Sc_G^{2/3} - 1)} \left[1 + \left(\frac{d_{hG}}{l_{G,pe}} \right)^{2/3} \right] \quad (V.66)$$

com número de Schmidt para fase vapor como

$$Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G D_G} \quad (V.67)$$

e número de Reynolds, baseado na velocidade relativa, expresso por:

$$Re_{Gvr} = \frac{\rho_G (u_{Ge} + u_{Le}) d_{hG}}{\mu_G} \quad (V.68)$$

onde d_{hG} - diâmetro hidráulico do canal triangular do fluxo gasoso, m
 $l_{G,pe}$ - comprimento do canal do fluxo de gás em um elemento de recheio, m
 ϕ - fração em forma de V da seção transversal do canal triangular de fluxo gasoso ocupado pelo filme líquido
 μ_G - viscosidade da fase vapor, kg/m's
 ρ_G - densidade da fase vapor, kg/m³
 u_{Ge} - velocidade efetiva da fase vapor, m/s
 u_{Le} - velocidade efetiva da fase líquida, m/s
 ξ_{GL} - fator de fricção gás-líquido

Olujic (1997) faz uso da expressão de Colebrook e White, para determinação do fator de fricção gás-líquido:

$$\xi_{GL} = \left[-2 \log \left[\frac{(\delta / d_{hG})}{3,7} - \frac{5,02}{Re_{Grv}} \log \left(\frac{(\delta / d_{hG})}{3,7} + \frac{14,5}{Re_{Grv}} \right) \right] \right]^{-2} \quad (V.69)$$

A resistência à transferência de massa na fase líquida é considerada desprezível por Olujic (1997) e, por isso, é válida a Teoria da Penetração para sua estimativa. Para isso, Olujic (1997) usa a mesma expressão de Bravo, Rocha e Fair (1985), na previsão do coeficiente de transferência de massa para fase líquida. Entretanto, o diâmetro equivalente do canal do recheio é modificado, assim como, o fator de renovação da superfície, que passa a ser $C_E \sim 1,1$:

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L u_{Le}}{\pi 0,9 d_{hG}}} \quad (V.70)$$

onde k_L - coeficiente de transferência de massa da fase líquida, m/s
 D_L - Difusividade da fase líquida, m²/s
 u_{Le} - velocidade efetiva da fase líquida, m/s
 d_{hG} - diâmetro hidráulico do canal triangular do fluxo gasoso, m

O último parâmetro a ser investigado para a estimativa do *HETP* pelo Modelo Delft foi a área superficial efetiva de transferência de massa, parâmetro este que sofreu mudanças, ao longo dos anos. Na primeira versão do modelo, Olujic (1997) postulou

que a área efetiva não poderia exceder à nominal e que, no caso de distribuição inicial uniforme de líquido no leito, a má distribuição só ocorre a baixas vazões de líquido, sendo assim, o autor obteve uma relação empírica onde a porcentagem molhada do recheio é função da vazão de líquido:

$$a_e = a_p \frac{(1-\Omega)}{\left(1 + \frac{A}{(u_{Ls})^B}\right)} \quad (V.71)$$

onde a_e - área superficial efetiva do recheio, m^2/m^3

a_p - área superficial nominal, m^2/m^3

Ω - fração de vazios na superfície do recheio

u_{Ls} - velocidade superficial da fase líquida, m/s

A, B - constantes dependentes do tipo e tamanho do recheio

Fair e colaboradores (2000) compararam os Modelos de Delft e de Bravo, Rocha e Fair (1993, 1996), chegando à conclusão de que o Modelo Delft superdimensionava as áreas efetivas. Uma das sugestões dos autores seria uma versão da correlação de Onda et al. (1968 apud FAIR et al, 2000), adaptada para recheios estruturados, para estimativa correta desse parâmetro. Seguindo a sugestão, Olujić et al. (2004) desenvolveram, então, a seguinte correlação para estimativa da área efetiva:

$$a_e = (1-\Omega) a_p \left[1 - \exp \left(-1,45 \left(\frac{0,075}{\sigma} \right)^{0,75} Re_L^{0,1} Fr_L^{-0,05} We_L^{0,2} \right) \right] \left(\frac{\sin 45^\circ}{\sin \alpha_L} \right)^n \quad (V.72)$$

com

$$n = \left(1 - \frac{a_p}{250} \right) \left(1 - \frac{\alpha_L}{45} \right) + \ln \left(\frac{(1-\Omega) a_p \left[1 - \exp \left(-1,45 \left(\frac{0,075}{\sigma} \right)^{0,75} Re_L^{0,1} Fr_L^{-0,05} We_L^{0,2} \right) \right]}{250} \right) + \left(0,49 - \sqrt{\frac{1,013}{p_{op}}} \right) \left(1,2 - \frac{\alpha_L}{45} \right) \quad (V.73)$$

e

$$Re_L = \frac{\rho_L u_{Ls}}{a_p \mu_L} \quad (V.74)$$

$$We_L = \frac{\rho_L u_{Ls}^2}{a_p \sigma} \quad (V.75)$$

$$Fr_L = \frac{u_{ls}^2 a_p}{g} \quad (V.76)$$

onde σ - tensão superficial do líquido, N/m

α_L - ângulo da linha de descida mais acentuada em que o líquido flui no recheio, °

p_{op} - pressão operacional, bar

Re_L - número de Reynolds da fase líquida

We_L - número de Weber da fase líquida

Fr_L - número de Froude da fase líquida

g - aceleração da gravidade, m/s²

μ_L - viscosidade da fase líquida, kg/m·s

ρ_L - densidade da fase líquida, kg/m³

Esquecendo-se o fato de que as equações V.71 e V.72 foram concebidas para recheios estruturados tipo placa metálica da Montz[®] e que, possivelmente, possam ser usadas para recheios tipo tecido metálico, os cálculos foram realizados, mas a descrição detalhada e os comentários encontram-se no próximo capítulo. No entanto, chegou-se à conclusão de que as equações citadas não forneciam uma estimativa correta do número de estágios, tanto para mais quanto para menos. Decidiu-se, então, calcular a área efetiva por uma correlação desenvolvida para recheios estruturados do tipo tecido metálico, no qual a alta eficiência é mantida mesmo a pequenas vazões de líquido. Assim como foi com o Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997), será utilizada a correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996) para estimativa da área superficial efetiva com mudança do diâmetro equivalente:

$$\frac{a_e}{a_g} = 1 - 1,203 \left(\frac{U_{sl}^2}{d_{hg} g} \right)^{0,111} \quad (V.77)$$

V.3.5. Adaptação do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985)

O modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) foi o primeiro, dentre os modelos teóricos de transferência de massa, criado para a estimativa de *HETP* de recheios estruturados de tecido metálico. Esse tipo de recheio (2ª geração) era o mais utilizado na

época, pois os recheios corrugados ainda estavam ganhando espaço e credibilidade na esfera industrial.

Atualmente, colunas com diâmetros pequenos, como o da Unidade QVF, são equipados com recheios de tecido metálico, tendo em vista os corrugados comerciais não serem fabricados para esse diâmetro, já que possuem problemas de molhabilidade com as baixas vazões de líquido empregadas nessas colunas. Por isso, houve grande dificuldade neste trabalho de se encontrarem modelos na literatura, que fossem aplicáveis a recheios estruturados de tecido metálico, pois somente o grupo SRP da Universidade do Texas em Austin havia estudado a transferência de massa nesse tipo de recheio (BRAVO; ROCHA; FAIR, 1985 e ROCHA; BRAVO; FAIR, 1993, 1996). Na concepção do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), os autores assumiram que a área superficial efetiva era igual à nominal do recheio, ou seja, que o líquido molhava totalmente esse tipo de recheio. A modificação que se propôs no presente estudo com relação a esse primeiro modelo do grupo SRP é que essa premissa não era válida e calculou-se, então, a área efetiva a partir da correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996). Na verdade, essa correlação foi utilizada também para a estimativa de área superficial efetiva tanto para o modelo de Olujić e colaboradores (2004) como para o de Brunazzi e Pagliant (1997), que desenvolveram as suas correlações para cálculo da área efetiva para recheios corrugados. Como poderá ser observada no capítulo de Resultados e Discussões, a modificação proposta neste trabalho, com relação ao modelo SRP original, proporcionou bons resultados para a estimativa de *HETP*, se comparados aos valores obtidos sem essas modificações.

Como mencionado acima, foi proposta a modificação do modelo Bravo, Rocha e Fair (1985), em que a área específica não seria mais a nominal, sendo estimada pela equação de Rocha, Bravo e Fair (1996), utilizada também nos outros modelos, com a modificação do diâmetro equivalente, proposto em cada um dos modelos:

$$\frac{a_e}{a_g} = 1 - 1,203 \left(\frac{U_{st}^2}{d_{eq} g} \right)^{0,111} \quad (V.78)$$

Outra modificação proposta foi a inserção do fator C_E de renovação de superfície na correlação de estimativa de k_L , estimado por Murrieta et al. (2004):

$$k_L = 2\sqrt{\frac{D_L u_{L,ef} C_E}{\pi S}} \quad (V.79)$$

onde $C_E = 0,7$

Os demais parâmetros do modelo, tais como o coeficiente de transferência de massa da fase vapor, as velocidades efetivas da fase líquida e da fase vapor e os parâmetros hidráulicos dos canais de recheio foram conservados nesta modificação, cujo objetivo foi tornar mais realística a estimativa de *HETP*, considerando o grau de molhabilidade do recheio, função da vazão de líquido empregada na separação.

V.4. Estimativa das Difusividades das Fases Líquida e Vapor

A difusividade da fase vapor foi estimada pela correlação de Fuller et al. (1966 apud CALDAS et al., 2003), que deve ser utilizada para sistemas binários gasosos, a baixa pressão. Nessa estimativa, como par binário da correlação de Fuller et al. (1966 apud CALDAS et al., 2003) foi utilizado os componentes chaves da separação de 98 % de pureza de C10 no topo, logo

$$D_G = \frac{1,0 \times 10^{-9} T^{1,75}}{P \left[(v_{C10})^{1/3} + (v_{C11})^{1/3} \right]^2} \left(\frac{1}{M_{C10}} + \frac{1}{M_{C11}} \right)^{1/2} \quad (V.80)$$

onde D_G - difusividade, m^2/s

T - temperatura, K

M_{C10} - massa molar do decano, kg/kmol

M_{C11} - massa molar do undecano, kg/kmol

v_{C10} - volume molecular do decano, $m^3/kmol$

v_{C11} - volume molecular do undecano, $m^3/kmol$

P - pressão total, atm

A difusividade da fase líquida foi estimada pela correlação de Wilke-Chang (1955 apud CALDAS et al., 2003) dada por

$$D_L = \frac{1,17 \times 10^{-13} (\xi_B M_B)^{1/2} T}{V_A^{0,6} \mu} \quad (\text{V.81})$$

onde D_L - difusividade, m^2/s

T - temperatura, K

μ - viscosidade da solução, cP

V_A - volume molar do soluto à temperatura de ebulição, m^3/kmol

M_B - massa molar do solvente

$\xi_B = 1,0$ (fator de associação para solventes apolares)

É necessário esclarecer que quando se estimava a difusividade da fase líquida para condições de topo, onde a pureza de C10 era de 98 %, o solvente era considerado o C10 e o soluto C11. Contudo, quando se ia estimar a difusividade para as condições de fundo da coluna, o C10 era considerado como soluto e C11^+ como solvente.

VI. Resultados e Discussão

VI.1. Separação de C10⁻ com 98 % de pureza no topo

Após a fase de simulação, utilizando-se o software comercial PRO II, para obtenção das condições operacionais otimizadas, na separação de C10⁻ com 98 % de pureza no topo, o experimento foi realizado em duplicata, conforme descrição no Capítulo III, assim como no procedimento operacional detalhado da Unidade QVF do Apêndice I. Embora os dois tipos de separação (cortes de C10⁻ e de C11⁻, com 98 % de pureza) tenham apresentado poucos desvios com relação ao fracionamento, serão apresentados, nesta seção, os resultados do melhor experimento, assim como a comparação com os resultados da simulação.

A comparação entre o balanço de massa global teórico, realizado pelo simulador PRO/II[®], com o balanço de massa experimental pode ser visualizado na Tabela VI.1.

Tabela VI.1 Balanço de massa global da separação de C10⁻ com 98% de pureza no topo

	SIMULAÇÃO	EXPERIMENTAL
Vazão de Alimentação (kg/h)	3,0	3,0*
Vazão de Produto de Topo (kg/h)	0,3	0,4 – 0,6*
Vazão de Produto de Fundo (kg/h)	2,7	2,4 – 2,6**

(*) Obtido por medidas experimentais

(**) Obtido pela diferença entre a vazão de alimentação e a vazão de produto de topo

Como pode se observar na tabela acima, a vazão de produto de topo foi uma variável de difícil controle, pois dependia intrinsecamente da potência do refeedor, que, por sua vez, era controlada ou pela perda de carga na coluna ou pela fixação de um percentual da potência máxima do mesmo (2,4 kW). De modo a evitar condições de inundação na coluna, utilizava-se o controle por perda de carga que gerou as flutuações nas vazões de produto de topo obtidas.

As condições operacionais em termos de pressão de operação empregadas nos experimentos podem ser visualizadas na Tabela VI.2.

Tabela VI.2. Condições operacionais da separação de C10⁺ com 98% de pureza no topo

Pressão do topo (mbar)	800
Perda de carga coluna inundada (mbar)	12
Perda de carga coluna (mbar)	5

O perfis de temperatura a refluxo total e na condição de operação contínua, observados experimentalmente, podem ser visualizados na Tabela VI.3, assim como, os perfis de temperatura, obtidos na simulação. Pode-se observar, também, na Tabela VI.3 que as temperaturas experimentais possuem uma incerteza de 2°C devido a ruídos inerentes à aquisição desses dados.

Tabela VI.3 Perfil de temperatura da separação de C10⁺ com 98 % de pureza no topo

TERMOPAR	Refluxo Total (± 2 °C)	Operação Contínua (± 2 °C)	Simulação* (°C)
TIC-7	165,4	164,8	164,8
TI-6	166,2	169,1	167,5
TI-5	166,0	179,6	180,5
TI-4	168,3	192,1	186,0
TI-3	195,4	198,8	196,8
TIC-1	200,7	202,4	201,3

(*) Na condição de operação contínua, regime permanente.

A Figura III.3 mostra a posição dos termopares na coluna, onde TIC-1 é a temperatura do refeedor e TIC-7 é a do vapor de topo. Observando-se os resultados da Tabela VI.3, pode-se notar que, na condição de refluxo total, a partir do TI-4, a temperatura se mantém constante nas seções recheadas superiores. Tal evidência demonstra que apenas 1,1 m de recheio são suficientes para se obter C10⁺ com alta pureza, comprovando, assim, que a operação em refluxo total é a de melhor eficiência. Quando se faz a comparação entre os perfis de temperatura para a condição contínua experimental e os perfis de simulação, pode-se observar que a separação foi reproduzida de forma excelente com desvios de no máximo 6 °C entre os resultados.

A Figura VI.1 mostra o perfil de composição dos componentes chave-leve (C10) e chave-pesado (C11), na fase líquida, obtido por simulação ao longo da coluna de destilação, onde o estágio 1 é o condensador total e o 22, o refeedor, que é parcial. A

concentração de C11 passa a diminuir nos últimos estágios da seção de fundo, devido à presença dos componentes C12 e C13, que tendem a se concentrar nesses estágios.

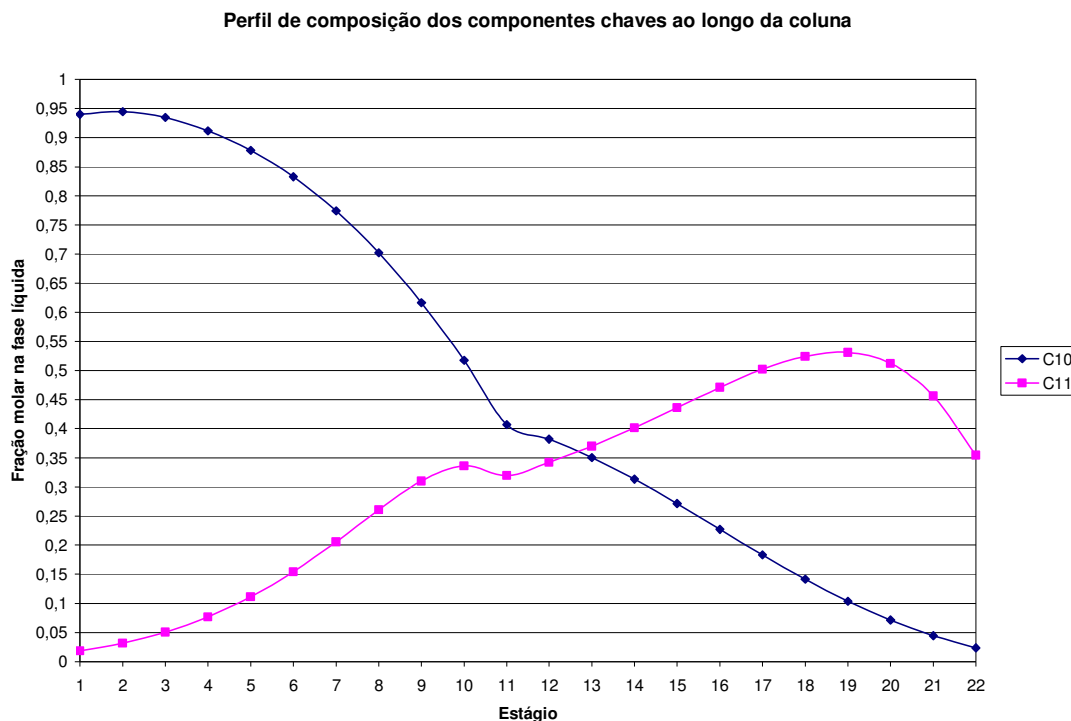


Figura VI.1. Perfil de composição dos componentes chaves ao longo da coluna

O Apêndice III.1.1 mostra em detalhes todas as análises realizadas para os produtos de topo e de fundo. As análises cromatográficas dos efluentes da coluna contida nesse apêndice são apresentadas na Tabela VI.4, assim como, os resultados, obtidos por simulação, da composição desses produtos.

O produto de topo tem pureza de 97,14 % em massa de C10⁻ (considerando n-C6 a n-C10) e um teor de impurezas de 2,86 %. Já o produto de fundo possui teor de 2,43% de C10⁻ (n-C9 e n-C10), demonstrando que a separação atingiu o objetivo proposto na simulação de pureza de 98 % em massa de C10⁻ no topo, já que os desvios em relação às composições de simulação foram pequenos.

Tabela VI.4. Composição dos produtos de topo e de fundo da separação de C10⁻ com 98 % de pureza no topo

Teor de n-parafinas (% m/m)	TOPO Experimental	FUNDO Experimental	TOPO Simulação	FUNDO Simulação
n-C5	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C6	0,01	0,00	0,00	0,00
n-C7	0,05	0,00	0,01	9,03E-12
n-C8	0,20	0,00	0,01	6,40E-09
n-C9	3,29	0,01	3,54	1,11E-4
n-C10	93,59	2,41	94,25	2,00
n-C11	2,83	25,16	2,20	32,86
n-C12	0,03	35,56	5,24E-3	34,26
n-C13	0,00	36,30	1,65E-5	30,54
n-C14	0,00	0,47	7,01E-10	0,32
n-C15	0,00	0,06	2,20E-13	0,02
Total	100,00	100,00	100,00	100,00

Outro conceito importante utilizado na indústria de petróleo é o de *gap/overlap* onde se pode determinar o grau de fracionamento qualitativo de uma carga, geralmente um derivado de petróleo em que não se pode definir a composição, devido aos inúmeros componentes, em que se gera uma fração leve e uma pesada. Se a diferença de temperatura da curva ASTM dos 5 % vaporizados (em volume) da fração pesada e dos 95 % vaporizados da fração leve for positiva, temos um *gap*, se negativa, um *overlap*.

O fracionamento é melhor quando se tem um *gap* entre os produtos. Conforme o fracionamento decresce, o *gap* se torna um *overlap* e um grande número de componentes dos dois produtos não são separados.

Para determinar a qualidade do fracionamento através do conceito de *gap/overlap*, os valores de temperatura ASTM D-86 dos 95 % vaporizados do produto de topo e dos 5 % vaporizados do produto de fundo foram tomados do Apêndice III.1, resultando em um *gap* de 34°C (temperatura dos 5 % vaporizados do produto de fundo igual a 207,3 °C e temperatura dos 95 % vaporizados do produto de topo de 173,3 °C), mostrando o bom fracionamento obtido na separação, antes evidenciado pela composição dos produtos de topo e de fundo.

Dado o sucesso obtido nessa separação, em termos de pureza dos produtos de topo e de fundo, foram utilizadas as propriedades físicas das fases, líquida e vapor, das seções de topo e de fundo, algumas das quais foram obtidas no simulador, no cálculo do *HETP* do recheio, via modelos de transferência de massa, para fins de comparação com o *HETP* experimental. Este procedimento será discutido na seção VI.5.

VI.2. Separação de C11⁻ com 98 % de pureza no topo

De acordo com as condições operacionais ótimas, obtidas no Capítulo IV por simulação, a separação de C11⁻, com 98 % de pureza no topo, foi realizada também em duplicata, porém, não com tanto sucesso como o da separação de C10⁻, com 98 % de pureza no topo, devido a problemas de capacidade da coluna. Os resultados aqui expostos são os da melhor separação, em termos de composição dos produtos, embora não haja grande diferença nessas composições. As análises das separações se encontram no Apêndice III.1.3.

Ao se compararem os dois cortes C10⁻ e C11⁻ no topo, além da composição dos produtos de topo e de fundo, o que os diferenciam são as vazões das fases, líquida e vapor. No caso da separação de C11⁻ no topo, as vazões de líquido e de vapor são maiores do que o dobro das obtidas para a separação com C10⁻ no topo.

