



Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Instituto de Química

Mischelle Paiva dos Santos

Modelagem e simulação de refervedores

Rio de Janeiro

2016

Mischelle Paiva dos Santos

Modelagem e simulação de refervedores

Dissertação apresentada, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Processos Químicos, Petróleo e Meio Ambiente.

Orientador: Prof. Dr. André Luiz Hemerly Costa

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Rocha de Almeida Lima

Rio de Janeiro

2016

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ/REDE SIRIUS/CTC/Q

S237 Santos, Mischelle Paiva dos.
Modelagem e simulação de refervedores. / Mischelle Paiva dos Santos. - 2016.
126 f.

Orientador: André Luiz Hemerly Costa.
Orientador: Eduardo Rocha de Almeida Lima.
Dissertação (mestrado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Química.

1. Trocadores de calor - Teses. 2. Modelagem de processos – Teses.
I. Costa, André Luiz Hemerly. II. Lima, Eduardo Rocha de Almeida. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto de Química. IV. Título.

CDU 536.24

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese.

Assinatura

Data

Mischelle Paiva dos Santos

Modelagem e simulação de reservatórios

Dissertação apresentada, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração: Processos Químicos, Petróleo e Meio Ambiente.

Aprovada em 18 de março de 2016.

Banca examinadora:

Prof. Dr. André Luiz Hemerly Costa (orientador)

Instituto de Química – UERJ

Prof. Dr. Eduardo Rocha de Almeida Lima (orientador)

Instituto de Química – UERJ

Prof. Dr. André Luis Alberton

Instituto de Química – UERJ

Prof. Dr. Pedro Henrique Rodrigues Alijó

Instituto de Química – UERJ

Prof. Dr. André Domingues Quelhas

Petrobras

Rio de Janeiro
2016

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a minha mãe e ao meu irmão, por todo apoio e incentivo! Amo muito vocês!

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter guiado todos os meus passos durante essa trajetória.

A minha mãe, Sandra da Fonte Paiva, por todo apoio, incentivo e paciência ao longo desse árduo trabalho.

A meu irmão, Matheus Paiva dos Santos, por toda compreensão e palavras de força e apoio.

Ao meu namorado, Paulo Roberto Araújo da Silva Junior, por todo apoio e auxílio.

Aos meus queridos orientadores, Prof. Dr. André Luiz Hemerly Costa e Prof. Dr. Eduardo Rocha de Almeida Lima por todos os ensinamentos e empenho ao longo de toda a orientação.

RESUMO

SANTOS, Mischelle Paiva dos. *Modelagem e simulação de refeedores*. 2016. 126 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2016.

Refeedores são trocadores de calor responsáveis por fornecer energia ao processo de fracionamento em uma coluna de destilação, uma das operações mais utilizadas na indústria química. Em função disso, este trabalho apresenta a modelagem e simulação de dois tipos de refeedores: um termossifão vertical e um refeedor com circulação forçada. O modelo proposto resulta em um sistema de equações algébrico-diferenciais resolvido utilizando o *software* livre *Scilab*. Outra abordagem do trabalho foi realizar uma simulação estocástica, com o intuito de analisar a influência de algumas variáveis no desempenho do equipamento. O trabalho incluiu ainda a comparação entre duas formulações do parâmetro de interação binária, em função da temperatura, do modelo de Wilson, utilizado para modelar a não idealidade da fase líquida. Além disso, influência dos parâmetros de interação binária no equilíbrio de fases e na simulação do sistema foi avaliada via análise de sensibilidade. Os algoritmos propostos para os dois tipos de refeedores foram aplicados a um exemplo referente à vaporização de uma mistura binária, obtendo-se como resultados os perfis de pressão, temperatura, vazão mássica de líquido e de vapor ao longo de todo o trajeto. Além disso, foram realizadas comparações entre propriedades da fase líquida, bem como entre os diagramas T-x-y correspondentes a ambas as formulações testadas para o parâmetro de interação binária.

Palavras-chave: Refeedores. Modelagem. Simulação Estocástica.

ABSTRACT

SANTOS, Mischelle Paiva dos. *Modeling and simulation of reboilers*. 2016. 126 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2016.

Reboilers are heat exchangers responsible for supplying energy to the fractionation process in a distillation column, one of the most used operations in the chemical industry. On that basis, this work presents the modeling and simulation of two types of reboilers: vertical thermosyphon reboiler and forced circulation reboiler. The proposed model result in a system of algebraic differential equations solved using the free Software *Scilab*. Another approach of the study was a stochastic simulation, in order to analyze the influence of some variables in the behavior of the equipment. The study also included a comparison of two formulations for the calculation of the temperature dependence of binary interaction parameters of Wilson's model used to express the non ideality of the liquid phase. Furthermore, the influence of binary interaction parameters on phase equilibrium and system simulation was evaluated by sensitivity analysis. The proposed algorithms for the two types of reboilers were applied to an example regarding the vaporization of a binary mixture, obtaining as a result the pressure, temperature and mass flow of liquid and vapor profiles along the entire route. In addition, comparisons were made between properties of the liquid phase as well as between the T-x-y diagrams corresponding to both formulations of the binary interaction parameter.

Keywords: Reboilers. Modeling. Stochastic Simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Curva de ebulição da água	23
Figura 2 – Diferentes regimes de escoamento encontrados em ebulição em escoamento em um tubo com convecção forçada.....	27
Figura 3 – Representação do modelo de composição local.....	29
Figura 4 – Configuração típica de um kettle.....	31
Figura 5 – Configuração típica de um refeedor interno a coluna.....	32
Figura 6 – Configuração típica de um termossifão horizontal.....	33
Figura 7 – Configuração típica de um termossifão vertical.....	34
Figura 8 – Divisão do termossifão vertical em duas regiões.....	35
Figura 9 – Configuração típica de refeedor com circulação forçada.....	35
Figura 10 – Representação esquemática do sistema utilizando o termossifão vertical como refeedor.....	42
Figura 11 – Representação esquemática da resistência equivalente.....	49
Figura 12 – Diagrama de blocos para o cálculo de um flash P, T.....	59
Figura 13 – Diagrama de blocos para o cálculo do ponto de bolha (BOL T)	60
Figura 14 – Diagrama de blocos para o cálculo do ponto de orvalho (ORV T)	61
Figura 15 – Representação esquemática do refeedor com circulação forçada.....	64
Figura 16 – Representação esquemática do início da região 3	73
Figura 17 – Representação esquemática do loop externo.....	73
Figura 18 – Representação esquemática da simulação estocástica	75
Figura 19 – Perfil de pressão ao longo do comprimento da região 1.....	81
Figura 20 – Perfis de pressão e temperatura ao longo do comprimento da região 2....	82
Figura 21 – Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 3.....	83
Figura 22 – Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 4.....	85
Figura 23 – Perfil de pressão ao longo do comprimento da região 1.....	87
Figura 24 – Perfis de pressão e temperatura ao longo do comprimento da região 2	88

Figura 25 – Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 3	89
Figura 26 – Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da Região 4	91
Figura 27 – Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{1,2}$	96
Figura 28 – Influência no Diagrama $\ln(\gamma) - x$ com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{1,2}$ T=350 K.....	96
Figura 29 – Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{2,1}$	97
Figura 30 – Influência no Diagrama $\ln(\gamma) - x$ com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{2,1}$ T= 350 K.....	98
Figura 31– Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% a mais e a menos em ambos em os parâmetros simultaneamente	99
Figura 32 – Influência no Diagrama $\ln(\gamma) - x$ com a variação de 10% a mais e a menos em ambos em os parâmetros simultaneamente T=350 K.....	99
Figura 33 – Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% a mais em $\Lambda_{1,2}$ e 10% menos em $\Lambda_{2,1}$ e variação de 10% a menos em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a mais em $\Lambda_{2,1}$	100
Figura 34 – Influência no Diagrama $\ln(\gamma) - x$ com a variação de 10% a mais em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a menos em $\Lambda_{2,1}$ e variação de 10% a menos em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a mais em $\Lambda_{2,1}$ T=350 K.....	101
Figura 35 – Diagrama T-x-y comparativo entre as equações 7 e 8	104
Figura 36 – Diagrama $H^E - x$ comparativo entre as equações 7 e 8	104
Figura 37 – Diagrama $H^E - x$ em diferentes temperaturas- equação 7	105
Figura 38 – Diagrama $H^E - x$ em diferentes temperaturas- equação 8	106
Figura 39 – Propriedades da fase líquida –T= 350 K- equação 7	107
Figura 40 – Propriedades da fase líquida –T= 350 K- equação 8	107
Figura 41 – Representação esquemática da simulação estocástica utilizada no trabalho.....	109
Figura 42 – Histograma da pressão inicial	110
Figura 43 – Histograma da fração vaporizada	110
Figura 44 – Histograma da carga térmica do refervedor	111
Figura 45 – Histograma da vazão mássica convergida	111
Figura 46 – Curva de frequência acumulada da carga térmica do refervedor	112

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparação entre os tipos de Refervedores	37
Tabela 2 – Variáveis de estado em cada região da integração.....	43
Tabela 3 – Dados das correntes.....	76
Tabela 4 – Dados do sistema.....	76
Tabela 5 – Constantes utilizadas na modelagem para água e acetona	77
Tabela 6 – Parâmetros de interação binária do modelo de Wilson (1- acetona e 2- água)	78
Tabela 7 – Volume molar utilizado na formulação original do modelo de Wilson (1- acetona e 2- água)	78
Tabela 8 – Dados mecânicos do termossifão vertical.....	79
Tabela 9 – Configuração do sistema do termossifão vertical.....	79
Tabela 10 – Dados mecânicos do refervedor com circulação forçada.....	80
Tabela 11 – Parâmetros utilizados na curva característica real da bomba	80
Tabela 12 – Configuração do sistema do refervedor com circulação forçada.....	80
Tabela 13 – Resultados da simulação do termossifão vertical	86
Tabela 14– Resultados da simulação com circulação forçada.....	93
Tabela 15 – Parâmetros utilizados na formulação original (Eq. 7)	94
Tabela 16 – Variação dos parâmetros na análise de sensibilidade	94
Tabela 17 – Resultados da simulação variando o parâmetro de interação binária do modelo de Wilson	102
Tabela 18 – Parâmetros utilizados na formulação modificada (Eq. 8)	103
Tabela 19 – Resultados da simulação comparando a formulação original e a formulação modificada	108
Tabela 20 – Média e desvio padrão das variáveis de saída na simulação estocástica...	112

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ELV	Equilíbrio Líquido/ Vapor
ESDU	<i>Engineering Sciences Data Unit</i>
FORTTRAN	<i>Formula Translation System</i>
SVR	<i>Support vector regression</i>
TEMA	<i>Tubular Exchanger Manufactures Association</i>

LISTA DE SÍMBOLOS¹

q''	Fluxo de calor por convecção, W/m ²
h	Coefficiente de transferência de calor por convecção, W/m ² K
T_w	Temperatura da parede, K
T_{sat}	Temperatura de saturação, K
ΔT_e	Excesso de temperatura, K
ΔT_{eA}	Excesso de temperatura no ponto A (Figura 1), K
ΔT_{eC}	Excesso de temperatura no ponto C (Figura 1), K
ΔT_{eD}	Excesso de temperatura no ponto D (Figura 1), K
ΔT_{eE}	Excesso de temperatura no ponto E (Figura 1), K
q''_{max}	Fluxo de calor máximo por convecção, W/m ²
Λ_{jk}	Parâmetro de interação binária
γ	Coefficiente de atividade
ϕ	Coefficiente de fugacidade
G^E	Energia de Gibbs molar em excesso, J/mol
R	Constante universal dos gases, J/mol K
P	Pressão, kPa
T	Temperatura, K
x	Fração molar da fase líquida
$\overline{G^E}$	Energia de Gibbs parcial molar em excesso
V	Volume molar, cm ³ / mol
a_{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 7, cal/mol
a_{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 8
b_{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 8, K
c_{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 8, 1/K
d_{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 8, 1/K
e_{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 8, K ²
\dot{H}	Taxa de entalpia, J/s

¹ Os elementos dessa lista são descritos na mesma ordem que aparecem no texto segundo o Roteiro para apresentação das teses e dissertações da Universidade do Estado do Rio de Janeiro (2^a ed.). O Apêndice B apresenta uma lista de símbolos em ordem alfabética.

ρ_{tp}	Massa específica, kg/m ³
mV	Vazão mássica de vapor, kg/s
mL	Vazão mássica de líquido, kg/s
G	Fluxo mássico, kg/m ² s
L	Comprimento, m
g	Aceleração da gravidade, m/s ²
θ	Ângulo, rad
f	Fator de atrito
D	Diâmetro, m
m_T	Vazão mássica total, kg/s
v	Velocidade, m/s
W	Taxa de trabalho realizado, J/s
U	Coefficiente global de transferência de calor, W/m ² K
A	Área de troca térmica, m ²
T_H	Temperatura da corrente quente, K
N_{tt}	Número total de tubos
Q	Carga térmica, J/s
D_e	Diâmetro externo, m
D_i	Diâmetro interno, m
h_i	Coefficiente de convecção interno, W/m ² K
R_{fi}	Resistência de depósito interno, m ² K/W
k_w	Condutividade térmica da parede, W/m K
R_{fe}	Resistência de depósito externo, m ² K/W
Nu	Número de Nusselt
Pr	Número de Prandtl.
Re	Número de Reynolds
ρ_l	Massa específica do líquido, kg/m ³
μ_l	Viscosidade dos líquidos, Pa s
C_{p_l}	Capacidade calorífica do líquido, J/ kg
k_l	Condutividade térmica do líquido, W/m K
h_l	Coefficiente de convecção do líquido, W/m ² K
h_e	Coefficiente de convecção externo, W/m ² K

h_i	Coeficiente de convecção interno, W/m ² K
h_{cb}	Coeficiente de convecção de ebulição convectiva, W/m ² K
h_{nb}	Coeficiente de convecção de ebulição nucleada, W/m ² K
s	Fator de supressão
F	Fator de amplificação
F_c	Fator relativo à presença de uma mistura
h_{nb1}	Coeficiente de convecção nucleada em um tubo isolado, W/m ² K
P_c	Pressão crítica, bar
F_p	Fator relativo à pressão
T_{bol}	Temperatura de bolha, K
T_{orv}	Temperatura de orvalho, K
R_{eq}	Resistência equivalente, K/W
R_{cond}	Resistência de condução na parede, K/W
R_{conv}	Resistências de convecção, K/W
$R_{depósito}$	Resistência térmica devido à incrustação, K/W
A_e	Área externa, m ²
L_t	Comprimento do tubo, m
A_i	Área interna, m ²
σ	Tensão superficial, n/m
ΔH_j^V	Calor de vaporização do componente j, J/mol
ρ_g	Massa específica do gás, kg/m ³
H^L	Entalpia molar da fase líquida, J/mol
H^E	Entalpia molar em excesso, J/mol
$H_j^{L,sat}$	Entalpia de um líquido saturado, J/mol
T_{ref}	Temperatura referência, K
MM_{ml}	Massa molar da mistura líquida, kg/mol
ϕ_{lo}^2	Coeficiente calculado para adequar o termo referente ao atrito monofásico para o bifásico
Fr_{tp}	Número de Froude bifásico
We_{tp}	Número de Weber bifásico
x_g	Fração vaporizada
μ_g	Viscosidade dos gases, Pa s

ρ_{tph}	Massa específica da mistura bifásica gasosa, kg/m ³
ε_g	Fração de vazios
V_r	Taxa de fluxo volumétrico de vapor em relação ao líquido
u_r	Estimação da taxa de deslizamento, m/s
We_{lo}	Número de Weber somente líquido
X_{tt}	Parâmetro de Martinelli
$P_{\text{c kPa}}$	Pressão crítica, kPa
V	Volume molar, cm ³ /mol
ΔH_{vb}	Entalpia de vaporização no ponto de ebulição normal, J/mol
MM_{mg}	Massa molar da mistura gasosa, kg/mol
$C_p^{\text{g.i.}}$	Capacidade calorífica dos gases ideais, J/mol
K_j	Razão de equilíbrio
\mathcal{V}	Fração de vapor com composição da fase gasosa y
\mathcal{L}	Fração de líquido com composição da fase líquida x
z	Composição global
y	Fração molar da fase vapor
x	Fração molar da fase líquida
V^E	Volume molar em excesso, J/mol
Head	Carga de pressão, m
P_{fb}	Pressão após a bomba, kPa
P_{ib}	Pressão antes da bomba, kPa
a_{bomba}	Parâmetro da equação da bomba, m
b_{bomba}	Parâmetro da equação da bomba, s/m ²
c_{bomba}	Parâmetro da equação da bomba, s ² /m ⁵
Q_v	Vazão volumétrica, m ³ /s
A_{ant}	Constante de Antoine
B_{ant}	Constante de Antoine
C_{ant}	Constante de Antoine
A	Constante utilizada na equação de Serghides
B	Constante utilizada na equação de Serghides
C	Constante utilizada na equação de Serghides
ε	Rugosidade absoluta