Os resultados teóricos foram corroborados com os experimentais quando se tentou estabelecer o regime permanente na coluna, com o C11⁻ no topo e C12⁺ no fundo, a refluxo total, havendo inundação no leito recheado, com conseqüente resfriamento das seções e excessivo arraste e, com isso, afastamento do perfil de temperatura obtido na simulação. O problema foi contornado diminuindo a potência do refeedor. Assim, os cálculos de desempenho do recheio não foram aplicados para essa separação, pois as condições de simulação não foram reproduzidas satisfatoriamente pela mesma, com relação à pureza dos produtos.

A Tabela IV.5 mostra o balanço de massa do experimento onde as vazões não oscilaram, de modo intermitente, como no caso da separação de C10⁻ no topo, pois, nestes experimentos, a potência do refeedor foi controlada, fixando-se o valor de 50% da potência máxima.

A perda de carga no leito é mostrada na Tabela VI.6, assim como, a Tabela VI.7 traz os perfis de temperatura obtidos na separação, em contraste com os encontrados na simulação.

Tabela VI.5. Balanço de massa global da separação de C11⁺ com 98 % de pureza no topo

	SIMULAÇÃO	EXPERIMENTAL
Vazão de Alimentação (kg/h)	3,0	3,0*
Vazão de Produto de Topo (kg/h)	1,22	1,1*
Vazão de Produto de Fundo (kg/h)	1,78	1,9**

(*) Obtido por medidas experimentais

(**) Obtido pela diferença entre a vazão de alimentação e a vazão de produto de topo

Tabela VI.6. Condições operacionais da separação de C11⁺ com 98% de pureza no topo

Pressão do topo (mbar)	800
Perda de carga coluna inundada (mbar)	12
Perda de carga coluna (mbar)	7

A situação de inundação citada na fase de refluxo total é ilustrada, na Tabela VI.7, no seu perfil de temperatura, onde a seção de fundo apresenta uniformidade de temperatura e a seção central possui temperatura menor do que a de topo.

As composições dos produtos de topo e de fundo experimentais, que constam do Apêndice III.1.3, podem ser visualizadas na Tabela VI.8. As composições obtidas por simulação também são mostradas nessa tabela.

Tabela VI.7. Perfil de temperatura da separação de C11⁺ com 98 % de pureza no topo

TERMOPAR	Refluxo Total (± 2 °C)	Operação Contínua (± 2 °C)	Simulação (°C)
TIC-7	185,4	176,3	178,6
TI-6	186,2	186,2	186,1
TI-5	183,5	187,7	192,7
TI-4	195,9	195,4	202,5
TI-3	212,0	209,3	207,6
TIC-1	212,6	210,8	213,4

Tabela VI.8. Composição dos produtos de topo e de fundo da separação de C11⁺ com 98 % de pureza no topo

Teor de n-parafinas (% m/m)	TOPO Experimental	FUNDO Experimental	TOPO Simulação	FUNDO Simulação
n-C5	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C6	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C7	0,02	0,00	0,02	2,67E-14
n-C8	0,08	0,00	0,02	1,04E-11
n-C9	0,83	0,00	0,81	1,35E-07
n-C10	30,73	0,19	26,14	1,62E-03
n-C11	68,06	8,57	71,02	2,00
n-C12	0,28	45,04	2,00	50,91
n-C13	0,00	45,56	7,25E-03	46,57
n-C14	0,00	0,59	4,35E-07	0,49
n-C15	0,00	0,06	1,95E-11	0,03
Total	100,00	100,00	100,00	100,00

É importante salientar que o produto de topo atendeu às especificações fixadas na etapa de simulação, com uma pureza da ordem de 99,72 %, superior à especificada de 98 %, porém o produto de fundo possui teor de impurezas de C11⁺ de 8,76 %, quando deveria ter no máximo 2,00 %.

Desse modo, para aplicação das propriedades físicas das fases vapor e líquida na estimativa de *HETP* para essa separação, a simulação teria que ser validada pela mesma, garantindo que o número de estágios ideais usados na simulação da coluna fosse o mesmo desempenhado pelo recheio, o que de fato não ocorre, já que a composição do produto de fundo difere da obtida por simulação.

IV.3. Resultados das Modificações da Unidade QVF

Segundo a Seção III.6, os resultados das modificações da Unidade QVF mostrariam a influência da perda dos 4 elementos de recheio (0,22 m), retirados do leito inferior, para a montagem da nova retirada de produto de fundo. Com essa

modificação, o refeedor passa a ser total e não mais parcial, significando também a perda de mais um estágio.

As separações de C10⁻ e C11⁻ no topo com 98 % de pureza foram realizadas novamente com os mesmos parâmetros operacionais, sendo que agora, o efluente de fundo é retirado do fundo da coluna, não mais do refeedor. A carga utilizada nesses experimentos foi uma recomposição da utilizada nos testes anteriores, já que a quantidade recebida pela DETEN S.A. foi insuficiente para realização de todos os testes. As análises da carga recomposta se encontram no Apêndice II.1.

Com relação à separação de C10⁻ no topo, o fechamento do balanço de massa reproduziu o da simulação, pois foi usada uma potência fixa de 45 % da potência máxima, gerando as vazões encontradas na Tabela VI.9.

O perfil de temperatura nessa separação foi bem parecido ao da Tabela VI.3 e pode ser visualizado na Tabela VI.10.

A pressão operacional de topo foi de 800 mbar, porém as medidas de perda de carga na coluna não foram feitas devido a problemas operacionais com os sensores de pressão que indicaram perdas de pressão muito altas e pouco realistas. Dentre as melhorias programadas para a coluna, novos sensores estão sendo adquiridos para tentar resolver esse problema.

Tabela VI.9. Balanço de massa global da separação de C10⁻ com 98 % de pureza no topo após as modificações da Coluna

	SIMULAÇÃO	EXPERIMENTAL
Vazão de Alimentação (kg/h)	3,0	3,0*
Vazão de Produto de Topo (kg/h)	0,3	0,3*
Vazão de Produto de Fundo (kg/h)	2,7	2,7**

(*) Obtido por medidas experimentais

(**) Obtido pela diferença entre a vazão de alimentação e a vazão de produto de topo

A Tabela VI.11 mostra os resultados de composição para os produtos de topo e de fundo, obtidos na fase de modificação da coluna e, também, a composição desses produtos, caso o número de estágios fosse mantido, de acordo com as simulações.

Tabela VI.10. Perfil de temperatura da separação de C10⁻ com 98 % de pureza no topo após as modificações da coluna

TERMOPAR	Refluxo Total (± 2 °C)	Operação Contínua (± 2 °C)	Simulação (°C)
TIC-7	159,8	161,9	164,8
TI-6	163,8	164,9	167,5
TI-5	174,8	179,0	180,5
TI-4	188,9	191,6	186,0
TI-3	194,3	196,7	196,8
TIC-1	200,4	201,0	201,3

Um ponto experimental observado e importante, quando se quer alta pureza nos produtos, é a manutenção da potência do refeedor, sem que haja flutuação na mesma. Por vezes, quando se tinha cautela em se operar longe do ponto de inundação, controlava-se a perda de carga no leito, manipulando-se a potência do refeedor e, como resultado, as composições dos produtos eram próximas das simulações, diferindo em no máximo 1 %, para separação de C10⁻ no topo.

Como comentado anteriormente, o controle através da perda de carga na coluna ficou inoperante e a potência do refeedor foi, então, fixada. Quando se encontrava um valor ótimo de potência, que atendia às vazões de topo obtidas na simulação, a composição do produto de topo tendia a ficar acima da especificação. Exemplo disto é a fração mássica de n-C10 obtida no topo (96,31), que passa a ser 2 % superior à da simulação (94,25), como pode ser observado na Tabela VI.11.

A influência da perda dos elementos de recheio e do refeedor parcial pode ser comprovada pelo esgotamento insuficiente do n-C10 na seção de fundo, de modo que a porcentagem do n-C10 nesse produto é quase a mesma da carga (Apêndice II.1).

Em comparação com a separação antes das modificações (Tabela VI.4), a porcentagem do n-C12 e n-C13 diminuiu, como mostram os resultados da Tabela VI.11. Isso se explica pelo fato de a temperatura do refeedor ter sido mantida constante, antes e após a modificação. Antes das modificações, a energia conferida pelo refeedor, à mistura líquida ali contida, era suficiente somente para vaporizar n-C10, de modo que o produto de fundo, retirado do refeedor, era quase isento desse componente, atendendo à especificação, com altas recuperações dos demais

componentes n-C11, n-C12 e n-C13. Com as modificações, o produto de fundo não é mais retirado do refeedor, mas do fundo da coluna. Sendo assim, a temperatura da fase líquida contida nele teria que ser maior, para a vaporização de todos os componentes e, além da razão de refluxo que também deveria ser aumentada, para que o produto de topo continuasse com o mínimo de impurezas, seja do componente chave pesado, seja dos componentes não-distribuídos. Desse modo, se conseguiria o mesmo nível de recuperação desses componentes com a retirada do fundo da coluna, como quando os produtos eram retirados do refeedor.

O teste realizado para separação de C11⁺ no produto de topo, com a coluna após as modificações, obteve um resultado compatível com a simulação, em termos de balanço de massa, como evidenciado na Tabela VI.12. A potência empregada no refeedor foi mantida constante, em 70 % da máxima, fazendo com que a vazão de produto de topo não sofresse flutuações.

Tabela VI.11. Composição dos produtos de topo e de fundo para separação de C10⁺ no topo com a coluna após as modificações

Teor de n-parafinas (% m/m)	TOPO Experimental	FUNDO Experimental	TOPO Simulação	FUNDO Simulação
n-C5	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C6	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C7	0,09	0,00	0,01	9,03E-12
n-C8	1,17	0,00	0,01	6,40E-09
n-C9	1,76	0,02	3,54	1,11E-4
n-C10	96,31	9,64	94,25	2,00
n-C11	0,67	44,25	2,20	32,86
n-C12	0,00	28,44	5,24E-3	34,26
n-C13	0,00	17,52	1,65E-5	30,54
n-C14	0,00	0,13	7,01E-10	0,32
n-C15	0,00	0,00	2,20E-13	0,02
Total	100,00	100,00	100,00	100,00

Tabela VI.12. Balanço de massa global da separação de C11⁺ com 98 % de pureza no topo após as modificações da coluna

	SIMULAÇÃO	EXPERIMENTAL
Vazão de Alimentação (kg/h)	3,0	3,0*
Vazão de Produto de Topo (kg/h)	1,2	1,3*
Vazão de Produto de Fundo (kg/h)	1,8	1,7**

(*) Obtido por medidas experimentais

(**) Obtido pela diferença entre a vazão de alimentação e a vazão de produto de topo

A pressão operacional de topo foi de 800 mbar e a medição da perda de carga não foi possível devido aos problemas acima mencionados. O perfil de temperatura da separação é apresentado na Tabela VI.13.

Tabela VI.13. Perfil de temperatura da separação de C11⁺ com 98 % de pureza no topo após as modificações da coluna

TERMOPAR	Refluxo Total (± 2 °C)	Operação Contínua (± 2 °C)	Simulação (°C)
TIC-7	179,8	178,9	178,6
TI-6	184,6	184,3	186,1
TI-5	187,6	190,6	192,7
TI-4	191,1	198,1	202,5
TI-3	195,6	201,5	207,6
TIC-1	206,6	206,8	213,4

As composições dos produtos de topo e de fundo são apresentadas na Tabela VI.14, onde se observa que o esgotamento do n-C11 no fundo diminuiu, já que o número de estágios de separação também ficou menor, com as modificações. Em contrapartida, o produto de topo tem 0,35 % em massa de n-C12, evidenciando a alta pureza desse produto, ou seja, composição de C11⁺ de 99,65 %, excedendo ao que havia sido proposto.

Comparando-se a Tabela VI.14 com a VI.8, a fração mássica do n-C10 diminuiu no produto de topo, no teste após as modificações. Esta observação pode ser explicada pela recomposição da carga C10-C13, que teve o teor de n-C10 reduzido e, consequentemente, o seu teor no produto de topo também decresceu.

Tabela VI.14. Composição dos produtos de topo e de fundo para separação de C11⁻ no topo com a coluna após as modificações

Teor de n-parafinas (% m/m)	TOPO Experimental	FUNDO Experimental	TOPO Simulação	FUNDO Simulação
n-C5	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C6	0,00	0,00	0,00	0,00
n-C7	0,05	0,00	0,02	2,67E-14
n-C8	0,57	0,00	0,02	1,04E-11
n-C9	0,62	0,00	0,81	1,35E-07
n-C10	21,33	0,18	26,14	1,62E-03
n-C11	77,08	14,83	71,02	2,00
n-C12	0,35	40,37	2,00	50,91
n-C13	0,00	44,01	7,25E-03	46,57
n-C14	0,00	0,53	4,35E-07	0,49
n-C15	0,00	0,08	1,95E-11	0,03
Total	100,00	100,00	100,00	100,00

IV.4. Separação da mistura de óleos básicos NM/BS

Conforme mencionado no Capítulo III, Orlando Jr. (2005) concluiu que dentre as variáveis operacionais como pressão de topo, razão de refluxo, temperatura da carga e vazão de produto de fundo, a última é a que possuía a maior influência na separação da mistura dos óleos básicos: Neutro Médio, como produto de topo e *Bright Stock*, no fundo. O autor chegou a essa conclusão comparando as curvas de destilação ASTM D-2887 desses óleos básicos, fornecidas pelo Laboratório de Avaliação de Petróleos do CENPES/PETROBRAS, à composição dos produtos de topo e de fundo, geradas na simulação. Contudo, a unidade QVF apresentou limitações que foram cruciais na tentativa de se obter dados para a estimativa de *HETP* na separação dos óleos básicos

lubrificantes. A vazão de produto de fundo, por exemplo, não podia ser medida na Unidade QVF, mas obtida por diferença entre a massa de carga alimentada e a de produto de topo. Desse modo, foi idealizado um novo planejamento experimental, descrito na Tabela III.6, em que as variáveis pressão de operação, temperatura da carga, localização da entrada de carga, vazão de alimentação e razão de refluxo seriam investigadas, de modo que as conclusões obtidas por Orlando Jr. (2005) pudessem ser verificadas experimentalmente.

As simulações da Tabela III.6 que constam do Apêndice III.2.1 mostram que há pouquíssima diferença entre os desvios das análises dos produtos de topo e de fundo, obtidos por simulação, com relação às curvas originais (ASTM D-2887) dos produtos Neutro Médio e *Bright Stock*, respectivamente, quando as variáveis operacionais eram temperatura da carga, local de alimentação, vazão de alimentação e razão de refluxo, indicando que estes parâmetros exercem pouca influência sobre a composição dos produtos de topo e de fundo. De fato, as variações desses parâmetros causam no máximo um desvio de ± 2 °C nas temperaturas das curvas ASTM D-2887, geradas na simulação, dos produtos de topo e de fundo. Com relação às demais variáveis, a redução da pressão operacional de 10 para 1 mbar (corridas 13 e 14) com a temperatura do refeedor fixada em 350 °C, produziu uma diminuição do teor de leves no produto de fundo, tornando o produto de topo mais pesado, pela conseqüente redução da temperatura de ebulição dessas frações.

Os desvios encontrados no Apêndice III.2.1 são dados por:

$$Desv\ NM = \frac{|TOPO - NM|}{NM} \times 100 \quad (VI.1)$$

$$Desv\ BS = \frac{|FUNDO - BS|}{BS} \times 100 \quad (VI.2)$$

onde Desv NM - desvio absoluto da temperatura do produto de topo e a temperatura do Neutro Médio da curva ASTM D-2887, para a mesma fração vaporizada
Desv BS - desvio absoluto da temperatura do produto de fundo e a temperatura do *Bright Stock* da curva ASTM D-2887, para a mesma fração vaporizada
TOPO - temperatura da curva ASTM D-2887 do produto de topo para uma fração vaporizada

FUNDO - temperatura da curva ASTM D-2887 do produto de fundo para uma fração vaporizada

NM - temperatura da curva ASTM D-2887 do Neutro Médio para uma fração vaporizada

BS - temperatura da curva ASTM D-2887 do *Bright Stock* para uma fração vaporizada

Por intermédio das simulações, foram obtidas as temperaturas de topo para cada corrida e essas se revelaram superiores à temperatura de topo de projeto da Unidade QVF de 250 °C. Isso se explica porque o projeto original da coluna QVF foi idealizado para operar com uma carga diferente, isto é, com uma mistura hidrotratada contendo 90% volume de óleo desasfaltado e 10 % de gasóleo pesado. Como não havia quantidade suficiente dessa carga, optou-se por trabalhar com a mistura de óleos lubrificantes, Neutro Médio e *Bright Stock*. A Tabela VI.15 mostra as temperaturas de topo para cada corrida simulada.

Tabela IV.15. Temperaturas de topo obtidas por simulação para cada corrida

Corrida	Temperatura de Topo (°C)
1	269,1
2	268,7
3	269,1
4	269,1
5	268,6
6	268,0
7	269,1
8	268,7
9	268,1
10	269,3
11	268,8
12	265,1
13	242,1
14	234,4
15	268,4
16	269,2

Como citado no capítulo III, quando se atingia temperaturas de topo superiores a 250 °C, havia desligamento automático do refeedor da unidade. Essa situação foi imposta pelo fabricante da unidade, devido à fragilidade do divisor de refluxo, que não era feito de vidro borossilicato, o que impossibilitava se alcançar o regime permanente nos testes com NM/BS, em relação ao calculado pelas simulações. Com isso, a temperatura final de ebulição dos produtos de topo de todas as corridas (Apêndice III.2.2) são bem inferiores às aquelas encontradas na simulação (Apêndice III.2.1) e de um certo modo, as curvas de destilação desses produtos são bem semelhantes já que todas as corridas eram condicionadas ao mesmo perfil de temperatura dado por essa limitação de temperatura do sistema de topo.

Atualmente, o divisor de refluxo foi modificado para aço inox e a limitação de temperatura de topo está sendo eliminada, para que novos testes possam ser realizados.

Outro problema que já foi solucionado com as modificações da unidade diz respeito à saída do produto de fundo que, conforme o projeto original, era retirado do refeedor. Como o volume mínimo de mistura era de 15 litros, o produto de fundo gerado se misturava com o líquido do refeedor, cujas características eram mais próximas da carga.

Além disso, havia ainda o problema da potência das jaquetas de aquecimento ao longo da coluna, que muitas vezes “roubava” calor da mistura ascendente, provocando excesso de condensação. Com isso, o produto de topo obtido ficou mais leve do que previam as simulações e o produto de fundo, muito semelhante à carga.

A Tabela VI.16 mostra a razão mássica D/F do produto de topo obtido experimentalmente em relação à carga alimentada, assim como, o valor dessa relação obtida por simulação. Além disso, mostra ainda o desvio relacionado à diferença entre essas relações. Esse desvio é calculado da seguinte maneira:

$$Desvio (D / F)_{exp} \% = \frac{(D / F)_{exp} - (D / F)_{simulação}}{(D / F)_{simulação}} \times 100 \quad (VI.3)$$

Como a vazão de produto de fundo não podia ser medida experimentalmente, a razão B/F e seu desvio são determinados por:

$$(B / F)_{exp} = 1 - (D / F)_{exp} \quad (VI.4)$$

$$Desvio (B/F)_{exp} \% = \frac{(B/F)_{exp} - (B/F)_{simulação}}{(B/F)_{simulação}} \times 100 \quad (VI.5)$$

Tabela VI.16. Razões mássicas (D/F) e (B/F): experimental x simulação

Corrida	(D/F) _{exp} *	(B/F) _{exp} **	(D/F) _{simulação}	(B/F) _{simulação}	Desvio (D/F) _{exp} %	Desvio (B/F) _{exp} %
1	0,17	0,83	0,41	0,59	58	41
2	0,15	0,85	0,41	0,59	63	44
3	0,22	0,78	0,41	0,59	48	34
4	0,19	0,81	0,41	0,59	54	38
5	0,14	0,86	0,41	0,59	66	46
6	0,13	0,87	0,41	0,59	67	47
7	0,18	0,82	0,41	0,59	57	40
8	0,16	0,84	0,41	0,59	61	43
9	0,16	0,84	0,41	0,59	61	43
10	0,15	0,85	0,41	0,59	64	45
11	0,15	0,85	0,41	0,59	64	45
12	0,14	0,86	0,41	0,59	67	47
13	0,22	0,78	0,53	0,47	59	66
14	0,26	0,74	0,50	0,50	48	48
15	0,06	0,94	0,41	0,59	84	58
16	0,39	0,61	0,41	0,59	7	5

Os desvios das razões mássicas (D/F) e (B/F) experimentais, em relação às simuladas, ultrapassam a 60 % quando a vazão de alimentação é de 1 kg/h (corridas 1 a 12), mostrando a expressiva condensação dos produtos devida à baixa potência das jaquetas de aquecimento. Quando a pressão operacional foi de 1 mbar, houve uma melhora na recuperação de topo (corridas 13 e 14).

A corrida de número 15, realizada com vazão de alimentação de 2 kg/h, teve resultado sofrível que pode ser explicado pelos seguintes fatores:

- A temperatura de entrada da carga (230 °C) foi menor do que a planejada (280 °C), pois o aquecimento através da resistência foi insuficiente para essa vazão.

- Com essa baixa temperatura da carga, associada ao mau funcionamento das jaquetas, houve maior condensação do vapor ascendente na coluna.

A corrida que apresentou melhor resultado, em termos de balanço de massa, foi a de número 16 cuja vazão de alimentação foi de 0,5 kg/h. Essa corrida teve desvios inferiores a 10 %, evidenciando a melhor condição operacional para a mistura NM/BS na coluna antes das modificações.

Nas Tabelas VI.17 foram comparados o perfil típico de temperaturas obtido na coluna com o da simulação no PRO/II[®] onde se pode perceber que a maior diferença de temperatura ocorre no topo da coluna (TIC-7) devido à limitação da temperatura de topo de 250°C (abaixo do ponto de orvalho do destilado nas condições de separação desejada). As demais diferenças de temperatura, ao longo da coluna, podem ser explicadas pela baixa potência das jaquetas de aquecimento no processamento da mistura NM/BS.