T_c	Temperatura crítica, K
P_c	Pressão crítica, bar
T_r	Temperatura reduzida
Z_{RAm}	Cálculo da constante modificada da eq. de Rackett
T_{cm}	Temperatura crítica da mistura, K
ϕ_i	Fração de volume superficial
V_{cm}	Volume crítico da mistura, cm ³ /mol
ϵ	Parâmetro utilizado no cálculo da viscosidade da mistura líquida
ϵ_m	Parâmetro utilizado no cálculo da viscosidade da mistura líquida
ω	Fator acêntrico
ψ_{ij}	Parâmetro de interação binária utilizado no cálculo da viscosidade da mistura líquida.
A_μ	Constante utilizada no cálculo da viscosidade do líquido puro
B_μ	Constante utilizada no cálculo da viscosidade do líquido puro
C_μ	Constante utilizada no cálculo da viscosidade do líquido puro
μ_m	Momento de dipolo da mistura, debyes
μ_{rm}	Momento dipolar adimensional
F_{cm}	Fator utilizado no cálculo da viscosidade dos gases
σ_m	Diâmetro molecular, Å
Ω_v	Integral da colisão para viscosidade
T'_m	Temperatura da mistura, K
$(\epsilon/k)_m$	Razão entre a energia característica e a constante de Boltzman, K
κ_m	Fator de associação da mistura
k_{jk}	Parâmetro de interação binária cálculo da massa específica da mistura de líquidos
ξ	Parâmetro de interação binária utilizado no cálculo da viscosidade da mistura de gases
ζ	Parâmetro de interação binária utilizado no cálculo da viscosidade da mistura de gases
T_b	Ponto de ebulição normal, K
T_{br}	Razão entre o ponto de ebulição normal e temperatura crítica

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	19
1	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
1.1	Regimes de ebulição e a curva de ebulição	22
1.1.1	<u>Ebulição em piscina</u>	23
1.1.1.1	Ebulição com convecção natural (Região I)	24
1.1.1.2	Ebulição nucleada (Região II)	24
1.1.1.3	Ebulição no regime de transição (Região III)	25
1.1.1.4	Ebulição em filme (película) (Região IV)	25
1.1.2	<u>Ebulição com convecção forçada</u>	25
1.1.2.1	Ebulição em escoamento interno.....	26
1.1.2.2	Ebulição em escoamento externo.....	28
1.2	Modelo para obtenção das propriedades termodinâmicas	28
1.2.1	<u>Energia de Gibbs em excesso</u>	28
1.3	Refervedores	31
1.3.1	<u>Refervedor tipo kettle</u>	31
1.3.2	<u>Refervedor interno a coluna</u>	32
1.3.3	<u>Termossifão</u>	33
1.3.3.1	Termossifão horizontal.....	33
1.3.3.2	Termossifão vertical.....	34
1.3.4	<u>Refervedor com circulação forçada</u>	35
1.4	Simulação de Refervedores	38
1.5	O presente trabalho em relação a literatura	40
2	MODELAGEM MATEMÁTICA	42
2.1	Descrição do sistema	42
2.2	Modelagem do sistema por regiões	43
2.2.1	<u>Região 1</u>	43
2.2.1.1	Balanco de energia mecânica monofásico.....	44
2.2.2	<u>Região 2</u>	44

2.2.2.1	Balanco de energia no trocador de calor.....	44
2.2.2.2	Cálculo da temperatura da parede do trocador de calor (Tw)	48
2.2.2.3	Cálculo da temperatura da parede no início da ebulição nucleada (Twonb)	50
2.2.2.4	Cálculo da taxa de entalpia.....	50
2.2.2.5	Balanco de energia mecânica monofásica.....	51
2.2.3	<u>Região 3</u>	51
2.2.3.1	Balanco de energia mecânica bifásico.....	52
2.2.3.2	Massa específica bifásica	53
2.2.3.3	Balanco de energia no trocador de calor.....	54
2.2.3.4	Cálculo da taxa de entalpia bifásica	56
2.2.3.5	Balanco de massa	62
2.2.4	<u>Região 4</u>	63
2.2.5	<u>Inserção da bomba</u>	63
2.3	Equações complementares ao modelo	64
2.3.1	<u>Equação de Antoine</u>	64
2.3.2	<u>Fator de atrito</u>	64
2.3.3	<u>Massa específica</u>	65
2.3.3.1	Massa específica da mistura de líquidos.....	65
2.3.3.2	Massa específica da mistura de gases.....	66
2.3.4	<u>Viscosidade</u>	66
2.3.4.1	Viscosidade da mistura de líquidos.....	66
2.3.4.2	Viscosidade da mistura de gases.....	68
2.3.5	<u>Condutividade térmica</u>	69
2.3.5.1	Condutividade térmica da mistura de líquidos.....	69
2.3.6	<u>Tensão superficial</u>	70
2.3.7	<u>Capacidade calorífica</u>	70
2.3.8	<u>Calor latente de vaporização</u>	71
3	SIMULAÇÃO	72
3.1	Simulação do sistema	72
3.2	Simulação estocástica	74
4	RESULTADOS	76

4.1	Dados de entrada	76
4.1.1	<u>Dados da simulação do termossifão vertical</u>	79
4.1.2	<u>Dados da simulação do refervedor com circulação forçada</u>	79
4.2	Resultados das simulações dos refervedores	81
4.2.1	<u>Simulação do termossifão vertical</u>	81
4.2.2	<u>Simulação do refervedor com circulação forçada</u>	87
4.3	Análise do impacto das incertezas das predições do modelo termodinâmico na simulação	93
4.3.1	<u>Influência no ELV</u>	95
4.3.1.1	Variação de 10% no parâmetro de interação binária $\Lambda_{1,2}$	95
4.3.1.2	Variação de 10% no parâmetro de interação binária $\Lambda_{2,1}$	97
4.3.1.3	Análise da influência da variação de ambos os parâmetros de interação binária.....	98
4.3.1.3.1	Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$	98
4.3.1.3.2	Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$	98
4.3.1.3.3	Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e redução de 10% em $\Lambda_{2,1}$	100
4.3.1.3.4	Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e aumento de 10% em $\Lambda_{2,1}$	100
4.3.2	<u>Influência na simulação do sistema</u>	101
4.4	Comparação entre duas formulações de parâmetro de interação binária	102
4.4.1	<u>Influência no ELV</u>	103
4.4.2	<u>Influência na simulação do sistema</u>	108
4.5	Simulação estocástica	108
	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	113
	REFERÊNCIAS	115
	APÊNDICE A - Tabela 1- Exemplo de coeficientes de atividades (análise de sensibilidade)	119
	APÊNDICE B – Lista de símbolos em ordem alfabética.....	120
	ANEXO A - Produção científica.....	125
	ANEXO B - Padrão TEMA para trocadores de calor casco-e tubos.....	127

INTRODUÇÃO

A destilação é um dos processos de separação mais utilizados na indústria de processos químicos, possibilitando a separação de misturas através da diferença da volatilidade dos componentes presentes por meio de um conjunto de estágios em equilíbrio. Nesses estágios, vapor e líquido são mantidos em contato, trocando calor e massa. O vapor ao percorrer o equipamento se enriquece nos componentes mais voláteis, enquanto o líquido nos componentes mais pesados (CALDAS et al., 2007). Esses sistemas necessitam de trocadores de calor, com o objetivo de fornecer calor ao fundo da coluna, refeedores, e para remover calor do topo da coluna, condensadores (INDIO DO BRASIL, 2004).

Entre as alternativas de refeedores, destaca-se o termossifão vertical, no qual a circulação ocorre em função da diferença de densidade entre a coluna de líquido, proveniente da torre, e a mistura bifásica originada ao longo do trocador de calor. Neste tipo de equipamento o mais comum é que a vaporização ocorra no interior dos tubos. Esse tipo de trocador apresenta como vantagens: maiores valores de coeficiente de convecção quando comparado aos demais refeedores, menor propensão à deposição devido a maiores velocidades alcançadas no escoamento no interior dos tubos, e facilidade de limpeza dos depósitos eventualmente formados durante a vaporização, visto que esta ocorre no interior dos tubos.

Outra alternativa de refeedor envolve a circulação forçada, no qual o movimento do fluido através do trocador é realizado com o auxílio de uma bomba. Esse tipo de trocador é recomendado para fluidos com grande propensão à deposição ou altamente viscosos.

Nos últimos anos, o interesse em modelagem e simulação está cada vez maior, crescimento esse que está associado a diversos fatores, como, por exemplo, o avanço computacional, além de fatores econômicos e a necessidade de melhorias em processos químicos.

Para um mesmo sistema vários modelos matemáticos podem ser empregados para a resolução de um problema particular. Neste caso, o grau de detalhamento requerido depende dos dados disponíveis, do problema a ser resolvido e dos objetivos da modelagem. Quanto mais rigorosa for a descrição do processo, maior será a complexidade do sistema de equações

a ser resolvido.

A modelagem e simulação de refervedores apresenta diversos desafios, tais como: presença de transferência de calor com mudança de fase, modelagem do escoamento bifásico, necessidade de integração das equações de conservação ao longo do equipamento, imposição da resolução da equação de conservação de energia mecânica em todo o circuito hidráulico, dentre outros.

Diante deste cenário, o presente trabalho propõe a investigação da modelagem e simulação de dois tipos de refervedores: termossifão vertical e refervedor com circulação forçada.

O escopo do trabalho foi realizado de acordo com os objetivos apresentados a seguir.

Como objetivo geral do trabalho pode-se citar:

- Propor um modelo matemático para refervedores do tipo termossifão vertical e refervedor com circulação forçada e desenvolver algoritmos computacionais a fim de simular a operação desses equipamentos.

Como objetivos específicos, tem-se:

- Relacionar equações de balanço de energia, balanço de energia mecânica e balanço de massa para um sistema multicomponente.
- Propor um algoritmo que resolva o sistema de equações algébrico-diferenciais resultante, permitindo efetuar a simulação do modelo.
- Analisar o impacto de diferenças na modelagem termodinâmica na simulação em relação ao parâmetro de interação binária do modelo de Wilson, utilizado no cálculo do coeficiente de atividade e entalpia em excesso da fase líquida.
- Analisar a influência dos parâmetros de interação binária, via análise de sensibilidade, no equilíbrio líquido-vapor e na modelagem e simulação.

- Estudar o impacto de variações nos parâmetros operacionais utilizando simulação estocástica.

Estrutura da dissertação

Este trabalho está organizado em 4 capítulos, sendo dividido da seguinte forma: o Capítulo 1 descreve a revisão da literatura, no Capítulo 2 tem-se a modelagem utilizada na dissertação, o Capítulo 3 apresenta as duas formas de simulação utilizadas, já o Capítulo 4 apresenta os resultados e discussões. Por fim, segue-se a conclusão do trabalho e sugestões para trabalhos futuros.

1. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão da literatura contemplará os seguintes itens: regimes de ebulição, modelo para obtenção de propriedades termodinâmicas, tipos de refervedores e simulação de refervedores.

1.1 Regimes de ebulição e a curva de ebulição

Os processos de ebulição envolvem a transferência de calor associada à mudança de fase do estado líquido para o estado vapor. A ebulição ocorre quando uma superfície está com temperatura superior à temperatura de saturação do líquido. Tanto o fenômeno de condensação, passagem do estado vapor para o estado líquido, como o fenômeno de ebulição são classificados como modos de transferência de calor por convecção, pois envolvem a movimentação dos fluidos. Parâmetros neste caso importantes em relação a este fenômeno são o calor latente, a tensão superficial na interface líquido-vapor e a diferença entre as massas específicas das duas fases, que induz uma força de empuxo. A combinação entre o calor latente e o escoamento associado ao empuxo, resulta em um aumento da taxa de transferência de calor, quando comparada com a transferência de calor por convecção sem mudança de fase (INCROPERA et al., 2008; ÇENGEL, 2009).

A lei que rege esse fenômeno é a lei de Newton do resfriamento, que pode ser expressa pela seguinte equação:

$$q'' = h(T_w - T_{sat}) = h\Delta T_e \quad (1)$$

onde: q'' é o fluxo de calor por convecção, h é o coeficiente de transferência de calor por convecção, T_w é a temperatura da parede, T_{sat} é a temperatura de saturação e ΔT_e é o chamado excesso de temperatura, que representa o quanto a temperatura da superfície está acima da temperatura de saturação do fluido.

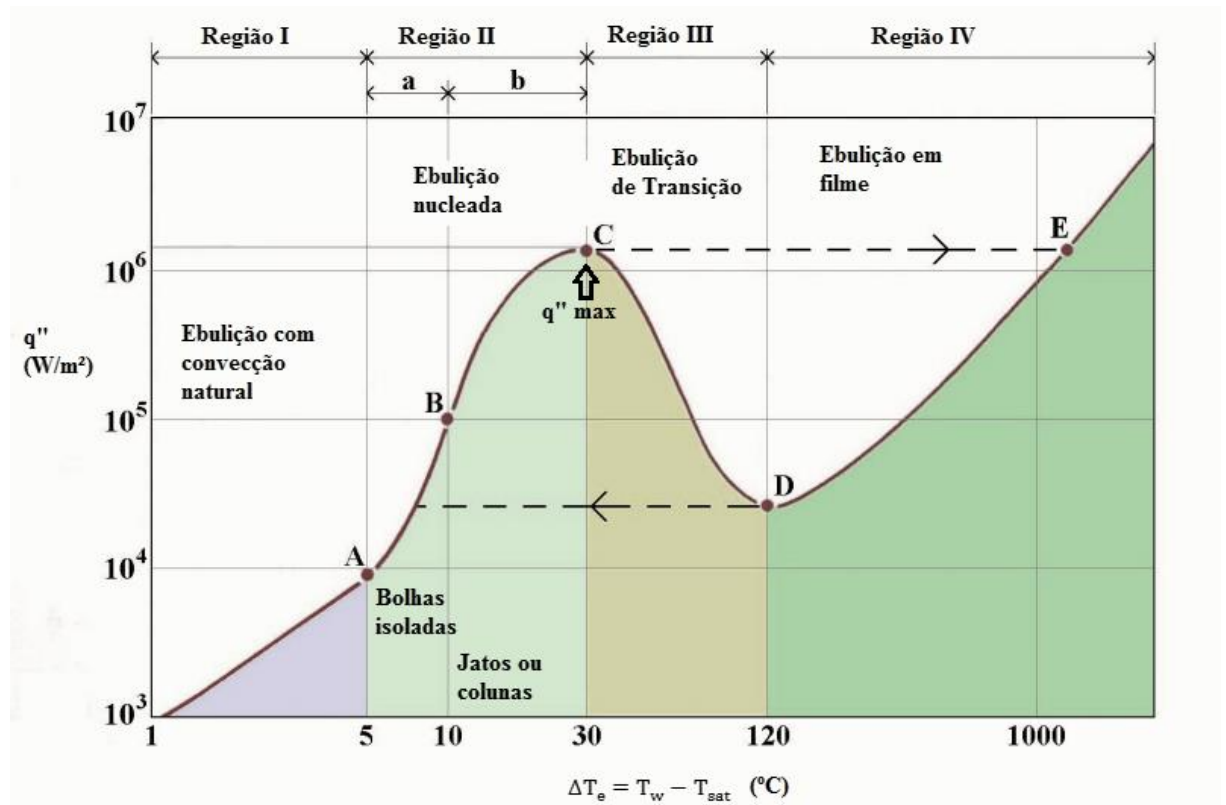
$$\Delta T_e = T_w - T_{sat} \quad (2)$$

Esse processo é evidenciado pela formação de bolhas de vapor na superfície, que crescem e em seguida se desprendem da superfície. O crescimento e a dinâmica das bolhas dependem do excesso de temperatura, das propriedades termofísicas e da natureza da

superfície. A dinâmica da formação das bolhas influencia o coeficiente de transferência de calor.

A curva de ebulição da água, citada inicialmente por Nukiyama (1934), relaciona o fluxo de calor com o excesso de temperatura (Figura 1).

Figura 1 – Curva de ebulição da água



Fonte: O autor, 2016

A ebulição pode ser classificada em função da natureza do escoamento, como ebulição em piscina ou ebulição com convecção forçada, como descrito nos próximos itens.

1.1.1 Ebulição em piscina

Na ebulição em piscina, o líquido encontra-se em repouso e o movimento próximo à superfície é oriundo da convecção natural. A mistura é induzida pelo crescimento e desprendimento de bolhas de vapor na superfície (INCROPERA et al., 2008). Este tipo de ebulição pode ser subdividido em quatro modos de acordo com a magnitude do excesso de temperatura, descritos nas subseções seguintes.