Tabela VI.17. Perfil de temperatura na coluna para pressão operacional de 10 mbar:
experimental x simulação

TERMOPAR	Operação Contínua (± 2 °C)	Simulação (°C)	Δ (°C)
TIC-7	248,1	269,0	20,9
TI-6	278,9	285,2	6,3
TI-5	284,8	296,5	11,7
TI-4	292,0	305,1	13,1
TI-3	321,0	320,3	-0,7
TIC-1	345,0	350,0	5

À pressão operacional de 1 mbar, os resultados foram melhores para o topo da coluna (Tabela VI.18) devido ao abaixamento do ponto de ebulição da mistura, adequando-se à limitação de temperatura de topo da coluna. Entretanto, em termos de análises de destilação simulada (Apêndice III.2.2), a diminuição da pressão não acarretou diferenças significativas na composição dos produtos, contrariamente ao previsto pela simulação.

Tabela VI.18. Perfil de temperatura na coluna para pressão operacional de 1 mbar:
experimental x simulação

TERMOPAR	Operação Contínua (± 2 °C)	Simulação (°C)	Δ (°C)
TIC-7	244,0	242,5	-1,5
TI-6	276,9	280,4	3,5
TI-5	280,0	294,9	14,9
TI-4	295,0	307,9	12,9
TI-3	327,3	323,2	-4,1
TIC-1	343,2	350,0	6,8

VI.5. Análise de Desempenho do Recheio Sulzer® DX

Como anteriormente mencionado, a avaliação do desempenho do recheio Sulzer® DX foi feita utilizando-se os dados de simulação, no software comercial PRO/II®, da destilação da carga de composição conhecida C10-C13 (Apêndice II.1), validados pelos testes experimentais onde se objetivou a separação de decano com 98% de pureza no topo.

Para isso, uma coluna de destilação de 20 estágios teóricos foi simulada, conforme descrição no Capítulo IV. Com as propriedades físicas das fases, líquida e vapor, das seções de topo e de fundo da coluna, obtidas através das simulações no PRO/II®, foram calculados os valores de *HETP* do recheio Sulzer® DX, através dos modelos de transferência de massa teóricos e o empírico, descritos no Capítulo V para fins de comparação com o *HETP* experimental:

$$HETP_{EXP} = \frac{Z}{N} = \frac{2,2}{20} = 0,11 \text{ m/estágio} \quad (\text{VI.6})$$

onde *HETP_{EXP}* – *Height Equivalent to Theoretical Plate Experimental*, m/estágio

Z – altura do leito recheado, m

N – número de estágios teóricos

Um dos objetivos do presente trabalho foi o de analisar os resultados de cada modelo, tomando como base os experimentos realizados na destilação contínua de hidrocarbonetos, e escolher o que melhor descrevesse a transferência de massa que ocorria no leito recheado em questão.

Segundo Gualito e colaboradores (1997), é necessário calcular pelo menos o *HETP* do topo e do fundo, já que as propriedades físicas das fases, vapor e líquida, mudam ao longo da coluna, face à diferença de temperatura. Neste trabalho, usou-se a metodologia de se calcular o *HETP* para as condições de topo e de fundo, e posteriormente, obter-se um *HETP* médio, através da média geométrica desses valores, conforme a equação VI.7.

$$HETP_{MED} = \sqrt{(HETP_{TOPO}) \cdot (HETP_{FUNDO})} \quad (VI.7)$$

Após o cálculo do *HETP* médio pelos modelos, o desvio deste valor em relação ao *HETP* experimental foi feito através da equação VI.8:

$$Desvio\% = \frac{HETP_{MED} - HETP_{EXP}}{HETP_{EXP}} \times 100 \quad (VI.8)$$

As condições operacionais do experimento, as composições e as vazões das seções recheadas do topo e do fundo da coluna, obtidas pela simulação no PRO/II®, encontram-se na Tabela VI.19.

Quanto à geometria do recheio, alguns parâmetros foram descritos no capítulo III, entretanto, informações adicionais são mostradas na Tabela VI.20.

As propriedades físicas das fases, líquida e vapor, nas seções recheadas de topo e de fundo da coluna de destilação podem ser visualizadas na Tabela VI.21.

A Tabela VI.22 mostra as propriedades físicas usadas no cálculo das difusividades das fases líquida e vapor. Todos os parâmetros que constam das Tabelas VI.19 a VI.22 foram utilizados como dados de entrada nos modelos de transferência de massa teóricos e no empírico, investigados e descritos no Capítulo V, a saber, o Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), o Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996), o Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997), o Modelo de Olujić et al. (2004), a nova abordagem do Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) e o Modelo de Carrillo, Martin e

Rosello (2000). A programação de tais modelos foi realizada em plataforma MatLab® e pode ser encontrada no Apêndice IV.2.

Tabela VI.19. Condições operacionais da coluna de destilação obtidas no simulador PRO/II®

Condições Operacionais	TOPO	FUNDO
Vazão de Vapor (kmol/s)	3,25E-06	1,06E-05
Vazão de Líquido (kmol/s)	2,69E-06	1,50E-05
Vazão de Vapor (kg/s)	4,61E-04	1,67E-03
Vazão de Líquido (kg/s)	3,83E-04	2,44E-03
Volatilidade Relativa (α_{lk})	1,48	1,78
Constante de Equilíbrio (m)	0,7	1,68
Fração molar C10 no vapor	0,94	0,09
Fração molar C11 no vapor	0,02	0,58
Fração molar C10 no líquido	0,95	0,04
Fração molar C11 no líquido	0,03	0,46

Tabela VI.20. Geometria do recheio Sulzer® DX

Geometria do Leito Recheado	
Área superficial do recheio (m ² /m ³)*	900
Base da corrugação do recheio (m)*	6,40E-03
Altura da corrugação do recheio (m)*	2,90E-03
Porosidade do recheio*	0,937
Ângulo da corrugação (°)*	60,0
Ângulo efetivo de fluxo líquido (°)**	68,8
Altura de um elemento de recheio (m)***	0,055
Altura do leito recheado (m)***	2,2

(*) Fonte: Comunicação via e-mail com Eng. Spiegel da Sulzer®

(**) Modelo Olujić et al. (2004), equação V.59

(***) Fonte: QVF

Tabela VI.21. Propriedades físicas das fases, líquida e vapor, nas seções recheadas fornecidas pelo simulador PRO/II[®]

Propriedades Físicas	TOPO	FUNDO
Densidade de Vapor (kg/m ³)	3,27	3,35
Densidade de Líquido (kg/m ³)	619	620
Viscosidade do Vapor (kg/m.s)	7,60E-06	7,70E-06
Viscosidade do Líquido (kg/m.s)	2,24E-04	2,29E-04
Tensão Superficial (N/m)	1,15E-02	1,12E-02

Os modelos de transferência de massa teóricos utilizam correlações para a estimativa do coeficiente de transferência de massa do gás (k_g), do coeficiente de transferência de massa do líquido (k_l) e da área superficial efetiva de transferência de massa (a_e), juntamente com as velocidades superficiais da fase vapor, da fase líquida e o fator de esgotamento, dados estes experimentais, para cálculo do *HETP*. Somente o modelo empírico de Carrillo, Martin e Rosello (2000) não utiliza tais parâmetros para o cálculo do *HETP*, pois sua correlação é função de propriedades físicas, da pressão de operação e do fator F.

A diferença entre cada modelo encontra-se nos cálculos dos parâmetros k_l , k_g e a_e . Como mencionado no Capítulo V, por exemplo, alguns autores fazem uso da Teoria da Penetração para o cálculo de k_l , outros partem para uma abordagem empírica. Alguns consideram a_e como a área superficial nominal do recheio, já outros acreditam que nem toda área superficial é efetivamente utilizada na transferência de massa. Em virtude dessas diferentes abordagens, cada modelo gera um valor de *HETP* que, não necessariamente, terá a mesma ordem de grandeza do outro.

Os resultados dos modelos citados são expressos nas Tabelas VI.23 e VI.24 para as seções de topo e de fundo da coluna recheada, assim, o resultados de *HETP* podem ser vistos na Tabela VI.25. As equações para estimativa dos parâmetros, segundo cada modelo, encontram-se no Capítulo V.

Tabela VI.22. Propriedades físicas para a estimativa das difusividades das fases líquida e vapor (NICOLAIEWSKY, 2005)

Massa Molar de C10 (kg/kmol)	142
Massa Molar de C11 (kg/kmol)	156
Fuller et al.(1966)	
Volume Molecular de C10 (m^3/kmol)	0,21
Volume Molecular de C11 (m^3/kmol)	0,23
Treybal (1968)	
Volume Molecular de C10 a T_{eb} (m^3/kmol)	0,23
Volume Molecular de C11 a T_{eb} (m^3/kmol)	0,25

Tabela VI.23. Resultados dos modelos de transferência de massa teóricos e empírico para seção de topo

Modelos	λ	$u_{ls} \times 10^4$ (m/s)	u_{gs} (m/s)	F_v ($\text{Pa}^{0,5}$)	$k_l \times 10^6$ (m/s)	$k_g \times 10^3$ (m/s)	a_e (m^2/m^3)
Olujić et al. (2004)	0,84	4,92	0,11	0,20	240	3,51	598
Brunazzi e Pagliant (1997)					8,81	4,06	615
Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)					144	4,08	616
Bravo, Rocha e Fair (1985)					197	2,61	900
Bravo, Rocha e Fair * (1985)					165	2,61	609
Carrillo, Martin e Rosello (2000)	-	-	-		-	-	-

*Nova abordagem proposta neste trabalho

Tabela VI.24. Resultados dos modelos de transferência de massa teóricos e empírico para seção de fundo

Modelos	λ	$u_{ls} \times 10^4$ (m/s)	u_{gs} (m/s)	F_v (Pa ^{0,5})	$k_l \times 10^6$ (m/s)	$k_g \times 10^3$ (m/s)	a_e (m ² /m ³)
Olujć et al. (2004)	1,19	31,0	0,40	0,73	467	7,92	443
Brunazzi e Pagliant (1997)					25,0	11,7	471
Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)					219	11,2	472
Bravo, Rocha e Fair (1985)					385	7,54	900
Bravo, Rocha e Fair* (1985)					322	7,54	462
Carrillo, Martin e Rosello (2000)	-	-	-		-	-	-

* Nova abordagem proposta neste trabalho

Tabela VI.25. Resultados de *HETP* para seções de topo e fundo, com o valor médio e o desvio da medida experimental

Modelos	<i>HETP</i> _{TOPO} (m)	<i>HETP</i> _{FUNDO} (m)	<i>HETP</i> _{MED} (m)	Desvio (%)
Olujć et al. (2004)	0,06	0,12	0,09	22
Brunazzi e Pagliant (1997)	0,13	0,35	0,22	96
Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)	0,05	0,10	0,07	33
Bravo, Rocha e Fair (1985)	0,05	0,06	0,06	47
Bravo, Rocha e Fair* (1985)	0,08	0,13	0,10	8
Carrillo, Martin e Rosello (2000)	0,07	0,13	0,10	12

* Nova abordagem proposta neste trabalho

Nos diversos estudos encontrados na literatura, enfocando a estimativa de *HETP* em colunas de destilação, em sua grande maioria, os testes são realizados a refluxo total, que é a melhor condição na destilação. Nesse caso, as vazões molares nas seções de esgotamento e de retificação são iguais. Assim, a diferença de *HETP* entre topo e fundo

se deve apenas à variação das propriedades físicas das fases líquida e vapor, de acordo com o perfil de temperatura ao longo da coluna.

Entretanto, analisando a Tabela VI.25, pode-se ver grande diferença entre os *HETP*'s das seções de topo e de fundo, podendo ser atribuídas em grande parte, às diferenças nas vazões nas seções de topo e de fundo, pois os dados experimentais deste trabalho foram obtidos na operação contínua da unidade. Essas diferenças refletem diretamente:

- Nos cálculos do fator de esgotamento, função da inclinação da reta de equilíbrio e das vazões das fases, líquida e vapor.
- Sendo as vazões das fases, líquida e vapor, diferentes, as suas respectivas velocidades superficiais também o serão e, assim, alguns parâmetros que dependem dessas velocidades, também serão afetados.
- Com relação à área superficial efetiva, segundo Kister (1992) e Rocha, Bravo e Fair (1996), recheios de tecido metálico perdem eficiência quando as vazões de líquido e de vapor são aumentadas, comportamento oposto aos recheios de placas. A equação V.35, concebida por Rocha, Bravo e Fair (1996), mostra a dependência da área efetiva para recheios de tecido metálico com relação à velocidade superficial da fase líquida, explicando assim, a sua diminuição com o aumento da vazão de líquido.
- Nos coeficientes de transferência de massa, do lado do gás e do líquido, pois esses parâmetros podem ser função tanto da velocidade superficial do vapor quanto da do líquido ou de ambas. As correlações desses parâmetros encontram-se no capítulo V.

A razão principal para que os *HETP*'s do fundo sejam praticamente o dobro dos *HETP*'s de topo deve-se às diferenças entre as vazões nas seções de topo e de fundo: a vazão de líquido na seção de fundo é seis vezes maior que na seção de topo (carga sub-resfriada) e a vazão de vapor, por sua vez, é quatro vezes maior na seção de fundo do que na de topo, influenciando, desse modo, os parâmetros acima citados.

Outro fator que também contribuiu, em pequena escala, para a diferença entre os *HETP*'s de topo e fundo é a diferença nas propriedades físicas – já discutidas aqui – que influenciam os cálculos de k_g e k_l . Entretanto, a diferença de temperatura nos experimentos com a carga C10-C13 é cerca de 30 °C entre topo e fundo, de modo que a variação nas propriedades físicas é pequena e, por isso, estima-se que a contribuição para a discrepância entre os *HETP*'s se deve, principalmente, às vazões de líquido e de vapor (vide Tabela VI.21).

Avaliando, agora, a diferença nos resultados de *HETP* gerados pelos modelos, pode-se concluir que tal diferença se deve à forma que a área específica e os coeficientes de transferência de massa foram estimados.

Como vem sendo ressaltado neste trabalho, o desenvolvimento de modelos de transferência de massa para avaliação de eficiência de recheios estruturados é baseado em testes experimentais com recheios do tipo corrugado, em que os custos são menores e as propriedades de molhabilidade de superfície são diferentes dos recheios do tipo tecido metálico. Geralmente, colunas com diâmetro pequeno, como a Unidade QVF de 40 mm, operam com recheios do tipo tecido metálico, a baixas vazões de líquido. Usando-se os modelos investigados, nessa faixa de vazões, com recheios do tipo placa metálica, os resultados são muito conservadores (*HETP* muito altos), sugerindo que esses tipos de recheios não são indicados para baixas vazões. Para confirmar essas suposições, foram testadas as equações V.71-72 do modelo de Olujić et al. (2004) e os resultados mostraram que a eq. V.71 gera áreas superficiais abaixo da nominal, porém altas o suficiente para superestimar o número de estágios envolvidos na separação (*HETP* baixo), o que foi também observado por Fair e colaboradores (2000). Já a eq. V.72 gera *HETP*'s mais altos, a baixas vazões de líquido, como as vazões da unidade QVF (40 mm), de modo que tal comportamento seja esperado, para recheios tipo placa metálica. Tal fato foi corroborado por Kister (1992) conforme mostrado na Fig. V.1 para pontos inferiores ao ponto A, onde as vazões de gás e de líquido são pequenas. Adicionalmente, como já foi mencionado no capítulo anterior, o modelo de Brunazzi e Pagliant (1997), quando utilizado para baixas vazões, gerava áreas efetivas superiores a $950 \text{ m}^2/\text{m}^3$, tanto para seção de topo quanto para de fundo.

Após essas conclusões, decidiu-se calcular a área efetiva por uma correlação desenvolvida para recheios estruturados do tipo tecido metálico, onde a alta eficiência é mantida a pequenas vazões de líquido. Foi usada, então, a correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996) para estimativa da área superficial efetiva com mudança do diâmetro equivalente para o modelo de Brunazzi e Pagliant (1997), para o de Olujić et al. (2004) e para a nova abordagem de Bravo, Rocha e Fair (1985).

Sendo assim, uma primeira análise pode ser feita com relação à **área específica**, baseada nos resultados das Tabelas VI.23-24, onde se percebe que:

- Não existe grande diferença entre as áreas específicas geradas para as seções de topo e de fundo (com exceção à do Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), que considera a área efetiva igual à nominal do recheio), pois, como citado acima, todas as áreas

foram estimadas pela correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996) para recheios estruturados de tecido metálico.

- O único fator que muda de modelo para modelo é o comprimento característico do elemento de recheio – parâmetro usado para nos cálculos de transferência de massa e da hidrodinâmica que ocorrem no interior do recheio, sendo representadas, pelos números adimensionais, respectivamente, de Sherwood e de Reynolds. Como visto no Capítulo V, o Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), Brunazzi e Pagliant (1997) e o de Olujić et al. (2004) consideram um diâmetro hidráulico do canal triangular formado entre as placas do recheio, já Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) consideram, como comprimento característico, o lado da corrugação (S). A Tabela VI.26 mostra os comprimentos característicos calculados para cada modelo.

Tabela VI.26. Comprimentos característicos (m)

Bravo, Rocha e Fair (1985)	– d_{eq}	3,39E-03
Rocha, Bravo e Fair. (1993, 1996)	– S	4,31E-03
Brunazzi e Pagliant (1997)	– d_e	4,16E-03
Olujić et al. (2004)	– d_{hg}	2,42E-03

- As áreas calculadas variam de 55 a 70 % da área nominal: a seção de topo apresenta maiores áreas efetivas do que a de fundo, pois as correlações utilizadas (eq. V.35, V.53 e V. 77) possuem uma correção de área proporcional à velocidade superficial da fase líquida, comportamento típico de recheios de tecido metálico, onde se perde a eficiência, à medida que se aumentam as vazões de líquido e de vapor. Logo, a seção de fundo, cujas velocidades são maiores do que a seção de topo, apresenta áreas efetivas de transferência de massa menores. Esse comportamento fixa bem a diferença entre os recheios de placa e os de tecido metálico, onde aqueles não diminuem a sua área efetiva quando as vazões de líquido são aumentadas.
- Olujić e colaboradores (2004) acreditam, apoiados em trabalhos anteriores (OLUJIĆ et al., 2000 e OLUJIĆ et al., 2003), que recheios com altas áreas superficiais usam menos efetivamente suas áreas para transferência de massa do que os recheios comuns que possuem áreas em torno de $250 \text{ m}^2/\text{m}^3$. Segundo os autores, isso ocorre porque com o aumento do número de corrugações, característica dos recheios com alta área superficial, especialmente aqueles com cumes de corrugação mais

pontiagudos, o líquido experimentará maior dificuldade na sua tendência de se espalhar lateralmente. Daí, os autores recomendarem o uso dos recheios da Montz[®], com cumes arredondados, em que tais problemas não ocorrem, proporcionando maior molhabilidade quando vazões mais baixas são utilizadas. Além disso, afirmam os autores que não há variação brusca na direção do fluxo gasoso em cada transição entre os elementos de recheio e, desse modo, tanto o fluxo gasoso quanto os perfis de transferência de massa, encontram-se totalmente desenvolvidos.

Para a estimativa dos coeficientes de transferência de massa, alguns fatores, tais como as velocidades efetivas das fases gás e líquido e a retenção de líquido também devem ser inferidos. Segundo Caldas e colaboradores (2003), o líquido que fica retido numa torre recheada, durante sua operação, é chamado de retenção total de líquido ou *holdup*. Esse parâmetro é apontado por Rocha, Bravo e Fair (1993) como fator crítico para determinação da perda de carga e da eficiência de transferência de massa. Segundo os autores, o transporte de massa e a hidráulica no recheio estão interconectados, ou seja, não se pode calcular o *HETP* do recheio, independente da perda de carga, daí ser o Modelo Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) denominado de modelo de 2ª geração. Os outros modelos de transferência de massa investigados apresentam correlações independentes para a retenção de líquido, de modo que a predição da perda de carga no leito não é necessária para o seu cálculo.

Kister (1992) afirma que para colunas com diâmetros inferiores a 1 m, a perda de carga varia com o diâmetro da torre e, especificamente, para colunas contendo recheios estruturados, a diminuição do diâmetro acarreta maior perda de carga. Olujić e colaboradores (1999) concluíram ainda que para colunas cujo diâmetro tenda a ser igual à altura do elemento de recheio, que seria o caso da coluna QVF, há apreciável perda de carga, se comparada a colunas industriais. Eles também assinalaram que modelos desenvolvidos em colunas recheadas com diâmetros de plantas pilotos e industriais não devem ser usados para predizer a capacidade de colunas recheadas com pequenos diâmetros, pois a perda de carga gerada por esses modelos é subestimada.

Essa informação foi corroborada nos testes experimentais com a carga C10-C13 em que foi medida a queda pressão no leito, tanto a operacional na destilação contínua como a queda de pressão em condições de inundação, visto que a coluna possui um medidor de pressão no topo e outro no fundo. Tais parâmetros podem ser vistos na Tabela VI.2. A discrepância da perda de carga estimada por modelos teóricos para colunas de pequenos diâmetros, como a da Unidade QVF (40 mm), é tão grande que o

modelo de Olujić et al. (2004) estima uma perda de carga de 0,16 Pa/m (1,6E-3 mbar/m) enquanto que o valor medido é de 1–2,5 mbar/m em condições normais de operação. A perda de carga experimental nas condições de inundação é ainda maior, chegando a atingir 6 mbar/m, enquanto Fair et al. (2000) sugerem uma perda de carga de 10,25 mbar/m, como pressão do ponto de inundação, e que, em alguns casos, deve ser aumentada para 20 mbar/m quando se quer aumentar a convergência do Modelo SRP para se estimar a perda de carga operacional no leito.

A estimativa correta da perda de carga é de suma importância para o Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996), pois o cálculo da retenção de líquido depende estritamente da queda de pressão operacional e da de inundação. No entanto, os Modelos de Brunazzi e Pagliant (1997) e Olujić et al. (2004) podem ser considerados modelos de primeira geração, pois os parâmetros hidráulicos e de transferência de massa não são dependentes um do outro. O Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) também é considerado de primeira geração, pois as velocidades efetivas não são função da retenção de líquido, já que tal variável só começou a ser incorporada aos modelos posteriores ao mesmo, como por exemplo, o Modelo de Rocha, Bravo e Fair em 1993.