1.1.1.1 Ebulição com convecção natural (Região I)

Este tipo de ebulição ocorre quando $\Delta T_e \leq \Delta T_{eA}$ (excesso de temperatura no ponto A da Figura 1). Nesta região, apesar da temperatura do fluido estar acima da temperatura de saturação, a transferência de calor ocorre sem mudança de fase, estando o fluido em uma condição metaestável. (INCROPERA et al., 2008).

1.1.1.2 Ebulição nucleada (Região II)

Ao aumentar a quantidade de calor transferida por um fio metálico, como no experimento de Nukiyama (1934), o sistema pode atingir o superaquecimento necessário para início da formação e o crescimento das bolhas de vapor. O crescimento de bolhas no sítio de nucleação pode alcançar cavidades vizinhas, ativando-as. Como resultado, temos uma dispersão rápida da ebulição nucleada sobre toda a superfície e conseqüentemente o aumento do coeficiente de transferência de calor, caracterizando o início do regime de ebulição nucleada.

A ebulição nucleada ocorre no seguinte intervalo de excesso de temperatura: $\Delta T_{eA} \leq \Delta T_e \leq \Delta T_{eC}$ (excesso de temperatura no ponto C da Figura 1). Nesta região podem-se observar duas regiões distintas. No trecho A-B se observa a formação de bolhas isoladas, que se formam nos sítios de nucleação e se desprendem da superfície. O desprendimento das bolhas de vapor gera um aumento no h e no q'' . Já no trecho B-C, observa-se que o vapor ascende como jatos ou colunas, que se unem para formar bolsões de vapor.

No ponto C, o aumento adicional no valor do ΔT_e é equilibrado pela redução do valor do h . Neste ponto tem-se o chamado fluxo térmico máximo (q''_{\max}) ou crítico. A partir deste ponto de máximo, uma grande quantidade de vapor é formada, dificultando que o líquido molhe continuamente a superfície (INCROPERA et al., 2008).

1.1.1.3 Ebulição no regime de transição (Região III)

A ebulição no regime de transição, ebulição em filme instável ou ebulição em filme parcial, ocorre no seguinte intervalo de excesso de temperatura: $\Delta T_{eC} \leq \Delta T_e \leq \Delta T_{eD}$ (excesso de temperatura no ponto D da Figura 1). Nesta região, a formação de bolhas ocorre tão rapidamente que um filme de vapor começa a se formar sobre a superfície. Em qualquer ponto da superfície, as condições oscilam entre o regime de ebulição nucleada e o regime de ebulição em filme (INCROPERA et al., 2008).

Neste regime, o fluxo de calor diminui. Isso ocorre, pois, uma grande parte da superfície está coberta por uma película de vapor, que atua como um isolamento, associado à baixa condutividade térmica do vapor em relação ao líquido (ÇENGEL, 2009).

1.1.1.4 Ebulição em filme (película) (Região IV)

Nesta região, a superfície está completamente coberta por uma película contínua e estável de vapor, que é responsável por baixas taxas de transferência de calor (ÇENGEL, 2009).

O ponto D é conhecido como ponto de Leidenfrost, em homenagem a J. C. Leidenfrost que, em 1756, observou que as gotículas de líquido “ficam pulando” e fervem lentamente, em uma superfície muito quente. A transferência de calor da superfície para o líquido ocorre por condução e radiação através do vapor. A ebulição em filme ocorre quando o excesso de temperatura segue: $\Delta T_e \geq \Delta T_{eD}$ (INCROPERA et al., 2008; ÇENGEL, 2009).

1.1.2 Ebulição com convecção forçada

Neste caso, a ebulição ocorre concomitantemente ao escoamento, resultado da movimentação dirigida (ou global) do fluido, bem como dos efeitos de empuxo. As condições estão relacionadas com a geometria, que pode estar associada ao escoamento externo ou escoamento interno. A ebulição com convecção forçada em um escoamento interno normalmente é referida como escoamento bifásico, no qual ocorrem mudanças rápidas do estado líquido para o estado vapor no sentido do escoamento (INCROPERA et al., 2008).

1.1.2.1 Ebulição em escoamento interno

Esta forma de ebulição está relacionada à formação de bolhas na superfície interna de um tubo aquecido, através do qual um líquido escoar. A velocidade do escoamento e os efeitos fluidodinâmicos influenciam o crescimento e desprendimento das bolhas, e diferem muito dos presentes na ebulição em piscina. Esse processo é acompanhado pela existência de uma variedade de padrões de escoamento bifásico (INCROPERA et al., 2008).

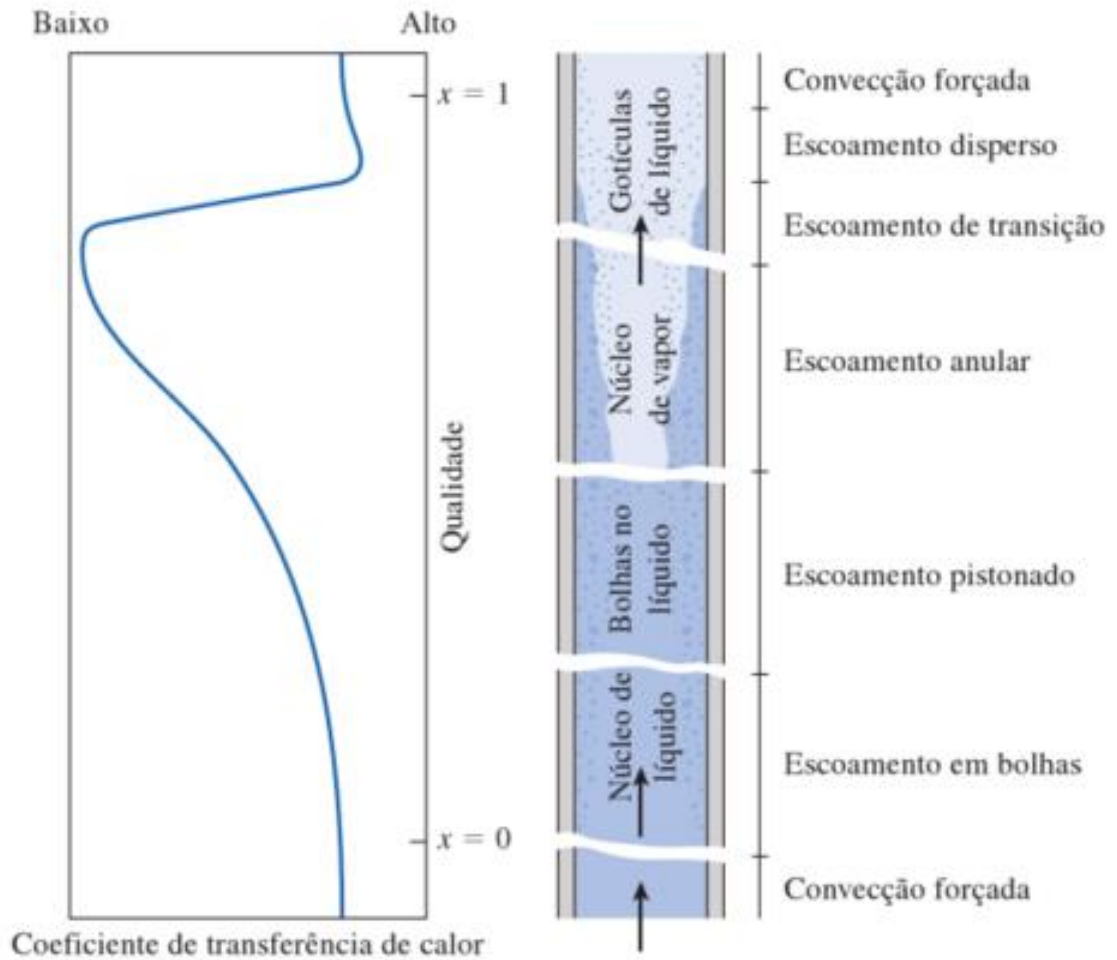
A Figura 2 apresenta os diferentes regimes de escoamento encontrados na ebulição em escoamento em um tubo com convecção forçada, de acordo com Incropera et al (2008).

A transferência de calor para o líquido sub-resfriado que entra no tubo é inicialmente por convecção forçada monofásica. A partir de um determinado valor de temperatura limite, acima da temperatura de saturação, inicia-se a formação das bolhas. Nessa região existem gradientes de temperatura radiais significativos, com bolhas se formando adjacentes à parede aquecida e líquido sub-resfriado escoando perto do centro do tubo. A espessura da região das bolhas aumenta ao longo do tubo, até que o núcleo alcance a temperatura de saturação do fluido. Então a fração de vapor é maior do que zero em qualquer posição radial. Isso marca o início da região de ebulição com escoamento saturado.

O primeiro estágio da região de ebulição com escoamento saturado se chama regime de escoamento com bolhas. Com o aumento da fração mássica de vapor, as bolhas individuais coalescem formando bolsões de vapor. Esse regime de escoamento em bolsões é seguido pelo regime de escoamento anular onde o líquido forma um filme na parede do tubo. Esse filme se move ao longo da superfície interna do tubo, enquanto o vapor se move com uma velocidade maior através do núcleo do tubo.

Na sequência, pontos secos aparecem na superfície interna do tubo e crescem em tamanho em um regime de transição. Finalmente a superfície inteira do tubo está completamente seca e todo o líquido remanescente está na forma de gotas que viajam em alta velocidade no núcleo central do tubo no regime de névoa. Depois das gotas serem totalmente vaporizadas, o fluido é constituído de vapor superaquecido em uma segunda região de convecção forçada monofásica.

Figura 2 – Diferentes regimes de escoamento encontrados na ebulição em escoamento em um tubo com convecção forçada



Fonte: ÇENGEL, Y. A., GHAJAR, A. J., 2012 (Figura 10-19 página 597).

O aumento da fração mássica de vapor em conjunto com a significativa diferença das massas específicas das fases líquida e vapor, aumentam a velocidade média do fluido por várias ordens de grandeza entre a primeira e a segunda regiões de convecção forçada monofásica (INCROPERA et al., 2008; ÇENGEL, 2009).

1.1.2.2 Ebulição em escoamento externo

A ebulição em escoamento externo ocorre quando o fluido é forçado a escoar em uma superfície aquecida, que pode ser uma placa ou cilindro aquecidos (ÇENGEL, 2009). Este tipo de ebulição não será objeto de estudo desta dissertação, uma vez que a vaporização nos refeedores estudados ocorrem normalmente no interior dos tubos.

1.2 Modelo para obtenção das propriedades termodinâmicas

Ao simular um trocador de calor com mudança de fase, fazem-se necessárias rotinas para descrever o equilíbrio de fases. O equilíbrio líquido/vapor (ELV) apresenta dois procedimentos gerais de cálculo, ambos obtidos a partir do critério da igualdade de potenciais químicos: a formulação ϕ - ϕ e a formulação γ - ϕ . A primeira utiliza equações de estado para descrever a não idealidade de ambas as fases, sempre tomando como referência o modelo de gás ideal. Já a segunda utiliza o coeficiente de atividade para descrever a não-idealidade da fase líquida, a partir de um modelo de energia de Gibbs em excesso, adotando o modelo de solução ideal como referência. A formulação utilizada nesta dissertação foi esta segunda (γ - ϕ). Como as pressões dos sistemas aqui estudados são todas baixas, optou-se por utilizar o modelo de mistura de gases ideais para a fase vapor ($\phi = 1$), resultando na chamada Lei de Raoult modificada.

1.2.1 Energia de Gibbs em excesso (G^E)

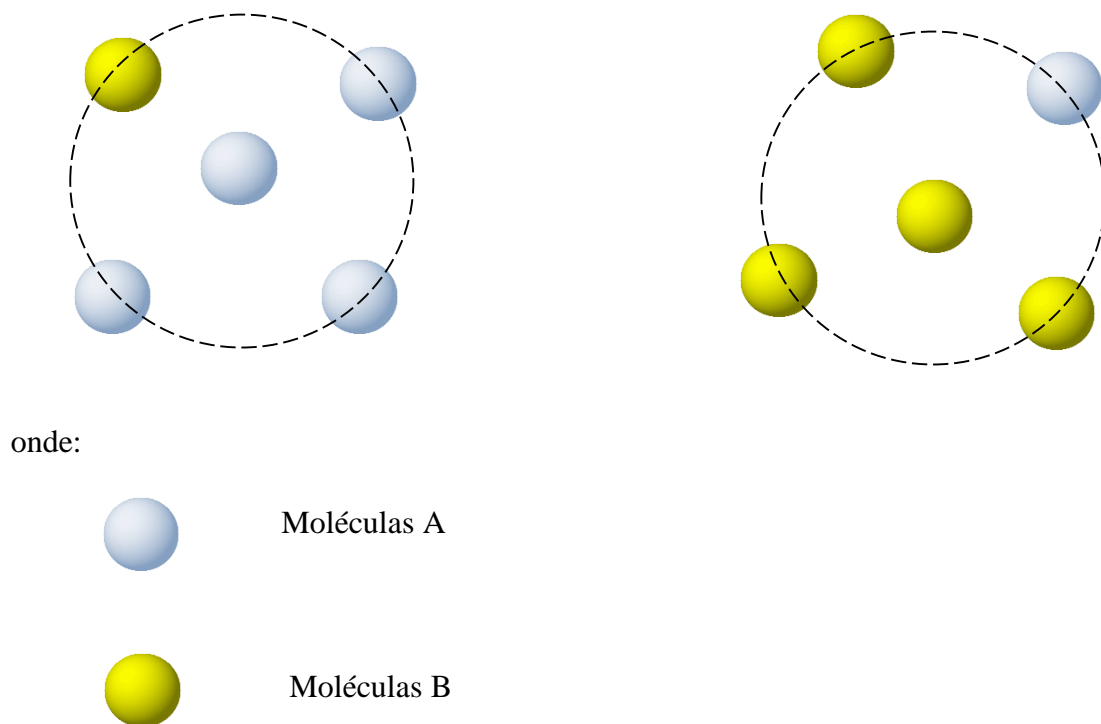
As propriedades em excesso medem o afastamento do comportamento ideal, através da diferença entre o valor de uma propriedade para uma solução real e o valor da mesma propriedade para uma solução ideal (SMITH et al., 2007).

A propriedade $G^E/(RT)$ é uma função de pressão (P), temperatura (T) e composição, mas, para pressões baixas e moderadas, a dependência de P é muito fraca, sendo a influência da pressão desprezada no cálculo do coeficiente de atividade (γ).

A redução do coeficiente de atividade (γ) indica interações mais atrativas entre moléculas diferentes, quando comparadas às interações entre moléculas do mesmo tipo, enquanto o aumento do coeficiente de atividade está relacionado à maior repulsão entre moléculas diferentes.

Wilson (1964) propôs um modelo que relaciona G^E com a composição da fase líquida (x), utilizando o conceito de composição local, o qual estabelece que a composição dos sistemas nas vizinhanças de certa molécula é diferente da composição global do sistema, devido às forças intermoleculares. A Figura 3 apresenta uma exemplificação dessa diferença entre a composição global do sistema e a composição local. Na primeira parte da figura, é possível observar que, devido às interações moleculares, a concentração local do componente A ao redor de uma molécula de referência A é diferente da concentração global. A segunda parte da Figura 3 mostra o mesmo para uma molécula B. As expressões resultantes para G^E e coeficientes de atividade são funções de parâmetros de interação binária (Λ_{jk}), que estão relacionados com o volume molar dos líquidos puros, com a diferença da energia das interações moleculares e com a temperatura.

Figura 3 - Representação do modelo de composição local



Fonte: O autor, 2016.

De acordo com o modelo de Wilson (1964), a equação para o cálculo da energia de Gibbs em excesso para um sistema multicomponente é dada por:

$$\frac{G^E}{RT} = - \sum_{j=1}^n x_j \ln \left(\sum_{k=1}^n x_k \Lambda_{jk} \right) \quad (3)$$

onde x é a composição da fase líquida, Λ_{jk} é o parâmetro de interação binária, G^E é a energia de Gibbs molar em excesso, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura.

A energia de Gibbs parcial em excesso (\bar{G}_j^E) pode ser calculada em função do coeficiente de atividade da espécie j em solução (SMITH et al., 2007):

$$\bar{G}_j^E = RT \ln \gamma_j \quad (4)$$

Lembrando que o logaritmo neperiano do coeficiente de atividade é a propriedade parcial molar de $G^E/(RT)$:

$$\ln \gamma_j = \left(\frac{\partial (\bar{G}^E/(RT))}{\partial n_j} \right)_{T,P,n_j} \quad (5)$$

Obtém-se a expressão para calcular os coeficientes de atividade:

$$\ln \gamma_j = 1 - \ln \left(\sum_{k=1}^n x_k \Lambda_{jk} \right) - \sum_{w=1}^n \frac{x_w \Lambda_{wj}}{\sum_{k=1}^n x_k \Lambda_{wk}} \quad (6)$$

sendo n o número de componentes e γ o coeficiente de atividade.

Os parâmetros de interação binária podem ser representados de maneiras distintas.