Outro aspecto incorporado nos Modelos de Brunazzi e Pagliant (1997) e de Olujić et al. (2004) é o ângulo efetivo de fluxo de líquido, representando a “linha de descida mais acentuada” do líquido escoando pelo recheio. Esse parâmetro foi incluído na velocidade efetiva da fase líquida, no coeficiente de transferência de massa da fase líquida e na espessura do filme líquido de ambos os modelos. O ângulo efetivo de fluxo líquido foi calculado pela eq. V.59 para o recheio Sulzer DX (Tabela VI.20).

A Tabela VI.27 mostra as velocidades efetivas calculadas para as fases líquida (u_{Le}) e vapor (u_{Ge}) em cada modelo, assim como, as retenções de líquido (h_L) e as difusividades do lado gás (D_G) e do líquido (D_L). Tais parâmetros são de grande relevância na determinação de k_l e k_g .

É importante notar que as velocidades efetivas calculadas por cada modelo de transferência de massa possuem a mesma ordem de grandeza, até mesmo no caso do modelo original de Bravo, Rocha e Fair (1985) e da versão modificada, que não incorporam a retenção de líquido no cálculo das velocidades efetivas das fases vapor e líquida, mas sim o perímetro disponível para o fluxo das fases por unidade de área superficial da torre, além das propriedades físicas (equações V.16-17).

As difusividades da fase vapor e da fase líquida, estimadas por Fuller et al. (1966 apud CALDAS et al., 2003) e por Wilke-Chang (1955 apud CALDAS et al.,

2003), respectivamente, foram calculadas para as condições de topo e de fundo, e usadas em todos os modelos. Há de se notar que as difusividades calculadas estão dentro da ordem de grandeza das encontradas na literatura, que para hidrocarbonetos líquidos é da ordem de $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ e para hidrocarbonetos na fase vapor, de $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

Apesar de cada modelo estimar a retenção de líquido por correlação própria, este parâmetro, quando calculado para a seção de topo, teve o mesmo valor e já para a seção de fundo, os valores divergem, porém mantendo a mesma ordem de grandeza. Esse comportamento decorre do fato de que as correlações de retenção de líquido dos modelos de Brunazzi e Pagliant (1997) e de Rocha, Bravo e Fair (1993) não serem diretamente proporcionais às vazões de líquido como a do modelo de Olujić et al. (2004). Assim, para baixas vazões de líquido, os valores de retenção de líquido tendem a convergir e quando a vazão é aumentada, os modelos passam a gerar valores diferentes.

Com os parâmetros hidráulicos e os de transferência de massa, os coeficientes de transferência de massa podem ser avaliados, levando-se em conta a influência de cada um deles.

Os modelos de Bravo, Rocha e Fair (1985), original e sua nova abordagem, de Rocha, Bravo e Fair (1996) e de Brunazzi e Pagliant (1997) usaram a teoria da penetração, mais apropriada aos estudos de absorção gasosa em colunas de parede molhada, para estimar os **coeficientes de transferência de massa do lado gás**. Para isso, esses modelos utilizam a relação de Johnstone e Pigford (1942 apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1996)

$$Sh_g = C_1 Re_g^m Sc_g^n \quad (VI.9)$$

A diferença entre os modelos Rocha, Bravo e Fair (1996) e Brunazzi e Pagliant (1997) reside somente nos comprimentos característicos (Tabela VI.26) usados nos números adimensionais de Sherwood e de Reynolds, já que Brunazzi e Pagliant (1997) se basearam no trabalho publicado por Rocha, Bravo e Fair (1996). Compilando a eq. VI.9, inclusive as constantes, Brunazzi e Pagliant (1997) desenvolveram somente a correlação de k_L , na tentativa de estimar a contribuição correta do filme líquido para a eficiência global de transferência de massa. Já o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) e a sua nova abordagem diferem do modelo de Rocha, Bravo e Fair (1996), não apenas

pelos comprimentos característicos usados nos números adimensionais, mas também nas constantes da eq. VI.9. Desse modo, observa-se nas Tabelas VI.23 e VI.24 que os modelos de Rocha, Bravo e Fair (1996) e de Brunazzi e Pagliant (1997) estimam k_g 's bem similares e o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) e sua nova abordagem geram k_g 's menores, pois as constantes são diferentes e menores, indicando maior resistência à transferência de massa na película gasosa.

Tabela VI.27. Parâmetros para determinação dos coeficientes de transferência de massa

Seção de Topo	Bravo, Rocha e Fair (1985)	Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)	Brunazzi e Pagliant (1997)	Olujić et al. (2004)
u _{Le} (m/s)	1,64E-02	1,60E-02	1,30E-02	1,56E-02
u _{Ge} (m/s)	0,13	0,14		
D _L (m ² /s)	6,30E-09			
D _G (m ² /s)	4,20E-06			
h _L	-	0,04		

Seção de Fundo	Bravo, Rocha e Fair (1985)	Rocha, Bravo e Fair. (1993, 1996)	Brunazzi e Pagliant (1997)	Olujić et al. (2004)
u_{Le} (m/s)	5,59E-02	3,30E-02	4,00E-02	5,30E-02
u_{Ge} (m/s)	0,49	0,55	0,53	0,52
D_L (m ² /s)	7,04E-09			
D_G (m ² /s)	4,28E-06			
h_L	-	0,11	0,08	0,07

Olujić et al. (2004), por sua vez, levam em conta um fenômeno comum, a transição de regime de escoamento, e por analogia à transferência de calor, o coeficiente de transferência de massa é calculado para os regimes laminar e turbulento (Olujić, 1997). O k_g , calculado para a seção de topo, fica próximo do estimado pelos modelos de Rocha, Bravo e Fair (1996) e de Brunazzi e Pagliant (1997). Entretanto, para a seção de fundo, o coeficiente de transferência de massa do lado gás difere do estimado por esses modelos, mostrando que o modelo de Olujić et al. (2004) é menos sensível ao aumento das vazões de líquido e de vapor.

A estimativa do **coeficiente de transferência de massa do líquido**, na maioria das vezes, é feita usando-se a teoria da penetração de Higbie (1935 apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1996), onde um fator C_E leva em conta as partes do recheio onde não há renovação rápida da superfície:

$$k_L = 2 \left(\frac{D_L C_E u_{Le}}{\pi S} \right)^{1/2} \quad (\text{VI.10})$$

A eq. VI.10 mostra a correlação de k_L para o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1996) onde C_E é 0,7 (Murrieta et al., 2004) e S (base da corrugação) é o comprimento característico. O modelo de Olujić et al. (2004) já admite $C_E = 1,1$ e o d_{hG} – diâmetro hidráulico para a fase gás – como comprimento característico. O modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), por considerar completa molhabilidade da superfície e sua total renovação, não leva em conta o fator C_E e considera um diâmetro hidráulico d_{eq} para o canal triangular do recheio. Contudo, a nova abordagem do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) também utiliza o fator de renovação de Murrieta et al. (2004) na estimativa de k_L , mantendo, porém, o diâmetro equivalente do modelo original.

Apesar dos quatro modelos acima estimarem o coeficiente de transferência de massa do lado do líquido pela teoria da penetração de Higbie (1935), há diferença nos k_L 's determinados por eles (vide Tabelas VI.23-24). Isso se deve justamente pelo C_E escolhido, pelo comprimento característico utilizado em cada modelo e pelas velocidades efetivas da fase líquida.

Brunazzi e Pagliant (1997) estudaram a contribuição do filme líquido e da influência da altura do leito na transferência de massa. O trabalho foi realizado em uma coluna de absorção de 100 mm de diâmetro e 2 m de altura, usando os sistemas ar/ CO_2 /água e cloroetanos/ar/Genosorb (absorvente). A correlação obtida por Brunazzi e Pagliant (1997) parece ser completa à primeira vista, porém gera k_L 's muito baixos se comparados aos estimados pelos modelos de Rocha, Bravo e Fair (1996), de Olujić *et al* (2004) e de Bravo, Rocha e Fair (1985).

Analisando o modelo de Brunazzi e Pagliant (1997), se a contribuição da distância percorrida pelo líquido for excluída da correlação de k_L , o *HETP* médio terá um desvio em torno de 50 % do valor experimental, diferentemente do calculado (96%). A distância do fluxo líquido é definida por:

$$H = \frac{Z}{\sin \alpha_L} \quad (\text{VI.11})$$

onde Z é a altura do leito recheado e α_L é o ângulo efetivo de fluxo do líquido no leito.

Sendo assim, resta concluir que a altura do leito recheado possui influência significativa em processos controlados pela resistência à transferência de massa na fase líquida, como a absorção de CO_2 , objeto de estudo do grupo de Brunazzi. Mas quando se estuda a transferência de massa na destilação, controlada na sua maioria dos casos pela resistência na fase vapor, característica de sistemas de baixa volatilidade, tal parâmetro provoca estimativas de *HETP*'s maiores do que os experimentais, levando à conclusão equivocada de que o recheio empregado possui baixa eficiência ou pequeno número de estágios teóricos. Conclui-se, desta forma, que a correlação de k_1 de Brunazzi e Pagliant (1997) deve ser adaptada para estimativa de eficiência de recheios, quando o processo de transferência de massa for destilação.

Kister (1992) afirma que regras práticas ou os modelos empíricos competem, de forma efetiva, com os modelos de transferência de massa teóricos, gerando na maioria das vezes, resultados mais confiáveis do que os últimos. Baseado nisso, selecionou-se a correlação empírica de Carrillo, Martin e Rosello (2000) para avaliar o desempenho de um modelo empírico frente aos teóricos.

Carrillo, Martin e Rosello (2000) propuseram uma correlação empírica baseada num extenso banco de dados de sistemas de destilação de hidrocarbonetos, conduzidos em diversos níveis de pressões, cujas variáveis são a pressão de operação, as densidades das fases, líquida e vapor, e da vazão de vapor. Carrillo, Martin e Rosello (2000) desenvolveram essa correlação a partir de experimentos realizados com o recheio do tipo tecido metálico Sulzer BX, cuja área nominal ($500 \text{ m}^2/\text{m}^3$) se assemelha à área calculada pela correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996), e essa foi a outra razão da escolha do modelo de Carrillo, Martin e Rosello (2000) – área nominal e tipo de recheio estruturado.

Os resultados de *HETP* de Carrillo, Martin e Rosello (2000) se mostraram melhores do que os dos modelos teóricos com apenas 12 % de desvio em relação ao experimental. A vantagem desse método é que a correlação, com apenas 4 (quatro) variáveis, apresenta melhor aderência do que os modelos teóricos e dispensa o cálculo dos coeficientes de transferência de massa e da área interfacial efetiva. Entretanto, a correlação de Carrillo, Martin e Rosello (2000) foi modelada para o recheio Sulzer BX,

não sendo aplicada para estimativa de desempenho de recheios do tipo corrugado, cuja eficiência, nesse caso, pode ser avaliada por Lockett (1998).

Enfim, os modelos de transferência de massa desempenharam o papel esperado, salvo pelo de Brunazzi e Pagliant (1997), cujos desvios ultrapassaram a 95 %, demonstrando que a sua correlação, deduzida para absorção gasosa, para estimativa de k_l deve ser adaptada para destilação. O modelo de Olujić et al. (2004) se mostrou o melhor dentre os teóricos, o que pode ser explicado pela modelagem completa realizada em torno de k_g , assim como, a inserção do ângulo efetivo de fluxo de líquido na velocidade da fase líquida e as melhorias realizadas no modelo de Olujić, ao longo dos anos, desde a sua concepção em 1997.

O modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996) não sofreu alterações, de modo que melhorias em k_g deveriam ser feitas, assim como, investigações na molhabilidade e na renovação de superfície (C_E), utilizados em k_l . Esse modelo foi adaptado neste trabalho, já que o valor de C_E utilizado no modelo atual é de 0,9 (MURRIETA, 1991 apud ROCHA; BRAVO; FAIR, 1996). Entretanto, Murrieta e colaboradores publicaram um trabalho em 2004, cujo fator de correção de superfície para o recheio Sulzer BX era de 0,7, valor escolhido para estimativa de k_l neste trabalho, reduzindo o erro de 34 para 33 %, em relação ao *HETP* experimental. No entanto, se modificações forem realizadas no modelo, o mesmo tem grandes chances de apresentar desvios menores ou da mesma ordem de grandeza dos obtidos pela correlação de Olujić et al. (2004).

A utilização do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) serviu para demonstrar as modificações feitas de uma geração para outra ao compará-lo com o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996). No entanto, conforme esperado, os valores de *HETP* gerados por esse modelo não reproduzem de modo satisfatório a transferência de massa ocorrida no leito recheado.

Houve, então, a necessidade de se adaptar o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) com a correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996), para a área efetiva, assim como, usar o fator C_E de Murrieta et al. (2004) e considerar constantes todos os outros fatores calculados pelo modelo (velocidades efetivas e k_g). As adaptações geraram um efeito positivo no *HETP* estimado, pois reduziram o erro para 8 % em comparação com o experimental, mostrando que o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) ainda é uma boa opção para colunas equipadas com recheio do tipo tecido metálico, como o da Unidade QVF, pois fora desenvolvido para esse tipo de recheio.

VII. Conclusões e Sugestões

VII.1. Separação da mistura C10-C13

A separação da mistura C10-C13 a fim de se obter 98 % de pureza de C10 no topo da coluna foi bem sucedida e os resultados das análises cromatográficas foram compatíveis com os simulados através do software comercial PRO/II®.

O número de estágios de equilíbrio necessários, para se efetuar a separação desejada, foi calculado em plataforma MatLab®, desenvolvida no presente trabalho, através do método aproximado para mistura multicomponente (Fenske-Underwood-Gilliland) e o resultado coincidiu com o obtido no simulador PRO/II®.

Com esse dado, foi determinado o *HETP* experimental, para as condições de topo e de fundo da coluna, e por fim, o *HETP* médio que seria, posteriormente, comparado àqueles obtidos pelos diversos modelos investigados.

Dentre os modelos existentes na literatura, foram escolhidos quatro teóricos, pois incluíam os cálculos dos coeficientes de transferência de massa das fases envolvidas, além da estimativa da área efetiva e um modelo empírico, o de Carrillo, Martin e Rosello (2000). Dentre os teóricos, foram testados o Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), o Modelo de Rocha, Bravo e Fair. (1993, 1996), o Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997) e o Modelo de Olujić et al. (2004) A programação de tais modelos foi realizada em plataforma MatLab® e pode ser encontrada no Apêndice IV.

Os modelos de transferência de massa desempenharam o papel esperado, salvo o de Brunazzi e Pagliant (1997), cujos desvios ultrapassaram a 95 %, mostrando que a sua correlação para estimativa de k_L , deduzida para absorção gasosa, deve ser adaptada para destilação.

O modelo de Olujić et al. (2004) apresentou desvio de 24 % em relação ao *HETP* experimental, resultado melhor do que o obtido com o modelo de Rocha, Bravo e Fair, (1993, 1996), cujo desvio foi de 47 %. Tal evidência pode ser explicada pela modelagem completa realizada em torno de k_g , assim como, pela inserção do ângulo efetivo de fluxo de líquido, na velocidade da fase líquida, além das melhorias realizadas no modelo de Olujić (1997), ao longo dos anos, desde a sua concepção em 1997.

No entanto, ao ser testado o modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), ignorando a premissa de molhabilidade total da superfície do recheio, inserindo as atualizações quanto ao cálculo da área efetiva pela correlação de Rocha, Bravo e Fair (1996), assim

como o uso do fator C_E de Murrieta et al. (2004) e, por fim, considerando constantes todos os outros fatores calculados pelo modelo (velocidades efetivas e k_g), o resultado foi surpreendente, isto é, desvio de apenas 8 % com relação ao *HETP* experimental.

Desse modo, mostrou-se que o Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) ainda é uma boa opção para colunas equipadas com recheio do tipo tecido metálico, para o qual o modelo fora originalmente desenvolvido.

Os resultados de *HETP* de Carrillo, Martin e Rosello (2000) se mostraram melhores do que os dos modelos teóricos, à exceção da modificação do modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985) proposta neste trabalho, com apenas 12 % de desvio em relação ao experimental. A vantagem desse método é que a correlação dispensa o cálculo dos coeficientes de transferência de massa e da área interfacial efetiva. Entretanto, a correlação de Carrillo, Martin e Rosello (2000) foi modelada para o recheio Sulzer BX, não sendo aplicada para estimativa de desempenho de recheios do tipo corrugado.

Com relação ao corte de C_{11} , o balanço de massa na coluna fechou com valores compatíveis aos simulados, tendo em vista a vazão do destilado não ter sofrido oscilações durante a operação contínua. No entanto, em termos de separação, as condições de simulação não foram reproduzidas satisfatoriamente, com relação à pureza dos produtos, já que a coluna operava inundada, não sendo possível realizar os cálculos de desempenho do recheio para essa separação.

VII.2. Separação da Mistura NM/BS

Nos testes experimentais com a mistura contendo 42 % em volume de Neutro Médio e o restante de *Bright Stock*, o regime permanente não era alcançado, visto que a temperatura máxima do sistema de topo não podia exceder 250 °C, que era inferior ao ponto de bolha do destilado desejado.

Devido ao mau funcionamento das jaquetas de aquecimento, que provocava excesso de condensação ao longo da coluna, o produto de topo obtido ficou mais leve do que previam as simulações e o produto de fundo, muito semelhante à carga.

Na separação NM/BS, quando a vazão de alimentação era de 1 kg/h, havia excessiva condensação do vapor ascendente também devido à baixa potência das jaquetas de aquecimento. No entanto, quando a pressão operacional foi de 1 mbar, mesmo operando com a vazão de 1 kg/h, houve uma melhora na recuperação de topo.

A corrida que apresentou melhores resultados, em termos de balanço de massa, foi aquela em que se empregou uma vazão de alimentação de 0,5 kg/h. Essa corrida teve desvios inferiores a 10 %, evidenciando a melhor condição operacional para a mistura NM/BS na coluna antes das modificações.

VII.3. Sugestões

Realizar novos testes com a mistura de óleos lubrificantes com a coluna após as modificações, de modo a se efetuar a estimativa de *HETP*, utilizando o recheio original da coluna e outros recheios estruturados.

Análise de desempenho da destilação de misturas de óleos lubrificantes (mais leves), com outros tipos de recheio na coluna, visando um estudo mais detalhado da influência do tratamento de superfície do recheio na sua performance.

Análise de desempenho da destilação de vários tipos de RAT (resíduo atmosférico), oriundos de petróleos pesados, a fim de otimizar a produção de gasóleos leves e pesados.

Estudo de correlações para estimativa de área efetiva em colunas contendo recheios estruturados, comprovando com testes experimentais na coluna.

Referências Bibliográficas

- BRAVO, J. L.; ROCHA, J. A.; FAIR, J. R. Mass-transfer in gauze packings. **Hydrocarbon Processing**, v. 64, n. 1, p. 91-95, 1985.
- BRUNAZZI, E.; PAGLIANTI, A. Liquid-film mass-transfer coefficient in a column equipped with structured packings. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 36, n. 9, p. 3792-3799, 1997.
- BRUNAZZI, E.; NARDINI, G.; PAGLIANTI, A.; PETARCA, L. Interfacial area of Mellapak packing: absorption of 1,1,1-Trichloroethane by Genosorb 300. **Chemical Engineering and Technology**, v. 18, p. 248-255, 1995.
- CALDAS, J. N.; LACERDA, A. I.; VELOSO, E.; PASCHOAL, L. C. M. **Internos de torres: pratos e recheios**. Rio de Janeiro: EdUERJ, 2003.
- CALDAS, J. N.; PASCHOAL, L. C. M. Recheio Adequado para cada Serviço. **Petro & Gás**, Rio de Janeiro, v. 32, p. 14-27, 1991.
- CARRILLO, F.; MARTIN, A.; ROSELLO, A. A shortcut method for the estimation of structured packings HEPT in distillation. **Chemical Engineering and Technology**, v. 23, n. 5, p. 425-428, 2000.
- CHEN, G. K. Packed Column Internals. **Chemical Engineering**, v. 91, n. 5, p. 40-51, 1984.
- FAIR, J. R.; GUALITO, J. J.; CERINO, F. J.; CARDENAS, J. C.; ROCHA, J. A. Structured packing performance – experimental evaluation of two predictive models. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 39, n. 6, p. 1788-1796, 2000.
- FAIR, J. R.; BRAVO, J. L. Distillation columns containing structured packing. **Chemical Engineering Progress**, v. 86, n. 1, p. 19-29, 1990.
- FERREIRA, A. A.; NETO, F. R. A. A destilação simulada na indústria do petróleo. **Química Nova**, v. 28, n. 3, p. 478-482, 2005.
- FITZ, C. W.; KUNESH, J. G.; SHARIAT, A. Performance of structured packing in a commercial-scale column at pressures of 0.02-27.6 bar. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 38, n. 2, p. 512-518, 1999.
- GUALITO, J. J.; CERINO, F. J.; CARDENAS, J. C.; ROCHA, J. A. Design method for distillation columns filled with metallic, ceramic, or plastic structured packings. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 36, n. 5, p. 1747-1757, 1997.
- HIGBIE, R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short period of exposure. **Transactions of the American Institute of Chemical Engineers**, v. 31, p. 365, 1935.

HUFTON, J. R.; BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. Scale-up of laboratory data for distillation columns containing corrugated metal-type structured packing. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 27, n. 11, p. 2096-2100, 1988.

LASO, M.; BRITO, M. H.; BROMIO, P.; STOCKAR, U. Liquid-side mass transfer characteristics of a structured packing. **The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal**, v. 58, p. 251-258, 1995.

LOCKETT, M. J. Easily predict structured-packing HETP. **Chemical Engineering Progress**, v. 94, n. 1, p. 60-66, 1998.

KISTER, H. Z. **Distillation design**. New York: McGraw-Hill, 1990.

McCABE, W. L.; SMITH, J. C.; HARRIOT, P. **Unit operations of chemical engineering**. 7. ed. New York: McGraw-Hill, 2005.

MEIER, W.; STOECKER, W. D.; WEINSTEIN, B. Performance of a new, high-efficiency packing. **Chemical Engineering Progress**, v. 73, n. 11, p. 71-77, 1977.

McGLAMERY, G. G. **Liquid Film Transport Characteristics of Textured Metal Surfaces**, PhD Dissertation, The University of Texas at Austin, 1988.

MIGUEZ, M. F.; SILVA, S. M. C.; NICOLAIEWSKY, E. M. A.; MEDRONHO, R. A. **Simulação Numérica do Escoamento de Filmes Líquidos em Recheios Estruturados**. Anais da XXIX Jornada Giulio Massarani de Iniciação Científica, Artística e Cultural da UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2007.

MOLOKANOV, Y. K.; KORABLINA, T. P.; MAZURINA, N. I.; NIKIFOROV, G. A. Approximate method for calculating the basic parameters of multicomponent fractionation. **Chemistry and Technology of Fuels and Oils**, v. 7, p. 129-133, 1971.

MURRIETA, C. R.; SEIBERT, A. F.; FAIR, J. R.; ROCHA, J. A. Liquid-side mass-transfer resistance of structured packings. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 43, n. 22, p. 7113-7120, 2004.

NAWROCKI, P. A.; XU, Z. P.; CHUANG, K. T. Mass-transfer in structured corrugated packing. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 69, n. 6, p. 1336-1343, 1991.

NICOLAIEWSKY, E. M. A. **Tópicos especiais em transferência de massa**. 2005. Disciplina do Curso de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro.

NICOLAIEWSKY, E. M. A. **Escoamento de Líquido e Geração de Área Superficial em Recheios Estruturados**. 1999. Tese de Doutorado – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro.

NICOLAIEWSKY, E. M. A.; TAVARES, F. W.; RAJAGOPAL, K.; FAIR, J. R. Liquid film flow and area generation in structured packed columns. **Powder Technology**, v. 104, p. 84-94, 1999.

- OLUJIĆ, Z.; BEHRENS, M.; COLLI, L.; PAGLIANTI, A. Predicting the efficiency of corrugated sheet structured packings with large specific surface area. **Chemical and Biochemical Engineering Quarterly**, v. 18, p. 89-96, 2004.
- OLUJIĆ, Z.; SEIBERT, A. F.; KAIBEL, B.; JANSEN, H.; RIETFORT, T.; ZICH, E. Performance characteristics of a new high capacity structured packing. **Chemical Engineering and Processing**, v. 42, p. 55-60, 2003.
- OLUJIĆ, Z.; JANSEN, H.; KAIBEL, B.; RIETFORT, T.; ZICH, E. Stretching the capacity of structured packings. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 40, p. 6172-6180, 2001.
- OLUJIĆ, Z.; SEIBERT, A. F.; FAIR, J. R. Influence of corrugation geometry on the performance of structured packings: an experimental study. **Chemical Engineering and Processing**, v. 39, p. 335-342, 2000.
- OLUJIĆ, Z.; KAMERBEEK, A. B.; GRAAUW, J. A corrugation geometry based model for efficiency of structured distillation packing. **Chemical Engineering and Processing**, v. 38, p. 683-695, 1999.
- OLUJIĆ, Z. Effect of column diameter on pressure drop of a corrugated sheet structured packing. **Trans IChemE**, v. 77, part A, 1999.
- OLUJIĆ, Z. Development of a complete simulation model for predicting the hydraulic and separation performance of distillation columns equipped with structured packings. **Chemical and Biochemical Engineering Quarterly**, v. 11, n. 1, p. 31-46, 1997.
- ORLANDO Jr., A. E. **Simulação e otimização preliminar de coluna de recheio estruturado na obtenção de óleos lubrificantes**. 2005. Projeto final de curso – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro.
- PELKONEN, S.; GÓRAK, A.; OHLIGSCHLÄGER, A.; KAESEMANN, R. Experimental study on multicomponent distillation in packed columns. **Chemical Engineering and Processing**, v. 40, p. 235-243, 2001.
- PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**, 6. ed. New York: McGraw-Hill, 1984.
- ROCHA, J. A.; BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. Distillation columns containing structured packings: a comprehensive model for their performance. 2. Mass-transfer model. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 35, n. 5, p. 1660-1667, 1996.
- ROCHA, J. A.; BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. Distillation columns containing structured packings: a comprehensive model for their performance. 1. Hydraulic models. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 32, n. 4, p. 641-651, 1993.
- SHI, M. G.; MERSMANN, A. Effective interfacial area in packed columns. **German Chemical Engineering**, v. 8, p. 87, 1985.

SMITH, J. M.; VAN NESS, H. C.; ABBOTT, M. M. **Introdução à termodinâmica de engenharia química**. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2000.

VERSCHOOF, H. J.; OLUJIC, Z.; FAIR, J. R. A general correlation for predicting the loading point of corrugated sheet structured packings. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 38, n. 10, p. 3663-3669, 1999.

WANG, G. Q.; YUAN, X. G.; YU, K. T. A method for calculating effective interfacial area of structured packed distillation columns under elevated pressures. **Chemical Engineering and Processing**, v. 45, n. 8, p. 691-697, 2006.

WANG, G. Q.; YUAN, X. G.; YU, K. T. Review of Mass-Transfer Correlations for Packed Columns. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 23, p. 8715-8729, 2005.

WEILAND, R. H.; AHLGREN, K. R.; EVANS, M. Mass-transfer characteristics of some structured packings. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 32, n. 7, p. 1411-1418, 1993.

Apêndices

Apêndice I. Procedimento Operacional da Unidade QVF

PROCEDIMENTO OPERACIONAL DA UNIDADE QVF
--

CARGA: Neutro Médio + *Bright Stock* / C10-C13

(A) MEDIDAS PRELIMINARES:

1. Ligar os disjuntores (da esquerda, liga a unidade, da direita, liga a exaustão) localizados no painel de controle (próximo à escada)
2. Ligar o transformador
3. Ligar o controle no painel até a posição **ON** (a luz do painel se acenderá)
4. No computador, clicar no ícone **AJZ Destillation**
5. Para gerar o relatório da operação (registra as variáveis escolhidas, que devem ser, no máximo, **seis** parâmetros):
 - i. Clicar em *On line date*
 - ii. Selecionar *Analog signals*
 - iii. Clicar em *Inputs*
 - Escolher as variáveis que se deseja registrar ao longo da operação:
 - PD9, P10, T01 e T07
 - podem ser escolhidas mais 2 variáveis, a critério da operação
 - Clicar em *New group*
 - *Group number*: o programa gera automaticamente um número
 - *Group name*: dar um nome ao grupo
 - *Ok*
6. Clicar em *Measurement on* para salvar os dados da corrida

Obs: Pode também usar os arquivos que já se encontram no computador:

 - i. Clicar em *Measurement*
 - ii. Selecionar o número da corrida (do dia da operação)
 - iii. Clicar em *Signal Groups*
 - iv. Escolher entre os grupos:
 - *Abschaltung*: T1, T7, H02 Prel (potência do *reboiler*);
 - *Jackets*: T 15, T16, T17, T18, T19, T23, T24, T25;
 - *Preheater*: T11 e T28;
 - *Pressures*: P10, P22, PD9 ou
 - *Temperatures*: T1, T3, T4, T5, T6, T7.A escolha do grupo fica a critério do operador.
7. Verificar se as 3 válvulas verdes, HV 16, HV 13, HV 19, estão fechadas. A válvula verde, HV 1, da alimentação, porém, deve ficar aberta!
8. Verificar se as válvulas da entrada da carga na coluna, HV 7, HV 8, HV 9, estão fechadas.
9. A válvula preta grande da alimentação (HV 2), as 2 pequenas do vaso do topo (HV 18, HV 20) e a válvula do produto de fundo (HV 14) devem ficar abertas!

Para equalizar a pressão as duas válvulas pretas pequenas (HV 18, HV 20), localizadas abaixo da proveta, devem ficar abertas, mas para uma melhor operação, fecha-se uma delas (de preferência a de trás – HV 20).

10. Verificar se as válvulas de drenagem estão fechadas:
 - 2 no *reboiler* (HV 9 *drain* e HV 8 *filling*)
 - 2 no trocador de calor do produto de fundo (HV 10 e HV 11)
11. Verificar se a válvula preta pequena do vaso de fundo (HV 14) está aberta.
12. Ligar a bomba de vácuo P2 (no computador)
 - **Obs:** Para facilitar o enchimento do *reboiler* deve-se ligar a bomba de vácuo (*Vacuum pump P2*), com set point em torno de 100 mbar (para a mistura BS/NM).
13. Alimentação do *reboiler*:
 - Pesar aproximadamente 12 kg de amostra (BS/NM);
 - Colocar a mangueira (metálica) na válvula HV 9, localizada abaixo do *reboiler*
 - Colocar a outra extremidade da mangueira no recipiente contendo a carga;
 - Abrir a válvula HV 9;
 - Verificar o alarme de nível (no *WinErs*) que passa de vermelho para verde, quando atinge a capacidade máxima do *reboiler*;
 - **Obs:** Frequentemente o alarme de nível é acionado novamente, indicando a necessidade de se adicionar mais carga no *reboiler*.
 - Pesar o material que sobrou no recipiente de carga.
14. Colocar os parâmetros operacionais:

Obs: Esses valores serão informados na **Programação Operacional**.

 - Temperatura:
 - *Heater 2 Control* → *Swich Temperature* (temperatura do *reboiler*)
 - Obs: Esta temperatura não pode exceder 350°C. Quando isso acontecer o *Heater Flask* desligará automaticamente. Sendo necessário religá-lo quando a temperatura abaixar.
 - TIC 11 (temperatura da carga): 280 °C
 - *Tdiff TI 07*: diferencial de temperatura de 140 °C
 - Pressão:
 - PIC 10 (pressão do topo)
 - PD 9 (diferencial de pressão)
 - Razão de refluxo:
 - KS 8:
 - Reflux Time
 - Product Time
 - Vazão de alimentação: FIC 12
15. Ligar *Heater Flask* e *Heater Insulation*.
16. Ligar *Constant Time* e *Total Reflux* no KS8
17. Monitorar o perfil de temperatura.
18. Observar mudança de temperatura em TI 3, quando começar a subir ligar *Heating Jackets* – o delta de T deve ser ZERO.
19. Quando o vapor já estiver atingindo o topo da coluna, isto é, quando a temperatura do TIC 6 começar a subir, ligar o banho de óleo térmico (LAUDA, na posição ON), abrir a válvula HV 25 (a do meio), colocando-a na posição vertical, e abrir a água de resfriamento.
20. Colocar a carga no balão de alimentação esquerda (V1), de acordo com a quantidade determinada na **Programação Operacional** com o auxílio de um

funil, contendo papel de filtro para a retirada de qualquer material sólido. Para acelerar a descida da carga:

- fechar a válvula verde (HV 1);
- abrir a válvula preta grande (HV 2, em cima do balão);
- abrir a válvula preta pequena (HV 3, em cima do balão);
- fechar HV 4.

21. Quando encher o balão:

- fechar HV 3;
- abrir HV 1;
- abrir HV 4.

22. A coluna vai operar a refluxo total até que as temperaturas TI 6 a TIC 1 estejam estabilizadas.

Obs: Se houver a necessidade de liberar os leves proceder da seguinte forma:

- o Liberação dos leves:
 - Sair da condição de Total Reflux para Total Product, em KS 8 até que a temperatura de topo volte a subir;
 - Voltar à condição de Total Reflux.

(B) PROCEDIMENTO DE OPERAÇÃO CONTÍNUA

1. Zerar o *Totalizer* da *Dosing Pump* segundo o procedimento a seguir:

- a. Para isso, deve-se retirar a capa do fluxômetro e seguir as seguintes instruções:
 - i. Apertar **E** – irá aparecer *Measuring Variables*;
 - ii. Apertar **+** ou **-** até aparecer no visor **TOTALIZER**;
 - iii. Apertar **E** até que apareça **Mass Flow**;
 - iv. Colocar a senha: **0080**, apertar **E** para confirmar cada dígito informado;
 - v. Apertar **E** até que apareça **RESET TOTAL**;
 - vi. Apertar o **++** para aparecer **YES**;
 - vii. Confirme apertando o **E**;
 - viii. **SURE**;
 - ix. **YES**
 - x. Confirme com **E** e
 - xi. Aperte **+** e **-** juntos para dar **ESC** no sistema.

Obs: Se por acaso, aparecer a mensagem: **PROGRAM LOCKED**, é só apertar **+/ -** novamente. Apertar **+** e **-** juntos equivale a tecla **ESC**.

2. Antes de ligar a *Dosing Pump* tirar do modo *Total Reflux*.

3. Alimentar a coluna: abrir uma das válvulas de entrada de carga – HV 7, HV 8, HV 9 – de acordo com a **Programação Operacional** do dia.

4. Ligar o *Heater Feed*

5. Estimar a vazão de destilado com o uso de um cronômetro medindo-se a massa em função do tempo.

Obs: Quando começar a produção de destilado e de produto de fundo abrir as válvulas HV 24 e HV 26 com uma inclinação de 30° e 45°, respectivamente

6. Observar a potência de aquecimento, em Heater 2 Control, durante a operação verificando a necessidade de ajustar esse valor:

- Heating Power T < T.switch: 100 %
- Heating Power T > T.switch: Valor informado na Instrução Operacional
- Switch Temperature: Informado na Instrução Operacional

Isto deve evitar problemas de inundação na coluna por excesso de vaporização.

7. A fim de facilitar o balanço de massa da coluna, checar os valores do **TOTALIZER** ao final da corrida.

(C) PROCEDIMENTO DE SHUT DOWN (PARADA DA OPERAÇÃO)

1. Durante os procedimentos de *shut down*, colocar a unidade em refluxo total para que a válvula solenóide deixe de funcionar;
2. Clicar na **HEATING JACKETS, HEATER FEED, HEATER FLASK** e **HEATER INSULATION** e colocar em *off*;
3. Verificar a temperatura do topo que deve estar em torno de 120°C;
4. Abrir o suspiro (HV 11) bem devagar, antes de desligar a bomba de vácuo;
5. Desligar a bomba de vácuo **P2**;
6. Deixar o banho de refrigeração funcionando o tempo suficiente para que ele reduza a temperatura no topo até, no mínimo 100 °C, só então desligar;
7. Fechar as duas válvulas (entrada e saída – HV 25, HV 24 e HV 26) do óleo térmico para que ele não volte para a bandeja;
8. Fechar a entrada de água de resfriamento;
9. Para interromper o programa no computador, clicar em *measurement off*;
10. Desligar o computador; (*Exit*)
11. Desligar o painel de controle na unidade
12. Desligar o transformador e
13. Desligar o painel de energia da unidade e o da exaustão.

(D) AMOSTRAGEM DE TOPO E FUNDO: Recolher volume especificado na Instrução Operacional dos produtos de topo e de fundo para realização de análises no CENPES.

Apêndice II. Análises das Cargas

II.1. Análises da Carga C10-C13

Código	Método	Ensaio	Unidade	CARGA	CARGA RECOMPOSTA
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	56,8	56,3
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,7473	0,7491
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s	1,812	1,898
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	1,317	1,380
		a 060,0 °C	mm2/s	1,009	1,057
		a 100,0 °C	mm2/s		
310.066.1		D86	% vol		
		PIE		191,0	194,9
		5		195,2	199,0
		10		196,4	199,8
		15		197,2	200,7
		20		198,3	201,8
		30		200,2	203,7
		40		202,5	205,9
		50		204,7	207,8
		60		207,9	210,3
		70		211,3	213,3
		80		215,4	216,9
		85		217,9	218,9
		90		221,1	221,0
		95		224,6	223,8
		PFE		238,5	241,4
		Recuperado (%vol)		98,5	99,0
		Resíduo (%vol)		1,0	1,0
		Perdas (%vol)		0,5	0,0
251.011.0		Teor de n-parafinas	%m/m		
		n-C5		0,00	0,00
		n-C6		0,00	0,00
		n-C7		0,00	0,00
		n-C8		0,03	0,03
		n-C9		0,38	0,24
		n-C10		13,41	9,09
		n-C11		32,09	29,07
		n-C12		29,11	31,89
		n-C13		24,66	29,25
		n-C14		0,28	0,37
		n-C15		0,02	0,04
		n-C16		0,00	0,00
		Total		100,00	100,00

II.2. Análises da Carga NM/BS

II.2.1. Análises do Neutro Médio

Neutro Medio:

Densidade 20/4: **0,8500**
 Índice Refração: **1,4762**
 Ponto Fluidez: **-3**
 Viscosidade:
 1a. Temp.:
 2a. Temp.:
 Peso Molecular:
 COR: **L 1,5**
 Tensão Superficial:
 Nitrogênio Total: **56,69 mg/Kg**
 °API **0,8500**

D1160	
%	
0	335,2
5	443,1
10	464,6
20	479,7
30	481,0
40	482,3
50	490,5
60	494,8
70	499,6
80	502,7
85	513,9
90	519,6
95	544,9
95,8	561,0

D 5236			Densidade Relativa	
	%Massa	%Volume	20/4 °C	°API
Carga	100,0	100,0	0,8818	28,3
PIE - PFE	82,6	82,8	0,8802	28,6
Res. 480°C	14,0	13,9	0,8885	27,1
Perdas	3,4	3,3		

HT-750			
0	332,0	51	451,5
1	349,0	52	452,5
2	366,0	53	453,0
3	376,0	54	454,0
4	383,0	55	454,5
5	388,5	56	455,0
6	393,3	57	456,0
7	396,5	58	456,5
8	400,0	59	457,0
9	403,0	60	458,0
10	405,5	61	458,5
11	408,0	62	459,5
12	410,0	63	460,0
13	412,0	64	461,0
14	414,0	65	461,5
15	415,5	66	462,0
16	417,0	67	463,0
17	418,5	68	463,5
18	420,0	69	464,5
19	421,5	70	465,0
20	422,5	71	466,0
21	423,5	72	466,5
22	425,0	73	467,5
23	426,0	74	468,0
24	427,5	75	469,0
25	428,5	76	469,5
26	429,5	77	470,5
27	430,5	78	471,0
28	431,5	79	472,0
29	432,5	80	472,5
30	433,5	81	473,5
31	434,5	82	474,5
32	435,5	83	475,5
33	436,5	84	476,5
34	437,5	85	477,5
35	438,5	86	478,5
36	439,5	87	480,0
37	440,0	88	481,0
38	441,0	89	482,5
39	442,0	90	484,5
40	443,0	91	486,0
41	443,5	92	488,5
42	444,5	93	491,0
43	445,5	94	494,5
44	446,0	95	498,5
45	447,0	96	505,0
46	448,0	97	517,5
47	448,5	98	542,0
48	449,5	99	577,5
49	450,0	100	599,5
50	451,0		

II.2.2. Análises do *Bright Stock*

Brigth Stock:

Densidade 20/4: **0,9034**
 Índice Refração: **1,4885**
 Ponto Fluidez: **-3**
 Viscosidade
 1a. Temp.:
 2a. Temp.:
 Peso Molecular
 COR: **L 4,5**
 Tensão Superficial:
 Nitrogênio **201,95 mg/Kg**
 °API **0,9034**

D1160	
%	
0	449,6
5	541,9
10	568,0
20	577,1
30	591,3
40	604,3
45	612,8

D 5236			Densidade Relativa	
	%Massa	%Volume	20/4 °C	°API
Carga	100,0	100,0	0,9039	24,4
PIE - 585°	48,0	48,7	0,8912	26,6
Res. 585°C	51,4	50,7	0,9157	22,4
Perdas	0,6	0,5		

HT-750			
0	437,0	51	572,0
1	451,0	52	573,5
2	464,5	53	575,0
3	472,0	54	577,0
4	477,5	55	579,0
5	482,5	56	581,0
6	486,5	57	582,5
7	490,0	58	584,5
8	493,5	59	586,0
9	496,5	60	587,5
10	499,5	61	589,0
11	502,0	62	590,5
12	504,0	63	592,5
13	506,5	64	594,0
14	508,5	65	596,0
15	511,0	66	598,0
16	513,0	67	600,0
17	515,0	68	602,0
18	517,0	69	604,0
19	519,0	70	606,0
20	521,0	71	608,5
21	523,0	72	610,5
22	525,0	73	612,5
23	526,5	74	614,5
24	528,5	75	617,0
25	530,0	76	619,5
26	532,0	77	621,5
27	533,5	78	624,0
28	535,0	79	627,0
29	537,0	80	629,5
30	538,5	81	632,0
31	540,0	82	634,5
32	541,5	83	637,0
33	543,0	84	640,0
34	544,5	85	643,0
35	546,5	86	646,5
36	548,0	87	649,5
37	549,5	88	653,0
38	551,0	89	656,5
39	553,0	90	660,5
40	554,5	91	665,0
41	556,0	92	669,5
42	557,5	93	674,5
43	559,5	94	680,0
44	561,0	95	686,0
45	562,5	96	692,0
46	564,0	97	698,5
47	565,5	98	706,0
48	567,0	99	715,0
49	568,5	100	723,0
50	570,5		

II.2.3. Análises da Mistura Processada NM/BS

COMPOSIÇÃO - Neutro Medio:42% X Bright Stock:58%

Densidade 20/4: **0,8925**

Ponto Fluidez: **-5**

Viscosidade

1a. Temp.: 40 °C **129,1**

2a. Temp.: 60 °C **50,15**

3a. Temp.: 100 °C **13,52**

Peso Molecular:

COR(ASTM): **3,5**

COR Saybolt **< -16**

Tensão Superficial:

Índice Refração: **1,4827**

D1160		
%		
0	198,9	367,1
5	241,1	461,3
10	248,7	472,8
15	261,2	485,5
20	267,0	492,4
25	271,3	495,4
30	275,8	502,8
35	280,5	510,6
40	285,2	513,9
45	293,3	521,3
50	304,8	536,8
55	317,3	553,6
60	337,7	572,5
65	352,7	591,7
70	364,8	605,3

D 5236			Densidade Relativa	
	%Massa	%Volume	20/4 °C	°API
Carga	100,0	100,0	0,8925	26,4
PIE - 20%	18,2	18,4	0,8781	28,9
20 - 40%	18,1	18,3	0,8826	28,1
40 - 60%	18,3	18,5	0,8841	27,9
60 - 76,7%	15,4	15,4	0,8933	26,2
Res. 571 °C	29,3	28,6	0,9169	22,2
Perdas	0,7	0,8		