A formulação original, proposta por Wilson (1964), é dada por:

$$\Lambda_{jk} = \frac{V_k}{V_j} \exp \frac{-a_{jk}}{RT} \quad (7)$$

sendo V o volume molar, R a constante universal dos gases, T a temperatura e a_{jk} é o parâmetro de interação binária.

Porém, esta formulação geralmente não representa suficientemente bem a dependência desses parâmetros com a temperatura. Assim, quando se necessita calcular a entalpia em excesso (calculada a partir da derivada de $G^E/(RT)$ em relação a T) é comum o uso de uma expressão mais empírica como, por exemplo (AspenTech, 2006)

$$\Lambda_{jk} = \exp \left(a_{jk} + \frac{b_{jk}}{T} + c_{jk} \ln T + d_{jk} T + \frac{e_{jk}}{T^2} \right) \quad (8)$$

sendo a_{jk} , b_{jk} , c_{jk} , d_{jk} e e_{jk} os parâmetros de ajuste.

1.3 Refervedores

Segundo Serth e Lestina (2014), refervedores são vaporizadores responsáveis por vaporizar uma corrente líquida oriunda do fundo de uma coluna de destilação, retornando a corrente bifásica para a própria coluna, fornecendo assim energia para o fracionamento. A fonte de calor utilizada para a vaporização pode ser oriunda de uma utilidade, de um fluido de processo ou da queima de um combustível.

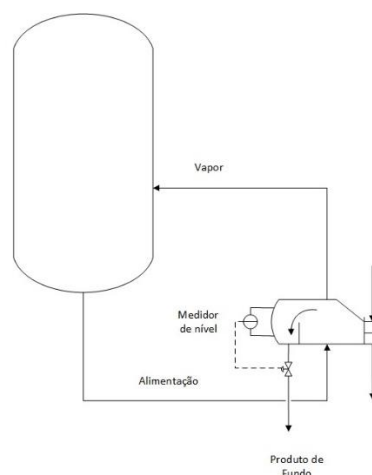
As análises térmicas e hidráulicas dos refervedores são normalmente mais complexas que de um trocador de calor sem mudança de fase.

Nas próximas subseções serão abordados os tipos mais comuns de refervedores na forma de trocadores de calor casco-e-tubo.

1.3.1 Refervedor tipo *kettle*

Esse tipo de refervedor se distingue dos demais por sua forma característica e é constituído por um feixe de tubos imerso no líquido em ebulição. Os vapores que são formados são separados do líquido na extensão do casco (MCNEIL et al., 2010). O casco utilizado segue os padrões TEMA (*Tubular Exchanger Manufactures Association, 1978-ANEXO B*) do tipo K. O feixe de tubos pode ser do tipo tubo em U ou cabeçote flutuante. A configuração típica desse trocador de calor pode ser observada na Figura 4.

Figura 4 – Configuração típica de um *kettle*



Fonte: O autor, 2016.

O *kettle* funciona da seguinte maneira: o líquido oriundo da coluna de destilação entra em contato com a superfície externa dos tubos do *kettle*, onde acontece a ebulição. O vapor e o líquido estão em contato contínuo e são separados no casco, o fluxo de vapor

retorna para a coluna e o fluxo de líquido é retirado como produto de fundo no refeedor (SERTH e LESTIMA,2014).

Como vantagens, pode-se citar a facilidade de manutenção e a possibilidade de utilização com fluidos próximos do ponto crítico, no qual a diferença entre as densidades do líquido e do vapor não são significativas.

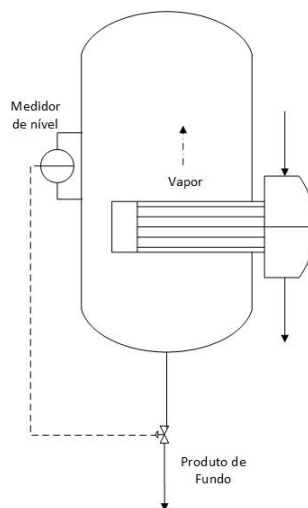
Como desvantagens, tem-se: valores menores de coeficientes de convecção em comparação aos demais refeedores, problemas associados à deposição e o fato de serem mais caros devido ao tipo de casco (PALEN,1983).

1.3.2 Refeedor interno à coluna

Esse tipo de refeedor possui o feixe de tubos inseridos na coluna de destilação, o que reduz os gastos com a tubulação e com o casco do refeedor. Apresenta como limitações a quantidade limitada de área de transferência de calor e a possibilidade de formação de espuma, que pode levar a problemas operacionais. Tais fatores contribuem para que raramente esse tipo de refeedor seja utilizado.

A Figura 5 apresenta uma representação esquemática desse tipo de refeedor.

Figura 5 – Configuração típica de um refeedor interno a coluna



Fonte: O autor, 2016.

1.3.3 Termossifão

Termossifões são refervedores em que a circulação ocorre em função da diferença de densidade existente entre a coluna de líquido no fundo da torre de destilação e a corrente bifásica que retorna para a torre (ARNETH e STILCHLMAIR, 2001).

1.3.3.1 Termossifão horizontal

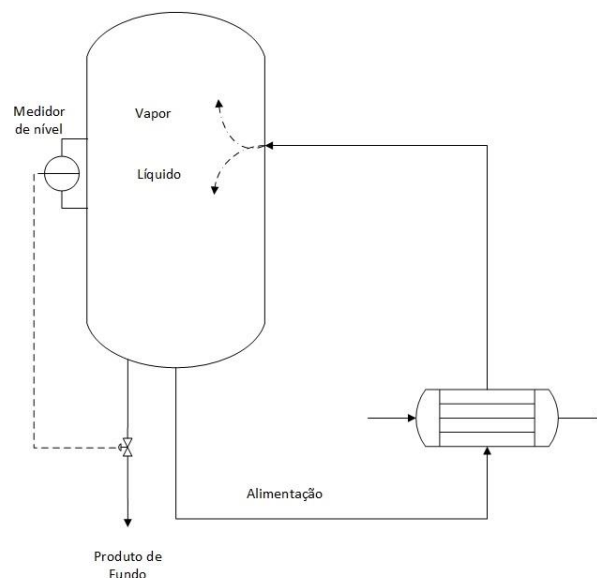
Esse tipo de refervedor normalmente apresenta escoamento transversal ao feixe de tubos e, no interior do feixe de tubos, escoo o fluido de aquecimento. Geralmente o trocador possui casco com padrões TEMA X, G, H, entretanto E e J também podem ser usados (ANEXO B). O feixe de tubos pode ter um ou mais passes (SERTH e LESTIMA,2014).

A corrente que retorna para a torre de destilação é uma mistura bifásica. A representação desse tipo de termossifão pode ser vista na Figura 6.

Devido à configuração horizontal, necessita-se de uma altura menor de coluna de líquido para o escoamento.

Quando comparado ao *kettle*, apresenta maiores velocidades, reduzindo a formação de depósitos.

Figura 6 – Configuração típica de termossifão horizontal



Fonte: O autor, 2016.

1.3.3.2 Termossifão vertical

O termossifão vertical é um refeedor com padrão TEMA E para o casco, e apresenta feixe de tubos com apenas um passe (Figura 7).

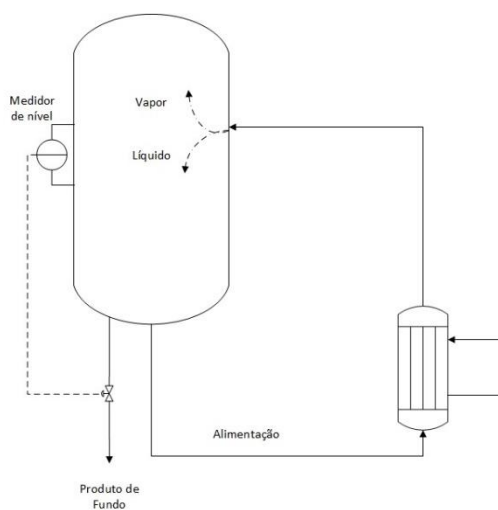
Comumente a ebulição ocorre no interior dos tubos, sendo a configuração invertida em casos especiais como, por exemplo, com um meio de aquecimento corrosivo (SERTH e LESTIMA, 2014).

Arneth e Stilchlmaier (2001) esquematizam a divisão do termossifão em duas áreas: zona de aquecimento, onde o líquido é aquecido até a ebulição e zona de vaporização. Mudanças no comprimento das duas zonas tem forte influência na taxa de transferência de calor. Essas duas regiões podem ser observadas na Figura 8.