HT-750 A			
0	333,5	51	500,5
1	358,0	52	504,0
2	378,5	53	507,5
3	389,5	54	511,0
4	397,0	55	514,5
5	403,0	56	518,0
6	407,5	57	521,5
7	411,5	58	524,5
8	414,5	59	528,0
9	417,5	60	531,0
10	420,5	61	534,0
11	423,0	62	537,0
12	425,0	63	539,5
13	427,5	64	542,5
14	429,5	65	545,5
15	431,0	66	548,5
16	433,0	67	551,5
17	435,0	68	554,5
18	437,0	69	557,5
19	438,5	70	560,5
20	440,5	71	563,5
21	442,0	72	566,5
22	444,0	73	569,5
23	445,5	74	572,5
24	447,0	75	575,5
25	448,5	76	579,0
26	450,0	77	582,5
27	451,5	78	586,0
28	453,0	79	588,5
29	454,5	80	591,5
30	456,0	81	595,0
31	457,0	82	598,5
32	458,5	83	602,0
33	460,0	84	605,5
34	461,5	85	609,5
35	463,0	86	613,5
36	464,5	87	617,0
37	466,0	88	621,5
38	467,5	89	626,0
39	469,5	90	630,5
40	471,0	91	634,5
41	473,0	92	639,5
42	474,5	93	645,0
43	476,5	94	651,5
44	479,0	95	657,5
45	481,5	96	665,5
46	484,0	97	674,5
47	487,0	98	685,5
48	490,5	99	699,0
49	494,0	100	708,0
50	497,5		

Apêndice III. Análises dos Produtos

III.1. Carga C10-C13

III.1.1. Separação de C10 com 98 % de pureza no topo

Código	Método	Ensaio	Unidade	FUNDO	TOPO
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	55,6	60,8
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,7518	0,7313
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s	2,037	1,236
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	1,450	0,9275
		a 060,0 °C	mm2/s	1,104	0,7271
		a 100,0 °C	mm2/s		
310.066.1		D86	% vol		
		PIE		192,7	164,9
		5		207,3	169,6
		10		207,6	169,8
		15		207,9	169,9
		20		208,1	170,3
		30		209,9	170,8
		40		210,5	170,9
		50		212,8	171,2
		60		215,0	171,4
		70		216,4	171,6
		80		219,6	171,9
		85		221,6	172,1
		90		223,8	172,4
		95		226,9	173,3
		PFE		240,2	199,1
		Recuperado (%vol)		98,0	98,3
		Resíduo (%vol)		1,4	0,6
		Perdas (%vol)		0,6	1,1
251.011.0		Teor de n-parafinas	%m/m		
		n-C5		0,00	0,00
		n-C6		0,00	0,01
		n-C7		0,00	0,05
		n-C8		0,00	0,20
		n-C9		0,01	3,29
		n-C10		2,41	93,59
		n-C11		25,16	2,83
		n-C12		35,56	0,03
		n-C13		36,30	0,00
		n-C14		0,47	0,00
		n-C15		0,06	0,00
		Total		100,00	100,00

III.1.2. Separação de C10 com 98 % de pureza no topo (replicata)

Código	Método	Ensaio	Unidade	FUNDO	TOPO
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	55,8	60,5
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,7512	0,7325
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s	1,958	1,329
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	1,380	0,9752
		a 060,0 °C	mm2/s	1,078	0,7668
		a 100,0 °C	mm2/s		
310.066.1		D86	% vol		
		PIE		201,8	168,4
		5		206,1	170,4
		10		206,2	170,6
		15		207,0	170,8
		20		207,9	171,0
		30		209,1	171,2
		40		210,8	171,5
		50		212,3	171,6
		60		214,3	171,9
		70		216,9	172,0
		80		220,0	172,4
		85		222,0	172,7
		90		223,9	173,2
		95		226,8	174,5
		PFE		244,4	192,9
		Recuperado (%vol)		98,0	98,5
		Resíduo (%vol)		0,8	0,8
		Perdas (%vol)		1,2	0,7
251.011.0		Teor de n-parafinas	%m/m		
		n-C5		0,00	0,00
		n-C6		0,00	0,01
		n-C7		0,00	0,03
		n-C8		0,03	0,15
		n-C9		0,01	2,52
		n-C10		2,47	92,90
		n-C11		27,08	4,34
		n-C12		35,15	0,05
		n-C13		34,79	0,00
		n-C14		0,42	0,00
		n-C15		0,03	0,00
		Total		100,00	100,00

III.1.3. Separação de C11 com 98 % de pureza no topo

Código	Método	Ensaio	Unidade	FUNDO	TOPO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	54,9	59,1
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,7547	0,7381
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s	2,171	1,458
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	1,543	1,080
		a 060,0 °C	mm2/s	1,162	0,8389
		a 100,0 °C	mm2/s		
310.066.1		D86	% vol		
		PIE		210,6	180,7
		5		215,3	182,5
		10		215,7	183,0
		15		216,0	183,3
		20		216,1	183,7
		30		217,0	184,4
		40		217,6	185,2
		50		218,8	185,9
		60		219,7	186,9
		70		221,3	187,9
		80		222,7	189,2
		85		223,9	189,9
		90		225,2	190,8
		95		227,4	191,7
		PFE		247,8	205,1
		Recuperado (%vol)		99,0	98,6
		Resíduo (%vol)		0,8	1,2
		Perdas (%vol)		0,2	0,2
251.011.0		Teor de n-parafinas	%m/m		
		n-C5		0,00	0,00
		n-C6		0,00	0,00
		n-C7		0,00	0,02
		n-C8		0,00	0,08
		n-C9		0,00	0,83
		n-C10		0,19	30,73
		n-C11		8,57	68,06
		n-C12		45,04	0,28
		n-C13		45,56	0,00
		n-C14		0,59	0,00
		n-C15		0,06	0,00
		Total		100,00	100,00

III.1.4. Separação de C11 com 98 % de pureza no topo (replicata)

Código	Método	Ensaio	Unidade	FUNDO	TOPO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	55,1	58,7
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,7542	0,7397
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s	2,173	
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	1,553	1,0710
		a 060,0 °C	mm2/s	1,173	0,8334
		a 100,0 °C	mm2/s		0,5764
310.066.1		D86	% vol		
		PIE		208,8	178,4
		5		214,8	181,0
		10		215,5	181,5
		15		215,6	181,8
		20		215,8	182,3
		30		217,1	182,9
		40		218,0	183,7
		50		219,0	184,6
		60		220,3	185,5
		70		221,4	186,9
		80		223,5	188,6
		85		224,6	189,7
		90		225,9	191,1
		95		228,2	193,0
		PFE		245,7	212,3
		Recuperado (%vol)		97,7	98,7
		Resíduo (%vol)		1,3	0,5
		Perdas (%vol)		1,0	0,8
251.011.0		Teor de n-parafinas	%m/m		
		n-C5		0,00	0,00
		n-C6		0,00	0,00
		n-C7		0,01	0,02
		n-C8		0,00	0,06
		n-C9		0,00	0,84
		n-C10		0,57	38,15
		n-C11		9,12	58,30
		n-C12		42,60	2,61
		n-C13		47,07	0,02
		n-C14		0,59	0,00
		n-C15		0,03	0,00
		Total		100,00	100,00

III.2. Carga NM/BS

III.2.1. Análises de Destilação Simulada obtidas por Simulação para os Produtos de Topo e de Fundo da Carga NM/BS

Corrida 1	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,4	483,1	349,0	451,8	7,0	6,9
	5	342,4	494,2	388,5	482,5	11,9	2,4
	10	374,4	512,2	405,5	499,5	7,7	2,5
	30	412,0	558,7	433,5	538,8	4,9	3,7
	50	436,1	604,0	450,8	570,8	3,3	5,8
	70	455,9	665,9	465,0	606,5	2,0	9,8
	90	470,6	706,9	484,3	661,0	2,8	6,9
	95	478,0	721,8	497,8	686,3	4,0	5,2
	98	492,1	721,8	539,3	706,3	8,7	2,2
						11,9	9,8

Corrida 2	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,4	482,0	349,0	451,8	7,1	6,7
	5	342,2	493,3	388,5	482,5	11,9	2,2
	10	374,2	511,2	405,5	499,5	7,7	2,3
	30	411,9	557,9	433,5	538,8	5,0	3,5
	50	435,8	603,1	450,8	570,8	3,3	5,7
	70	455,6	665,4	465,0	606,5	2,0	9,7
	90	470,1	706,4	484,3	661,0	2,9	6,9
	95	477,3	721,5	497,8	686,3	4,1	5,1
	98	490,9	721,5	539,3	706,3	9,0	2,2
						11,9	9,7

Corrida 3	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,2	480,6	349,0	451,8	7,1	6,4
	5	341,7	491,1	388,5	482,5	12,0	1,8
	10	373,6	508,8	405,5	499,5	7,9	1,9
	30	411,5	555,9	433,5	538,8	5,1	3,2
	50	435,1	600,8	450,8	570,8	3,5	5,3
	70	455,0	664,1	465,0	606,5	2,1	9,5
	90	469,1	705,1	484,3	661,0	3,1	6,7
	95	475,6	721,0	497,8	686,3	4,5	5,1
	98	489,6	721,0	539,3	706,3	9,2	2,1
						12,0	9,5

Corrida 4	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,4	482,7	349,0	451,8	7,0	6,8
	5	342,4	494,1	388,5	482,5	11,9	2,4
	10	374,4	512,1	405,5	499,5	7,7	2,5
	30	412,0	558,7	433,5	538,8	4,9	3,7
	50	436,1	604,0	450,8	570,8	3,3	5,8
	70	455,9	665,9	465,0	606,5	2,0	9,8
	90	470,6	706,9	484,3	661,0	2,8	6,9
	95	478,1	721,8	497,8	686,3	4,0	5,2
	98	492,7	721,8	539,3	706,3	8,6	2,2
						11,9	9,8

Corrida 5	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,3	481,4	349,0	451,8	7,1	6,6
	5	342,1	492,8	388,5	482,5	12,0	2,1
	10	374,0	510,7	405,5	499,5	7,8	2,2
	30	411,8	557,4	433,5	538,8	5,0	3,5
	50	435,7	602,5	450,8	570,8	3,3	5,6
	70	455,5	665,1	465,0	606,5	2,0	9,7
	90	469,8	706,1	484,3	661,0	3,0	6,8
	95	476,9	721,4	497,8	686,3	4,2	5,1
	98	490,8	721,4	539,3	706,3	9,0	2,1
						12,0	9,7

Corrida 6	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,5	483,3	349,0	451,8	7,0	7,0
	5	342,4	494,6	388,5	482,5	11,9	2,5
	10	374,5	512,5	405,5	499,5	7,7	2,6
	30	412,1	558,9	433,5	538,8	4,9	3,7
	50	436,2	604,3	450,8	570,8	3,2	5,9
	70	455,9	666,0	465,0	606,5	1,9	9,8
	90	470,7	707,0	484,3	661,0	2,8	7,0
	95	478,4	721,9	497,8	686,3	3,9	5,2
	98	492,0	721,9	539,3	706,3	8,8	2,2
						11,9	9,8

Corrida 7	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,5	483,0	349,0	451,8	7,0	6,9
	5	342,4	494,6	388,5	482,5	11,9	2,5
	10	374,5	512,5	405,5	499,5	7,7	2,6
	30	412,1	559,0	433,5	538,8	4,9	3,8
	50	436,2	604,4	450,8	570,8	3,2	5,9
	70	456,0	666,0	465,0	606,5	1,9	9,8
	90	470,7	707,0	484,3	661,0	2,8	7,0
	95	478,5	721,9	497,8	686,3	3,9	5,2
	98	492,3	721,9	539,3	706,3	8,7	2,2
						11,9	9,8

Corrida 8	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,4	481,7	349,0	451,8	7,1	6,6
	5	342,2	493,2	388,5	482,5	11,9	2,2
	10	374,1	511,1	405,5	499,5	7,7	2,3
	30	411,9	557,7	433,5	538,8	5,0	3,5
	50	435,8	602,9	450,8	570,8	3,3	5,6
	70	455,6	665,3	465,0	606,5	2,0	9,7
	90	470,0	706,3	484,3	661,0	2,9	6,9
	95	477,2	721,5	497,8	686,3	4,1	5,1
	98	490,5	721,5	539,3	706,3	9,0	2,2
						11,9	9,7

Corrida 9	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,2	480,8	349,0	451,8	7,1	6,4
	5	341,8	491,6	388,5	482,5	12,0	1,9
	10	373,7	509,3	405,5	499,5	7,8	2,0
	30	411,6	556,3	433,5	538,8	5,1	3,3
	50	435,3	601,2	450,8	570,8	3,4	5,3
	70	455,2	664,4	465,0	606,5	2,1	9,5
	90	469,2	705,4	484,3	661,0	3,1	6,7
	95	475,9	721,1	497,8	686,3	4,4	5,1
	98	489,4	721,1	539,3	706,3	9,2	2,1
						12,0	9,5

Corrida 10	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,5	481,4	349,0	451,8	7,0	6,6
	5	342,5	494,9	388,5	482,5	11,8	2,6
	10	374,6	512,8	405,5	499,5	7,6	2,7
	30	412,2	559,2	433,5	538,8	4,9	3,8
	50	436,3	604,7	450,8	570,8	3,2	5,9
	70	456,0	666,2	465,0	606,5	1,9	9,8
	90	471,0	707,2	484,3	661,0	2,7	7,0
	95	479,1	722,0	497,8	686,3	3,7	5,2
	98	493,3	722,0	539,3	706,3	8,5	2,2
						11,8	9,8

Corrida 11	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,4	481,5	349,0	451,8	7,1	6,6
	5	342,2	493,6	388,5	482,5	11,9	2,3
	10	374,2	511,4	405,5	499,5	7,7	2,4
	30	411,9	558,0	433,5	538,8	5,0	3,6
	50	435,9	603,2	450,8	570,8	3,3	5,7
	70	455,7	665,4	465,0	606,5	2,0	9,7
	90	470,2	706,4	484,3	661,0	2,9	6,9
	95	477,5	721,6	497,8	686,3	4,1	5,1
	98	490,8	721,6	539,3	706,3	9,0	2,2
						11,9	9,7

Corrida 12	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	323,4	470,8	349,0	451,8	7,3	4,2
	5	339,6	482,2	388,5	482,5	12,6	0,1
	10	370,9	498,6	405,5	499,5	8,5	0,2
	30	409,7	546,9	433,5	538,8	5,5	1,5
	50	432,0	591,0	450,8	570,8	4,2	3,5
	70	451,8	657,6	465,0	606,5	2,8	8,4
	90	465,3	700,1	484,3	661,0	3,9	5,9
	95	469,8	718,8	497,8	686,3	5,6	4,7
	98	481,7	718,8	539,3	706,3	10,7	1,8
						12,6	8,4

Corrida 13	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	328,4	535,2	349,0	451,8	5,9	18,5
	5	350,8	545,9	388,5	482,5	9,7	13,1
	10	385,4	560,6	405,5	499,5	5,0	12,2
	30	420,1	598,9	433,5	538,8	3,1	11,2
	50	447,9	652,4	450,8	570,8	0,6	14,3
	70	467,1	689,1	465,0	606,5	0,4	13,6
	90	502,9	729,8	484,3	661,0	3,8	10,4
	95	524,3	733,8	497,8	686,3	5,3	6,9
	98	542,2	733,8	539,3	706,3	0,5	3,9
						9,7	18,5

Corrida 14	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	327,3	521,1	349,0	451,8	6,2	15,4
	5	348,5	531,5	388,5	482,5	10,3	10,2
	10	382,7	548,2	405,5	499,5	5,6	9,7
	30	417,9	587,4	433,5	538,8	3,6	9,0
	50	445,0	639,6	450,8	570,8	1,3	12,1
	70	463,6	683,5	465,0	606,5	0,3	12,7
	90	492,8	724,2	484,3	661,0	1,8	9,6
	95	511,3	731,0	497,8	686,3	2,7	6,5
	98	528,1	731,0	539,3	706,3	2,1	3,5
						10,3	15,4

Corrida 15	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,3	480,5	349,0	451,8	7,1	6,4
	5	342,0	492,3	388,5	482,5	12,0	2,0
	10	373,9	510,1	405,5	499,5	7,8	2,1
	30	411,7	556,9	433,5	538,8	5,0	3,4
	50	435,5	602,0	450,8	570,8	3,4	5,5
	70	455,4	664,8	465,0	606,5	2,1	9,6
	90	469,6	705,8	484,3	661,0	3,0	6,8
	95	476,7	721,3	497,8	686,3	4,2	5,1
	98	490,5	721,3	539,3	706,3	9,0	2,1
						12,0	9,6

Corrida 16	% massa	Topo	Fundo	NM	BS	Desv NM	Desv BS
	1	324,5	483,5	349,0	451,8	7,0	7,0
	5	342,5	495,0	388,5	482,5	11,8	2,6
	10	374,6	512,9	405,5	499,5	7,6	2,7
	30	412,2	559,3	433,5	538,8	4,9	3,8
	50	436,3	604,8	450,8	570,8	3,2	6,0
	70	456,1	666,3	465,0	606,5	1,9	9,9
	90	470,9	707,2	484,3	661,0	2,8	7,0
	95	478,8	722,0	497,8	686,3	3,8	5,2
	98	492,8	722,0	539,3	706,3	8,6	2,2
						11,8	9,9

III.2.2. Análises dos Experimentos utilizando a carga NM/BS

III.2.2.1. Corrida 1

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,8	26,2
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8576	0,8936
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	7,229	171,5
		a 060,0 °C	mm2/s	4,368	63,28
		a 100,0 °C	mm2/s	2,137	15,96
	Destilação	Simulada - % m/m			
	IBP			114,0	390,6
	1			124,6	399,8
	5			144,8	419,6
	10			200,0	432,6
	15			235,4	442,0
	20			265,2	450,2
	25			290,8	457,6
	30			309,0	465,2
	35			322,4	473,0
	40			333,2	482,8
	45			343,0	497,6
	50			350,0	515,6
	55			356,4	532,4
	60			361,6	547,8
	65			366,4	563,0
	70			370,6	578,4
	75			374,8	594,8
	80			378,4	613,6
	85			382,4	636,0
	90			386,6	667,0
	95			391,0	733,0
	99			396,6	
	99,5			398,6	

III.2.2.2. Corrida 2

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	33,2	25,9
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8554	0,8954
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	6,629	189,5
		a 060,0 °C	mm2/s	4,072	68,86
		a 100,0 °C	mm2/s	2,034	17,03
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			130,8	404,3
	1			156,7	408,9
	5			211,0	425,3
	10			246,4	437,1
	15			271,2	446,3
	20			293,4	454,4
	25			309,6	461,8
	30			322,9	469,2
	35			333,9	477,3
	40			344,0	487,8
	45			351,5	502,4
	50			358,2	518,3
	55			364,1	533,1
	60			369,4	546,9
	65			374,1	560,5
	70			378,4	573,9
	75			382,6	588,1
	80			386,4	603,6
	85			390,0	620,5
	90			393,6	641,6
	95			397,5	671,2
	99			402,7	711,4
	99,5			404,8	720,1

III.2.2.3. Corrida 3

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,1	26,1
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8610	0,8939
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	9,900	174,3
		a 060,0 °C	mm2/s	5,689	64,19
		a 100,0 °C	mm2/s	2,608	16,14
	Destilação	Simulada - % m/m			
	IBP			166,2	401,8
	1			188,0	407,6
	5			243,8	422,8
	10			285,4	434,4
	15			313,2	442,8
	20			331,8	450,8
	25			346,4	457,6
	30			357,2	464,8
	35			365,0	472,0
	40			370,8	481,2
	45			376,2	494,0
	50			380,6	510,6
	55			384,6	527,2
	60			388,2	542,4
	65			391,4	557,4
	70			394,2	572,2
	75			397,0	588,4
	80			399,6	605,8
	85			402,0	626,6
	90			405,0	653,4
	95			408,2	701,4
	96			408,8	717,4
	97			409,8	750,0
	98			410,6	
	99			412,4	
	99,5			413,8	

III.2.2.4. Corrida 4

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,2	25,9
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8604	0,8949
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	8,554	179,3
		a 060,0 °C	mm2/s	5,027	65,63
		a 100,0 °C	mm2/s	2,374	16,42
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			160,8	401,6
	1			181,6	407,4
	5			239,0	423,6
	10			278,2	435,0
	15			305,2	443,8
	20			324,6	451,6
	25			339,8	458,6
	30			351,4	465,6
	35			360,6	472,8
	40			368,2	481,8
	45			374,6	494,6
	50			380,0	511,0
	55			384,6	527,0
	60			388,8	542,0
	65			392,4	556,4
	70			395,6	570,2
	75			398,6	584,6
	80			401,4	600,6
	85			403,8	618,6
	90			406,2	639,2
	95			408,8	668,6
	99			411,8	715,2
	99,5			412,8	724,2

III.2.2.5. Corrida 5

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,3	26,0
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8599	0,8944
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	7,495	178,7
		a 060,0 °C	mm2/s	4,490	65,37
		a 100,0 °C	mm2/s	2,174	16,33
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			152,6	399,4
	1			173,8	404,6
	5			234,6	422,2
	10			267,8	434,4
	15			291,2	443,4
	20			308,0	451,4
	25			320,6	458,6
	30			331,4	465,8
	35			340,2	473,4
	40			347,6	483,2
	45			354,2	497,6
	50			359,4	515,2
	55			364,6	531,4
	60			369,0	546,6
	65			373,0	561,2
	70			376,6	576,0
	75			380,2	591,8
	80			383,6	609,4
	85			387,2	630,2
	90			390,8	657,4
	95			396,0	705,6
	98			435,8	

III.2.2.6. Corrida 6

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,6	26,1
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8586	0,8940
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	7,480	174,2
		a 060,0 °C	mm2/s	4,491	64,06
		a 100,0 °C	mm2/s	2,180	16,12
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			149,8	398,8
	1			171,4	403,9
	5			230,0	420,9
	10			266,8	433,1
	15			293,2	442,2
	20			311,8	450,2
	25			326,6	457,4
	30			338,6	464,6
	35			348,2	471,9
	40			356,0	480,7
	45			362,6	493,2
	50			368,4	509,6
	55			373,4	526,1
	60			378,2	541,2
	65			382,2	555,8
	70			385,8	569,9
	75			389,2	584,7
	80			392,2	600,8
	85			395,0	618,2
	90			398,0	639,6
	95			401,0	669,9
	99			404,6	711,0
	99,5			405,8	719,8

III.2.2.7. Corrida 7

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,2	26,0
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8607	0,8945
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	9,174	179,1
		a 060,0 °C	mm2/s	5,328	65,62
		a 100,0 °C	mm2/s	2,478	16,41
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			155,6	401,8
	1			184,8	407,0
	5			253,4	423,4
	10			291,4	435,1
	15			316,4	443,9
	20			334,2	451,8
	25			347,4	458,9
	30			357,2	466,1
	35			364,6	473,4
	40			370,8	482,5
	45			376,0	495,4
	50			380,6	511,9
	55			384,6	528,1
	60			388,2	542,9
	65			391,6	557,3
	70			394,6	571,3
	75			397,4	585,9
	80			399,8	601,9
	85			402,4	619,2
	90			404,8	640,6
	95			407,4	670,7
	99			410,4	711,6
	99,5			411,2	720,4

III.2.2.8. Corrida 8

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,7	26,1
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8579	0,8942
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	7,602	174,9
		a 060,0 °C	mm2/s	4,571	64,31
		a 100,0 °C	mm2/s	2,215	16,16
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			156,6	395,0
	1			175,6	403,2
	5			234,2	421,2
	10			269,2	433,5
	15			293,2	442,6
	20			310,6	450,6
	25			324,8	457,8
	30			337,4	465,0
	35			348,0	472,4
	40			356,8	481,3
	45			364,2	494,0
	50			370,6	510,6
	55			376,0	526,9
	60			380,6	542,0
	65			384,8	556,6
	70			388,4	570,7
	75			391,8	585,4
	80			394,8	601,6
	85			397,6	619,0
	90			400,4	640,6
	95			403,4	671,0
	99			407,0	713,1
	99,5			408,0	722,3

III.2.2.9. Corrida 9

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,1	26,0
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8613	0,8946
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	9,038	180,5
		a 060,0 °C	mm2/s	5,263	66,00
		a 100,0 °C	mm2/s	2,455	16,48
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			167,4	403,4
	1			192,6	407,8
	5			250,4	423,8
	10			285,0	435,6
	15			307,8	444,2
	20			324,2	452,0
	25			337,2	459,2
	30			346,8	466,4
	35			355,0	474,0
	40			361,2	483,8
	45			366,8	498,2
	50			371,6	515,4
	55			376,0	531,4
	60			379,6	546,4
	65			383,2	560,8
	70			386,6	575,6
	75			389,6	591,0
	80			392,4	608,2
	85			395,2	628,4
	90			398,2	654,0
	95			401,2	697,2
	98			404,0	735,0
	99			405,6	
	99,5			406,8	

III.2.2.10. Corrida 10

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,0	26,1
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8617	0,8941
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	9,022	180,2
		a 060,0 °C	mm2/s	5,248	65,96
		a 100,0 °C	mm2/s	2,448	16,48
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			158,0	401,2
	1			180,6	406,4
	5			250,0	422,8
	10			289,4	434,8
	15			314,4	443,8
	20			332,2	452,0
	25			345,4	459,2
	30			354,8	466,6
	35			362,6	474,0
	40			369,0	483,6
	45			374,2	497,6
	50			378,8	514,6
	55			383,0	530,6
	60			386,6	545,4
	65			389,8	559,4
	70			392,8	573,8
	75			395,8	588,6
	80			398,4	605,2
	85			401,2	624,2
	90			403,8	647,6
	95			406,6	686,2
	98			408,8	750,0
	99			410,0	
	99,5			411,0	

III.2.2.11. Corrida 11

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,5	26,1
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8589	0,8941
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	7,655	175,1
		a 060,0 °C	mm2/s	4,589	64,37
		a 100,0 °C	mm2/s	2,221	16,19
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			122,6	403,6
	1			127,8	408,4
	5			215,4	423,6
	10			259,0	435,0
	15			289,2	443,6
	20			310,8	451,6
	25			326,0	458,6
	30			337,8	466,0
	35			347,2	473,6
	40			355,4	483,2
	45			362,2	497,0
	50			368,0	513,6
	55			373,2	529,6
	60			378,0	544,4
	65			382,4	559,0
	70			386,6	573,4
	75			390,2	589,0
	80			393,8	606,0
	85			397,0	626,2
	90			400,4	651,6
	95			403,8	694,0
	98			406,8	735,0
	99			408,4	
	99,5			409,8	

III.2.2.12. Corrida 12

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,3	26,0
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8603	0,8944
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	8,444	180,3
		a 060,0 °C	mm2/s	4,982	66,02
		a 100,0 °C	mm2/s	2,363	16,49
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			124,8	405,4
	1			129,4	410,0
	5			224,0	425,2
	10			268,4	436,2
	15			300,0	445,0
	20			320,4	453,0
	25			335,6	460,0
	30			346,6	467,2
	35			355,6	475,0
	40			362,8	485,2
	45			368,6	499,8
	50			374,0	516,2
	55			378,6	531,8
	60			383,0	546,2
	65			387,0	560,4
	70			390,6	574,6
	75			394,2	589,8
	80			397,2	606,6
	85			400,0	626,6
	90			402,8	651,6
	95			406,0	693,2
	98			408,6	735,0
	99			410,0	
	99,5			411,2	

III.2.2.13. Corrida 13

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	32,1	25,9
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8609	0,8953
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	8,255	183,9
		a 060,0 °C	mm2/s	4,885	67,20
		a 100,0 °C	mm2/s	2,325	16,71
	Destilação Simulada - % m/m				
		IBP		131,8	402,8
		1		138,0	408,6
		5		216,4	424,8
		10		262,2	436,2
		15		295,2	445,0
		20		317,8	452,8
		25		334,6	460,0
		30		346,6	467,2
		35		355,8	475,0
		40		362,6	485,0
		45		368,2	499,2
		50		373,0	515,6
		55		377,4	530,8
		60		381,2	545,0
		65		384,6	558,8
		70		388,0	572,6
		75		391,2	587,4
		80		394,2	603,4
		85		397,2	622,4
		90		400,2	645,8
		95		403,8	683,0
		99		408,2	742,4
		99,5		409,6	

III.2.2.14. Corrida 14

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	33,5	25,8
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8537	0,8955
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	5,887	197,8
		a 060,0 °C	mm2/s	3,681	69,09
		a 100,0 °C	mm2/s	1,878	17,58
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			143,0	401,4
	1			162,6	408,0
	5			203,8	425,8
	10			229,2	437,4
	15			249,6	446,6
	20			270,0	454,6
	25			289,0	462,2
	30			305,6	470,0
	35			318,8	478,8
	40			331,2	491,2
	45			342,4	507,8
	50			351,2	525,0
	55			358,8	541,0
	60			366,0	556,6
	65			372,2	572,0
	70			377,6	589,0
	75			382,6	607,6
	80			387,0	630,0
	85			390,8	660,2
	90			394,6	724,4
	95			399,0	
	99			405,8	
	99,5			410,6	

III.2.2.15. Corrida 15

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	34,7	26,0
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8476	0,8945
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	4,280	170,7
		a 060,0 °C	mm2/s	2,809	62,93
		a 100,0 °C	mm2/s	1,524	15,89
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			154,8	398,4
	1			165,8	403,0
	5			196,6	420,4
	10			216,8	433,2
	15			234,0	442,6
	20			246,6	450,8
	25			262,0	458,2
	30			276,2	465,6
	35			289,6	473,4
	40			302,2	483,6
	45			312,6	498,4
	50			322,0	516,2
	55			331,0	532,6
	60			339,0	548,2
	65			346,0	563,2
	70			352,8	578,6
	75			358,6	595,2
	80			364,4	614,2
	85			369,6	637,0
	90			375,2	668,8
	95			382,0	735,0
	99			394,0	
	99,5			399,4	

III.2.2.16. Corrida 16

Código	Método	Ensaio	Unidade	TOPO	FUNDO
312.038.1		Amostragem		sim	sim
312.078.1	ISO 12185	Densidade (°API)	-	34,1	26,2
		Densidade Relativa (a 20/4 °C)	-	0,8509	0,8937
320.014.1		Viscosidade			
	D 445	a 010,0 °C	mm2/s		
		a 020,0 °C	mm2/s		
		a 030,0 °C	mm2/s		
		a 040,0 °C	mm2/s	4,921	174,7
		a 060,0 °C	mm2/s	3,164	64,15
		a 100,0 °C	mm2/s	1,673	16,11
	Destilação Simulada - % m/m				
	IBP			140,8	401,2
	1			152,6	406,0
	5			196,2	422,6
	10			217,0	434,4
	15			235,6	443,0
	20			253,8	451,0
	25			270,6	458,0
	30			287,4	465,2
	35			302,0	472,6
	40			314,6	482,0
	45			326,0	495,6
	50			336,2	512,6
	55			345,4	528,8
	60			354,0	543,8
	65			361,4	558,4
	70			368,2	572,8
	75			374,4	588,4
	80			380,2	605,2
	85			385,6	625,2
	90			390,4	650,2
	95			395,2	691,0
	98			399,0	735,0
	99			401,0	
	99,5			403,0	

Apêndice IV. Modelos em Plataforma MatLab®

IV.1. Método Aproximado para Destilação Multicomponente

ShortcutC10.m

```
global xD10 xD11 P Tt Tf Tbolha xB10 xB11 xB12 xB13 alfa10 xF10 alfa11 xF11
alfa12 xF12 alfa13 xF13 fic q
disp('Calculo N e RR na separação de C10 e C11 no topo - Metodo Shortcut')
disp('Calculo das vazoes de produto de topo e fundo e suas composições:')
disp('Inputs:')
w10=input('Fração massica do C10 na carga =');
w11=input('Fração massica do C11 na carga =');
w12=input('Fração massica do C12 na carga =');
w13=input('Fração massica do C13 na carga =');
Fw=input('Vazao massica da carga (kg/h) =');
Fw=Fw*1000;
xF10=(w10/142)/(w10/142+w11/156+w12/170+w13/184);
xF11=(w11/156)/(w10/142+w11/156+w12/170+w13/184);
xF12=(w12/170)/(w10/142+w11/156+w12/170+w13/184);
xF13=1-xF10-xF11-xF12;
MMF=1/(w10/142+w11/156+w12/170+w13/184);
F=Fw/MMF;
xD10=input('Fração molar de C10 no topo =');
xB10=input('Fração molar de C10 no fundo =');
xD11=1-xD10;
wD10=(xD10*142)/(xD10*142+xD11*156);
wD11=1-wD10;
disp('Outputs:')
D=F*(xF10-xB10)/(xD10-xB10);
B=F-D;
D10=D*xD10;
D11=D*(1-xD10);
Dw=D10*142+D11*156;
Dw=Dw/1000;
```

```

disp(['Vazao Produto de topo (kg/h) =' num2str(Dw)])
disp(['Fração molar de C10 no topo =' num2str(xD10)])
disp(['Fração molar de C11 no topo =' num2str(xD11)])
disp(['Fração massica de C10 no topo =' num2str(wD10)])
disp(['Fração massica de C11 no topo =' num2str(wD11)])
Bw=(Fw/1000)-Dw;
disp(['Vazao Produto de fundo (kg/h) =' num2str(Bw)])
xB12=(F*xF12)/B;
xB13=(F*xF13)/B;
xB11=1-xB10-xB12-xB13;
wB10=(xB10*142)/(xB10*142+xB11*156+xB12*170+xB13*184);
wB11=(xB11*156)/(xB10*142+xB11*156+xB12*170+xB13*184);
wB12=(xB12*170)/(xB10*142+xB11*156+xB12*170+xB13*184);
wB13=1-wB10-wB11-wB12;
disp(['Fração molar de C10 no fundo =' num2str(xB10)])
disp(['Fração molar de C11 no fundo =' num2str(xB11)])
disp(['Fração molar de C12 no fundo =' num2str(xB12)])
disp(['Fração molar de C13 no fundo =' num2str(xB13)])
disp(['Fração massica de C10 no fundo =' num2str(wB10)])
disp(['Fração massica de C11 no fundo =' num2str(wB11)])
disp(['Fração massica de C12 no fundo =' num2str(wB12)])
disp(['Fração massica de C13 no fundo =' num2str(wB13)])
disp('Calculo da temperatura de topo:')
disp('Inputs:')
P=input('Pressao de operacao (bar) =');
Tt=input('chute para Temperatura de Topo (°C) =');
Tt=Tt+273.15;
temptopoC10;
Ttopo=Temptopo-273.15;
disp('Outputs:')
disp(['Temperatura de topo (°C) =' num2str(Ttopo)])
disp('Calculo da temperatura de fundo:')
disp('Inputs:')
Tf=input('chute para Temperatura de Fundo (°C) =');

```

```

Tf=Tf+273.15;
tempfundoC10;
Tfundo=Tempfundo-273.15;
disp('Outputs:')
disp(['Temperatura de fundo (°C) =' num2str(Tfundo)])
disp('Calculo das volatilidades relativas:')
disp('Outputs:')
kD10=(exp(10.05787-3929.302/(Temptopo-56.5722)))/P;
kD11=(exp(11.27985-4983.342/(Temptopo-27.1458)))/P;
kD12=(exp(9.813810-4019.224/(Temptopo-79.7941)))/P;
kD13=(exp(12.65094-6486.206/(Temptopo+5.533018)))/P;
alfaD10=kD10/kD11;
alfaD11=1;
alfaD12=kD12/kD11;
alfaD13=kD13/kD11;
kB10=(exp(10.05787-3929.302/(Tempfundo-56.5722)))/P;
kB11=(exp(11.27985-4983.342/(Tempfundo-27.1458)))/P;
kB12=(exp(9.813810-4019.224/(Tempfundo-79.7941)))/P;
kB13=(exp(12.65094-6486.206/(Tempfundo+5.533018)))/P;
alfaB10=kB10/kB11;
alfaB11=1;
alfaB12=kB12/kB11;
alfaB13=kB13/kB11;
alfa10=(alfaD10*alfaB10)^0.5;
alfa11=1;
alfa12=(alfaD12*alfaB12)^0.5;
alfa13=(alfaD13*alfaB13)^0.5;
disp(['Volatilidade relativa C10 =' num2str(alfa10)])
disp(['Volatilidade relativa C11 =' num2str(alfa11)])
disp(['Volatilidade relativa C12 =' num2str(alfa12)])
disp(['Volatilidade relativa C13 =' num2str(alfa13)])
disp('Calculo da temperatura de bolha na composicao da carga:')
disp('Inputs:')
Tbolha=input('chute na temperatura de bolha na composicao da carga (°C) =');

```

```

Tbolha=Tbolha+273.15;
tempbolha;
Tb=Tempbolha-273.15;
disp('Outputs:')
disp(['Temperatura de bolha calculada (°C) =' num2str(Tb)])
disp('Calculo de q:')
disp('Inputs:')
Cp10=0.5*4.186*1000*142;
Cp11=0.501*4.186*1000*156;
Cp12=0.498*4.186*1000*170;
Cp13=0.499*4.186*1000*184;
Cp=xF10*Cp10+xF11*Cp11+xF12*Cp12+xF13*Cp13;
disp(['Cp (valido entre 0-50 °C) (J/kmol C) =' num2str(Cp)]);
Tf=input('Temperatura da carga (°C) =');
Tf=Tf+273.15;
lambda10=8.314*1000*Tf^2*(3929.302/(Tf-56.5722)^2);
lambda11=8.314*1000*Tf^2*(4983.342/(Tf-27.1458)^2);
lambda12=8.314*1000*Tf^2*(4019.224/(Tf-79.7941)^2);
lambda13=8.314*1000*Tf^2*(6486.206/(Tf+5.533018)^2);
lambda=xF10*lambda10+xF11*lambda11+xF12*lambda12+xF13*lambda13;
disp(['Calor latente de vaporizacao (J/Kmol) =' num2str(lambda)]);
q=1+Cp*(Tempbolha-Tf)/lambda;
disp('Outputs:')
disp(['q =' num2str(q)])
disp('Calculo da raiz:')
disp('Inputs:')
fic=input('chute na raiz =');
FI;
fi=fi;
disp('Outputs:')
disp(['fi =' num2str(fi)])
disp('Calculo de RR:')
disp('Inputs:')
r=input('fator de aumento da razao de refluxo em relação a minima =');

```

```

disp('Outputs:')
RRmin=alfa10*xD10/(alfa10-fi)+alfa11*xD11/(alfa11-fi)-1;
disp(['RRmin =' num2str(RRmin)])
RR=r*RRmin;
disp(['RR =' num2str(RR)])
disp('Calculo de N:')
disp('Outputs:')
Nmin=log((xD10/xB10)/(xD11/xB11))/(log (alfa10));
disp(['Nmin =' num2str(Nmin)])
X=(RR-RRmin)/(RR+1);
Y=1-exp((((1+54.4*X)/(11+117.2*X))*((X-1)/(X^.5))));
N=(Nmin+Y)/(1-Y);
disp(['N =' num2str(N)])

```

temptopoC10.m

```

global xD10 xD11 P Tt
tolerancia=(0.0001^2);
T=Tt;
for n=1:1000;
    f=(xD10/(exp(10.05787-3929.302/(T-56.5722))))+(xD11/(exp(11.27985-
4983.342/(T-27.1458))))-(1/P);
    df=(-xD10*(3929.302/(T-56.5722)^2)*(exp(10.05787-3929.302/(T-
56.5722)))/(exp(10.05787-3929.302/(T-56.5722)))^2)+(-xD11*(4983.342/(T-
27.1458)^2)*(exp(11.27985-4983.342/(T-27.1458)))/(exp(11.27985-4983.342/(T-
27.1458)))^2);
    delta=f/df;
    if (delta^2)<=tolerancia
        Temptopo=T;
        break;
    else
        T=T-delta;
        n=n+1;
    end
end
end

```

tempfundoC10.m

```
global Tf xB10 xB11 xB12 xB13 P
tolerancia=(0.0001^2);
T=Tf;
for n=1:1000
f=xB10*(exp(10.05787-3929.302/(T-56.5722)))+xB11*(exp(11.27985-4983.342/(T-
27.1458)))+xB12*(exp(9.813810-4019.224/(T-79.7941)))+xB13*(exp(12.65094-
6486.206/(T+5.533018)))-P;
df=xB10*(3929.302/(T-56.5722)^2)*(exp(10.05787-3929.302/(T-
56.5722)))+xB11*(4983.342/(T-27.1458)^2)*(exp(11.27985-4983.342/(T-
27.1458)))+xB12*(4019.224/(T-79.7941)^2)*(exp(9.813810-4019.224/(T-
79.7941)))+xB13*(6486.206/(T+5.533018)^2)*(exp(12.65094-
6486.206/(T+5.533018)));
delta=f/df;
if (delta^2)<=tolerancia
    Tempfundo=T;
    break;
else
    T=T-delta;
    n=n+1;
end
end
```

FI.m

```
global alfa10 xF10 alfa11 xF11 alfa12 xF12 alfa13 xF13 fic q
tolerancia=(0.0001^2);
fi=fic;
for n=1:1000;
f=alfa10*xF10/(alfa10-fi)+alfa11*xF11/(alfa11-fi)+alfa12*xF12/(alfa12-
fi)+alfa13*xF13/(alfa13-fi)+q-1;
df=alfa10*xF10/(alfa10-fi)^2+alfa11*xF11/(alfa11-fi)^2+alfa12*xF12/(alfa12-
fi)^2+alfa13*xF13/(alfa13-fi)^2;
delta=f/df;
if (delta^2)<=tolerancia
```



```
    fi=fi;  
    break;  
else  
    fi=fi-delta;  
    n=n+1;  
end  
end
```

IV.2. Modelos de Transferência de Massa Teóricos

IV.2.1. Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985)

hetp.m

```
disp('Calculo HETP - Modelo Bravo et. al. (1985)')
disp('Inputs:')
gama=GAMA_m_mod;
ugs=UGS;
fg=FG;
uls=ULS;
ae=AE;
kl=KL;
kg=KG;
HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)));
disp('Outputs:')
disp(['gama = ' num2str(gama)])
disp(['ugs (m/s) = ' num2str(ugs)])
disp(['fg (Pa^0.5) = ' num2str(fg)])
disp(['uls (m/s) = ' num2str(uls)])
disp(['kg (m/s) = ' num2str(kg)])
disp(['kl (m/s) = ' num2str(kl)])
disp(['ae (m2/m3) = ' num2str(ae)])
disp('HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)))')
disp(['HETP (m) = ' num2str(HETP)])
```

GAMA_m_mod.m

```
function [gama]=GAMA_m_mod
clear
global G L
G=input('G (kmol/s) >');
L=input('L (kmol/s) >');
y2=input('y2 (fr. molar chave pesado no vapor) >');
y1=input('y1 (fr. molar chave leve no vapor) >');
```

```

x2=input('x2 (fr. molar chave pesado no liquido) >');
x1=input('x1 (fr. molar chave leve no liquido) >');
alfa=(y1/x1)/(y2/x2);
disp(['volatilidade relativa >' num2str(alfa)])
m=alfa/(1+(alfa-1)*x1)^2;
disp(['inclinação curva de equilibrio - m >' num2str(m)])
gama=m*(G/L);

```

UGS.m

```

function [ugs]=UGS
clear
global Gm dg D A ugs
D=input('Diametro da coluna (m) >');
dg=input('Densidade da fase gas (kg/m3) >');
Gm=input('Vazao massica da fase gas (kg/s)>');
A=pi*(D^2)/4;
ugs=Gm/(A*dg);

```

FG.m

```

function [fg]=FG
clear
global ugs dg fg
fg=ugs*(dg)^0.5;

```

ULS.m

```

function [uls]=ULS
clear
global dl uls A Lm
dl=input('Densidade da fase liquida (kg/m3) >');
Lm=input('Vazao massica da fase liquida (kg/s) >');
uls=Lm/(A*dl);

```

AE.m

```

function [ae]=AE

```

```

clear
global b h e miL ap s g ae
b=input('base da corrugaçao (m) >');
h=input('altura da corrugacao (m) >');
e=input('porosidade do recheio >');
miL=input('viscosidade liquido (kg/m s) >');
ap=input('area superficial do recheio (m2/m3) >');
s=((b^2/4)+h^2)^0.5;
g=9.8;
ae=ap;

```

KL.m

```

function [kl]=KL
clear
global Lm s b h Pt Pd P deq uls A dl g miL ule MB T VA DL kl
Pt=(4*s+2*b)/(b*h);
Pd=4*s/(b*h);
P=(Pt+Pd)/2;
deq=b*h*((1/(b+2*s))+1/(2*s));
liqflowper=Lm*(P*A)^-1;
ule=(3*liqflowper*(2*dl)^-1)*(dl^2*g*(3*miL*liqflowper)^-1)^0.333;
disp(['velocidade efetiva liquido (m/s)>' num2str(ule)])
T=input('Temperatura (K) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> Vteb= 0.23 m3/kgmol, C11 --> Vteb=0.25 m3/kgmol ')
VAteb=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A na temp ebulição(m3/kgmol)>');
MB=input('Massa molar de B (kg/kgmol) >');
DL=1.17*10^-13*(MB^0.5*T)*((miL*1000)*VAteb^0.6)^-1;
disp(['difusividade fase liquida (m2/s) >' num2str(DL)])
kl=2*(DL*ule*(pi*deq)^-1)^0.5;

```

KG.m

```

function [kg]=KG
clear
global b h s deq miG ugs e uge P MA VcB VB T MB VA DG dg ule kg
miG=input('viscosidade gas (kg/m s) >');
uge=ugs/(e*0.87);
disp(['velocidade efetiva gas (m/s) >' num2str(uge)])
P=input('Pressao absoluta (atm) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> V= 0.21 m3/kgmol, C11 --> V=0.23 m3/kgmol')
VB=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente B (m3/kgmol)>');
VA=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A (m3/kgmol)>');
MA=input('Massa molar de A (kg/kmol) >');
DG=(10^-9)*T^1.75*(MA^-1+MB^-1)^0.5/(P*((VA^(1/3)+VB^(1/3))^2));
disp(['difusividade fase gas (m2/s) >' num2str(DG)])
kg=0.0338*(dg*(uge+ule)*deq/miG)^0.8*(miG/(DG*dg))^0.333*(DG/deq);

```

IV.2.2. Modelo Adaptado de Bravo, Rocha e Fair (1985)

Todas as equações são as mesmas do Modelo de Bravo, Rocha e Fair (1985), exceto os seguintes arquivos:

hetp.m

```
disp('Calculo HETP - Modelo Bravo et. al. (1985)')
disp('Inputs:')
gama=GAMA_m_mod;
ugs=UGS;
fg=FG;
uls=ULS;
kl=KL;
ae=AE;
kg=KG;
HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)));
disp('Outputs:')
disp(['gama = ' num2str(gama)])
disp(['ugs (m/s) = ' num2str(ugs)])
disp(['fg (Pa^0.5) = ' num2str(fg)])
disp(['uls (m/s) = ' num2str(uls)])
disp(['kg (m/s) = ' num2str(kg)])
disp(['kl (m/s) = ' num2str(kl)])
disp(['ae (m2/m3) = ' num2str(ae)])
disp('HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae))))')
disp(['HETP (m) = ' num2str(HETP)])
```

KL.m

```
function [kl]=KL
clear
global Lm s b h Pt Pd P deq uls A dl g miL ule MB T VA DL kl
s=((b^2/4)+h^2)^0.5;
miL=input('viscosidade liquido (kg/m s) >');
e=input('porosidade do recheio >');
```

```

h=input('altura da corrugacao (m) >');
b=input('base da corrugacao (m) >');
Pt=(4*s+2*b)/(b*h);
Pd=4*s/(b*h);
P=(Pt+Pd)/2;
deq=b*h*((1/(b+2*s))+1/(2*s));
liqflowper=Lm*(P*A)^-1;
ule=(3*liqflowper*(2*dl)^-1)*(dl^2*g*(3*miL*liqflowper)^-1)^0.333;
disp(['velocidade efetiva liquido (m/s)>' num2str(ule)])
T=input('Temperatura (K) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> Vteb= 0.23 m3/kgmol, C11 --> Vteb=0.25 m3/kgmol ')
VAteb=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A
na temp ebulicao(m3/kgmol)>');
MB=input('Massa molar de B (kg/kgmol) >');
DL=1.17*10^-13*(MB^0.5*T)*((miL*1000)*VAteb^0.6)^-1;
disp(['difusividade fase liquida (m2/s) >' num2str(DL)])
CE=input('CE >')
kl=2*(DL*ule*CE*(pi*s)^-1)^0.5;

```

AE.m

```

function [ae]=AE
clear
global uls deq g ap ae
ap=input('area superficial do recheio (m2/m3) >');
g=9.8;
ae=ap*(1-1.203*(uls^2/(deq*g))^0.111);

```

IV.2.3. Modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993, 1996)

hetp.m

```

disp('Calculo HETP - Modelo Rocha et. al. (1993)')
disp('Inputs:')
gama=GAMA_m_mod;

```

```

ugs=UGS;
fg=FG;
uls=ULS;
ae=AE;
kl=KL;
kg=KG;
HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)));
disp('Outputs:')
disp(['gama = ' num2str(gama)])
disp(['ugs (m/s) = ' num2str(ugs)])
disp(['fg (Pa^0.5) = ' num2str(fg)])
disp(['uls (m/s) = ' num2str(uls)])
disp(['kg (m/s) = ' num2str(kg)])
disp(['kl (m/s) = ' num2str(kl)])
disp(['ae (m2/m3) = ' num2str(ae)])
disp('HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)))')
disp(['HETP (m) = ' num2str(HETP)])

```

GAMA_m_mod.m

```

function [gama]=GAMA_m_mod
clear
global G L
G=input('G (kmol/s) >');
L=input('L (kmol/s) >');
y2=input('y2 (fr. molar chave pesado no vapor) >');
y1=input('y1 (fr. molar chave leve no vapor) >');
x2=input('x2 (fr. molar chave pesado no liquido) >');
x1=input('x1 (fr. molar chave leve no liquido) >');
alfa=(y1/x1)/(y2/x2);
disp(['volatilidade relativa >' num2str(alfa)])
m=alfa/(1+(alfa-1)*x1)^2;
disp(['inclinação curva de equilibrio - m >' num2str(m)])
gama=m*(G/L);

```

UGS.m


```

function [ugs]=UGS
clear
global Gm dg D A ugs
D=input('Diametro da coluna (m) >');
dg=input('Densidade da fase gas (kg/m3) >');
Gm=input('Vazao massica da fase gas (kg/s)>');
A=pi*(D^2)/4;
ugs=Gm/(A*dg);

```

FG.m

```

function [fg]=FG
clear
global ugs dg fg
fg=ugs*(dg)^0.5;

```

ULS.m

```

function [uls]=ULS
clear
global dl uls A Lm
dl=input('Densidade da fase liquida (kg/m3) >');
Lm=input('Vazao massica da fase liquida (kg/s) >');
uls=Lm/(A*dl);

```

AE.m

```

function [ae]=AE
clear
global dl uls b h e t miL ap g s Ft ae
b=input('base da corrugacao (m) >');
h=input('altura da corrugacao (m) >');
e=input('porosidade do recheio >');
miL=input('viscosidade liquido (kg/m s) >');
ap=input('area superfial do recheio (m2/m3) >');
t=input('tensao superficial (N/m) >');
g=9.8;

```

```

s=((b^2/4)+h^2)^0.5;
ReLs=(dl*uls*s)/miL;
WeLs=(dl*uls^2*s)/t;
FrLs=uls^2/(s*g);
Ft=(29.12*(WeLs*FrLs)^0.15*s^0.359)/(ReLs^0.2*e^0.6*(1-0.93*0.9)*0.87^0.3);
ae=ap*(1-1.203*(uls^2/(s*g))^0.111);

```

KL.m

```

function [kl]=KL
clear
global g dg dl Ft s miL uls e miG pf p gef hL ule MB T VAteb DL kl
miG=input('viscosidade gas (kg/m s) >');
pf=input('perda de carga coluna inundada (Pa/m) >');
p=input('perda de carga experimental (Pa/m) >');
gef=g*((dl-dg)*dl^-1)*(1-p*pf^-1);
hL=(4*Ft*s^-1)^(2/3)*((3*miL*uls)*(dl*e*gef*0.87)^-1)^(1/3);
disp(['holdup liquido >' num2str(hL)])
ule=uls*(e*hL*0.87)^-1;
disp(['velocidade efetiva liquido (m/s)>' num2str(ule)])
T=input('Temperatura (K) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> V= 0.23 m3/kgmol, C11 --> V=0.25 m3/kgmol, ')
VAteb=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A na temp ebulicao(m3/kgmol)>');
MB=input('Massa molar de B (kg/kgmol) >');
DL=1.17*10^-13*(MB^0.5*T)*((miL*1000)*VAteb^0.6)^-1;
disp(['difusividade fase liquida (m2/s) >' num2str(DL)])
kl=2*(DL*ule*0.7*(pi*s)^-1)^0.5;

```

KG.m

```

function [kg]=KG
clear
global hL e ugs ule s dg miG MB T VA uge P MA VB DG kg

```

```

uge=ugs/(e*(1-hL)*0.87);
disp(['velocidade efetiva gas (m/s) >' num2str(uge)])
P=input('Pressao absoluta (atm) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> V= 0.21 m3/kgmol, C11 --> V=0.23 m3/kgmol')
VB=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente B (m3/kgmol)>');
VA=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A (m3/kgmol)>');
MA=input('Massa molar de A (kg/kmol) >');
DG=(10^-9)*T^1.75*(MA^-1+MB^-1)^0.5/(P*((VA^(1/3)+VB^(1/3))^2));
disp(['difusividade fase gas (m2/s) >' num2str(DG)])
kg=0.054*(dg*(uge+ule)*s/miG)^0.8*(miG/(DG*dg))^0.333*(DG/s);

```

IV.2.4. Modelo de Brunazzi e Pagliant (1997)

hetp.m

```

disp('Calculo HETP - Modelo Brunazzi et. al. (1997)')
disp('Inputs:')
gama=GAMA_m_mod;
ugs=UGS;
fg=FG;
uls=ULS;
ae=AE;
kl=KL;
kg=KG;
HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)));
disp('Outputs:')
disp(['gama = ' num2str(gama)])
disp(['ugs (m/s) = ' num2str(ugs)])
disp(['fg (Pa^0.5) = ' num2str(fg)])
disp(['uls (m/s) = ' num2str(uls)])
disp(['kg (m/s) = ' num2str(kg)])

```

```

disp(['kl (m/s) =' num2str(kl)])
disp(['ae (m2/m3) =' num2str(ae)])
disp('HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)))')
disp(['HETP (m) =' num2str(HETP)])

```

GAMA_m_mod.m

```

function [gama]=GAMA_m_mod
clear
global G L
G=input('G (kmol/s) >');
L=input('L (kmol/s) >');
y2=input('y2 (fr. molar chave pesado no vapor) >');
y1=input('y1 (fr. molar chave leve no vapor) >');
x2=input('x2 (fr. molar chave pesado no liquido) >');
x1=input('x1 (fr. molar chave leve no liquido) >');
alfa=(y1/x1)/(y2/x2);
disp(['volatilidade relativa >' num2str(alfa)])
m=alfa/(1+(alfa-1)*x1)^2;
disp(['inclinação curva de equilibrio - m >' num2str(m)])
gama=m*(G/L);

```

UGS.m

```

function [ugs]=UGS
clear
global Gm dg D A ugs
D=input('Diametro da coluna (m) >');
dg=input('Densidade da fase gas (kg/m3) >');
Gm=input('Vazao massica da fase gas (kg/s)>');
A=pi*(D^2)/4;
ugs=Gm/(A*dg);

```

FG.m

```

function [fg]=FG
clear

```

```
global ugs dg fg
fg=ugs*(dg)^0.5;
```

ULS.m

```
function [uls]=ULS
clear
global dl uls A Lm
dl=input('Densidade da fase liquida (kg/m3) >');
Lm=input('Vazao massica da fase liquida (kg/s) >');
uls=Lm/(A*dl);
```

AE.m

```
function [ae]=AE
clear
global dl uls e miL ap g hL ae
e=input('porosidade do recheio >');
miL=input('viscosidade liquido (kg/m s) >');
ap=input('area superficial do recheio (m2/m3) >');
g=9.8;
if uls<0.011
    c=0.0169;
    x=0.37;
else
    c=0.0075;
    x=0.59;
end
hL=(c*(ap^0.83)*(3600*uls)^x*(miL/0.001)^0.25)/100;
disp(['holdup liquido >' num2str(hL)])
ae=ap*(1-1.203*(uls^2/((4*e/ap)*g))^0.111);
```

KL.m

```
function [kl]=KL
clear
global uls e hL miL dl g miG ule filme d ReL t Ka Z H MB T VcA VA DL kl
```

```

miG=input('viscosidade gas (kg/m s) >');
ule=uls*(hL*0.93)^-1;
disp(['velocidade efetiva liquido (m/s)>' num2str(ule)])
filme=(3*miL*uls/(dl*g*0.93*hL*0.93))^0.5;
d=4*filme;
ReL=(dl*ule*d)/miL;
t=input('tensao superficial (N/m) >');
Ka=((t^3)*dl/((miL^4)*g));
Z=input('altura do leito recheado (m) >');
H=Z/0.93;
T=input('Temperatura (K) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> Vteb= 0.23 m3/kgmol, C11 --> Vteb=0.25 m3/kgmol ')
VAteb=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A na temp ebulicao(m3/kgmol)>');
MB=input('Massa molar de B (kg/kgmol) >');
DL=1.17*10^-13*(MB^0.5*T)*((miL*1000)*VAteb^0.6)^-1;
disp(['difusividade fase liquida (m2/s) >' num2str(DL)])
kl=(DL/d)*63.10*((ReL*filme*(miL/(dl*DL))/H)^0.676)/(Ka^0.09);

```

KG.m

```

function [kg]=KG
clear
global hL e ugs ule dg miG MB T VA ap uge P MA VcB VB DG kg
uge=ugs/((e-hL)*0.87);
disp(['velocidade efetiva gas (m/s) >' num2str(uge)])
P=input('Pressao absoluta (atm) >');
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e B=C11')
disp('C10 --> V= 0.21 m3/kgmol, C11 --> V=0.23 m3/kgmol')
VB=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente B (m3/kgmol)>');

```

```

VA=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A
(m3/kgmol)>');
MA=input('Massa molar de A (kg/kmol) >');
DG=(10^-9)*T^1.75*(MA^-1+MB^-1)^0.5/(P*((VA^(1/3)+VB^(1/3))^2));
disp(['difusividade fase gas (m2/s) >' num2str(DG)])
kg=0.054*(dg*(uge+ule)*(4*e/ap)/miG)^0.8*(miG/(DG*dg))^0.333*(DG*ap/(4*e));

```

IV.4.5. Modelo de Olujić et al. (2004)

hetp.m

```
disp('Calculo HETP - Modelo Olujic et. al. (2004)')
disp('Inputs:')
gama=GAMA_m_mod;
ugs=UGS;
fg=FG;
uls=ULS;
GEOMETRIA;
ae=AE;
kl=KL;
kg=KG;
HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)));
disp('Outputs:')
disp(['gama = ' num2str(gama)])
disp(['ugs (m/s) = ' num2str(ugs)])
disp(['fg (Pa^0.5) = ' num2str(fg)])
disp(['uls (m/s) = ' num2str(uls)])
disp(['kg (m/s) = ' num2str(kg)])
disp(['kl (m/s) = ' num2str(kl)])
disp(['ae (m2/m3) = ' num2str(ae)])
disp('HETP=((log(gama))/(gama-1))*((ugs/(kg*ae))+gama*(uls/(kl*ae)))')
disp(['HETP (m) = ' num2str(HETP)])
```

GAMA_m_mod.m

```
function [gama]=GAMA_m_mod
clear
global G L
G=input('G (kmol/s) >');
L=input('L (kmol/s) >');
y2=input('y2 (fr. molar chave pesado no vapor) >');
y1=input('y1 (fr. molar chave leve no vapor) >');
x2=input('x2 (fr. molar chave pesado no liquido) >');
```



```

x1=input('x1 (fr. molar chave leve no liquido) >');
alfa=(y1/x1)/(y2/x2);
disp(['volatilidade relativa >' num2str(alfa)])
m=alfa/(1+(alfa-1)*x1)^2;
disp(['inclinação curva de equilibrio - m >' num2str(m)])
gama=m*(G/L);

```

UGS.m

```

function [ugs]=UGS
clear
global Gm dg D A ugs
D=input('Diametro da coluna (m) >');
dg=input('Densidade da fase gas (kg/m3) >');
Gm=input('Vazao massica da fase gas (kg/s)>');
A=pi*(D^2)/4;
ugs=Gm/(A*dg);

```

FG.m

```

function [fg]=FG
clear
global ugs dg fg
fg=ugs*(dg)^0.5;

```

ULS.m

```

function [uls]=ULS
clear
global dl uls A Lm
dl=input('Densidade da fase liquida (kg/m3) >');
Lm=input('Vazao massica da fase liquida (kg/s) >');
uls=Lm/(A*dl);

```

GEOMETRIA.m

```

global uls dl ap ugs miL filme hpe lGpe b h e s dhg v hL uge ule
ap=input('area superficial do recheio (m2/m3) >');

```

```

miL=input('viscosidade liquido (kg/m s) >');
filme=(3*miL*uls/(dl*9.8*ap*0.93))^(1/3)
hpe=input('altura de um elemento de recheio (m) >');
lGpe=hpe/0.87;
b=input('base da corrugaçao (m) >');
h=input('altura da corrugacao (m) >');
e=input('porosidade do recheio >');
s=((b^2/4)+h^2)^0.5;
disp(['lado corrugacao (m) >' num2str(s)])
dhg=((b*h-2*filme*s)^2/(b*h))/((((b*h-2*filme*s)/(2*h))^2+((b*h-
2*filme*s)/b)^2)^0.5+((b*h-2*filme*s)/(2*h)));
disp(['diametro hidraulico (m) >' num2str(dhg)])
v=2*s/(b+2*s);
hL=filme*ap;
disp(['holdup liquido >' num2str(hL)])
uge=ugs/((e-hL)*0.87);
disp(['velocidade efetiva gas (m/s)>' num2str(uge)])
ule=uls/(e*hL*0.93);
disp(['velocidade efetiva liquido (m/s)>' num2str(ule)])

```

AE.m

```

function [ae]=AE
clear
global uls dl miL g ap dhg ae P
g=9.8;
P=input('Pressao absoluta (atm) >');
ae=ap*(1-1.203*(uls^2/(dhg*g))^0.111);

```

KL.m

```

function [kl]=KL(DL,uLe,dhg)
clear
global MB T miL VA uLe dhg DL VcA kl s
T=input('Temperatura (K) >');

```

```

disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e
B=C11')
disp('C10 --> Vteb= 0.23 m3/kgmol, C11 --> Vteb=0.25 m3/kgmol ')
VAteb=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A
na temp ebulição(m3/kgmol)>');
MB=input('Massa molar de B (kg/kgmol) >');
DL=1.17*10^-13*(MB^0.5*T)*((miL*1000)*VAteb^0.6)^-1;
%DL por umesi
% RB=input('Raio de giração de B (A) >');
% RA=input('Raio de giração de A (A) >');
% DLumesi=2.75*10^-15*(T*RB)/(miL*RA^(2/3));
disp(['difusividade fase liquida (m2/s) >' num2str(DL)])
%disp(['difusividade fase liquida por umesi (m2/s) >' num2str(DLumesi)])
kl=2*(DL*uLe*(pi*0.9*dhg)^-1)^0.5;

```

KG.m

```

function [kg]=KG
clear
global T MB VA dg uge ule dhg miG filme v lGpe P MA VcB VB DG miG ReGrv
friccao ScG Shlam Shturb kglam kgturb kg
disp('Se estiver calculando HETP para o topo A=C11 e B=C10, para o fundo A=C10 e
B=C11')
disp('C10 --> V= 0.21 m3/kgmol, C11 --> V=0.23 m3/kgmol')
VB=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente B
(m3/kgmol)>');
VA=input('soma dos volume atômicos de todos os elementos para o componente A
(m3/kgmol)>');
MA=input('Massa molar de A (kg/kmol) >');
DG=(10^-9)*T^1.75*(MA^-1+MB^-1)^0.5/(P*((VA^(1/3)+VB^(1/3))^2));
disp(['difusividade fase gas (m2/s) >' num2str(DG)])
miG=input('viscosidade gas (kg/m s) >');
ReGrv=dg*(uge+ule)*dhg/miG;
friccao=(-2*log10((filme/dhg)/3.7-5.02/ReGrv*log10((filme/dhg)/3.7+14.5/ReGrv)))^2;

```

```

ScG=miG/(dg*DG);
ShGturb=(ReGrv*ScG*friccao*v/8)*(1+(dhg/lGpe)^(2/3))/(1+12.7*(friccao*v/8)^(.5)*
(ScG^(2/3)-1));
ShGlam=0.664*ScG^(1/3)*(ReGrv*dhg/lGpe)^(.5);
kglam=ShGlam*DG/dhg;
disp(['kglam (m/s) >' num2str(kglam)])
kgturb=ShGturb*DG/dhg;
disp(['kgturb (m/s) >' num2str(kgturb)])
kg=((kglam^2)+(kgturb^2))^.5;

```

IV.4.6. Modelo de Carrillo, Martin e Rosello (2000)

hetp.m

```
D=input('Diametro da coluna (m) >');
dg=input('Densidade da fase gas (kg/m3) >');
Gm=input('Vazao massica da fase gas (kg/s)>');
A=pi*(D^2)/4;
ugs=Gm/(A*dg);
fg=ugs*(dg)^0.5;
disp(['fg (Pa^0,5) >' num2str(fg)])
dl=input('Densidade da fase liquida (kg/m3) >');
P=input('pressao de operacao (bar) >');
P=P*760;
HETP=P*dl^0.5*fg^0.42/((2712+82*P)*(1+1.505*(dg/dl)^.25)^2);
disp('Outputs:')
disp(['HETP (m) =' num2str(HETP)])
```