Como vantagem, pode-se citar que este refeedor apresenta altos valores para o coeficiente de convecção. Já como desvantagem apresenta uma maior elevação da torre, devido à necessidade de uma maior altura de coluna de líquido associada à orientação vertical (FRANK e PRICKETT, 1973 apud PRASHANT, PARIKH, JAIN, 2000).

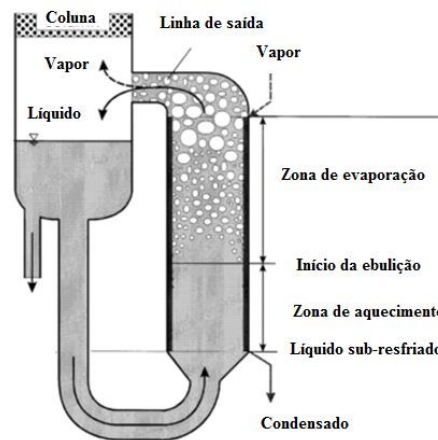
Segundo Palen (1983), as frações vaporizadas recomendadas na saída do refeedor são de 0,10 a 0,35 para hidrocarbonetos e de 0,02 a 0,10 para soluções aquosas, para garantir a ebulição nucleada e evitar o superaquecimento da parede.

Figura 7 – Configuração típica de um termossifão vertical



Fonte: O autor, 2016.

Figura 8 – Divisão do termossifão vertical em duas regiões



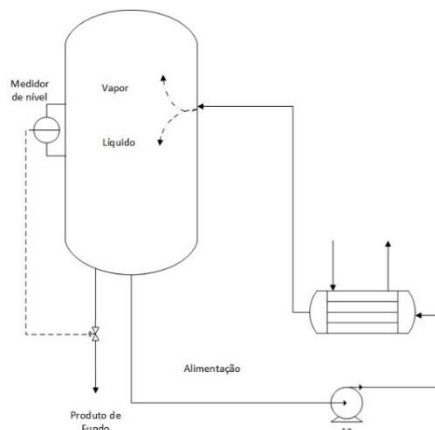
Fonte: Adaptado de ARNETH e STILCHLMAIR, 2001.

1.3.4 Refervedor com circulação forçada

Em um refervedor com circulação forçada, a circulação é realizada por uma bomba (Figura 9). O refervedor pode estar orientado horizontal ou verticalmente. Normalmente a ebulição ocorre no interior dos tubos. Para o casco, o padrão TEMA normalmente utilizado é E, e o feixe de tubos com apenas um passe. Possui maior custo operacional (SERTH e LESTIMA, 2014).

Esses refervedores apresentam como características altas velocidades nos tubos e frações vaporizadas reduzidas quando comparadas ao termossifão vertical. São recomendados para serviços que apresentam severos problemas associados à deposição e/ou fluidos altamente viscosos (ARNETH e STILCHLMAIR, 2001).

Figura 9 – Configuração típica de refervedor com circulação forçada



Fonte: O autor, 2016.

A Tabela 1 é uma adaptação de Kister (1990), e apresenta resumidamente uma comparação entre os principais refervedores.

Tabela 1 – Comparação entre os tipos de Refervedores

	Termossifão vertical	Termossifão horizontal	<i>Kettle</i>	Refervedor com circulação forçada	Refervedor interno a coluna
Lado da ebulição	Normalmente nos tubos	Normalmente no casco	Casco	Normalmente nos tubos	Casco
Taxa de transferência de calor	Alta	Moderadamente alta	Baixa para moderada	Alta	Baixa para moderada
Área ocupada	Pequena	Grande	Grande	Vertical: pequena Horizontal: grande	Mínima para pequena
Investimento	Pequeno	Moderado	Alto	Moderado	Muito Pequeno
Custos operacionais	Nenhum	Nenhum	Nenhum	Custo associado à bomba	Nenhum
Deposição	Baixo	Moderado	Alto	Muito baixo	Moderado
Desempenho para líquidos viscosos	Pobre	Pobre	Pobre	Bom	Pobre
Segurança	Normal	Normal	Normal	Pode ocorrer vazamento no selo da bomba	Risco de vazamento no flange de conexão à coluna.
Tubulação de processo	Pequena e simples	Quantidade padrão	Quantidade padrão	Tubulação extra	Nenhum

Fonte: Adaptado de KISTER, 1990

1.4 Simulação de Refervedores

Mckee (1970) publicou um artigo de revisão sobre refervedores do tipo termossifão, apresentando procedimentos de projeto desse equipamento. O autor referenciou diferentes correlações para o cálculo da ebulição nucleada e descreveu alguns trabalhos sobre cálculo da queda de pressão.

Sarma et al. (1973) criaram uma rotina computacional desenvolvida em Fortran para o projeto de um termossifão vertical com a descrição da modelagem hidrodinâmica e da transferência de calor, apresentando o algoritmo para o cálculo dessas propriedades. O algoritmo proposto foi aplicado para o exemplo descrito em Fair (1960) apud Sarma et al.(1973), em uma coluna de propano a 401 psia e 164 ° F. Os resultados dos cálculos de projeto foram apresentados com diferentes combinações na geometria dos tubos, no fluxo de calor e queda de pressão, mostrando que, ao aumentar a velocidade, ocorre uma redução da fração vaporizada e que, para diferentes fluxos de calor e geometria dos tubos, o coeficiente de transferência de calor e a taxa de circulação do líquido apresentam uma redução com o aumento da queda de pressão.

O projeto de um termossifão vertical requer cálculos iterativos nos quais o trocador necessita ser dividido em zonas. O balanço de energia e de energia mecânica necessitam ser resolvidos simultaneamente. Como alternativa, Frank e Prickett (1973) apud Smith (2005) propuseram correlações simplificadas baseadas em dados operacionais de trocadores de calor comerciais, que podem ser empregadas como base preliminar do projeto de refervedores.

O trabalho de Zinemanas et al. (1984) descreve a simulação de trocadores de calor com mudança de fase através de um algoritmo de simulação para refervedores casco-e-tubo, tanto verticais quanto horizontais. Esse algoritmo calcula as variáveis, temperatura, composição das fases, área e a queda de pressão, ao longo do trocador de calor. Para cada incremento no comprimento, as variáveis são calculadas. Os padrões de escoamento foram identificados utilizando correlações de Weisman (WEISMAN et al. 1979 apud ZINEMANAS et al. 1984 e WEISMAN e KANG, 1981 apud ZINEMANAS et al. 1984). Para resolver a não linearidade das equações, o método iterativo usado foi o método da secante. O desempenho do modelo foi testado frente a dados experimentais. O trabalho apresentou ainda uma análise de sensibilidade para alguns parâmetros. A variação de ± 30 % no coeficiente de transferência de calor nos tubos gerou uma mudança na área de troca

térmica de 5 a 10%, já a mesma variação no coeficiente de transferência de calor no casco, ocasionou uma variação na área de 10 a 20%.

Smith (1986) apresenta uma ampla discussão sobre diferentes tipos de refeedores, descrevendo a modelagem termofluidodinâmica correspondente. Do ponto de vista da integração das equações, o autor sugere a adoção de um conjunto de simplificações na forma de equações algébricas.

Furzer (1990) publicou em seu trabalho a modelagem simplificada de um termossifão vertical próximo ao fluxo de calor máximo, descrevendo a queda de pressão de um sistema bifásico. Esse trabalho apresenta a queda de pressão devido às diferentes contribuições associadas a esse termo, para o benzeno, na pressão de 100 kPa, em diferentes fluxos de calor. Outros resultados apresentados englobam o perfil de temperatura ao longo do comprimento do tubo, o efeito do fluxo de calor no ponto de transição das fases, bem como curvas normalizadas de fluxo máximo de calor para água, hidrocarbonetos e álcoois. Uma característica importante dos resultados é o baixo valor do fluxo de calor máximo sob condições de vácuo e em condições que se aproximam da pressão crítica. O modelo termo-hidráulico fornece o perfil de temperatura ao longo do tubo e mostra que a transição do regime monofásico para o bifásico se dá próxima da entrada do tubo. Outro resultado é a redução do fluxo mássico nos tubos com o aumento do fluxo de calor.

Arneth e Stilchlmair (2001) descreveram as características operacionais de refeedores do tipo termossifão, com base em experimentos e estudos teóricos. Eles discutiram os principais parâmetros operacionais e de projeto para esse tipo de refeedor. Um aspecto importante destacado por estes autores foi o comprimento da zona de aquecimento e da zona de vaporização. Uma vez que os valores dos coeficientes de transferência de calor são muito mais elevados na zona de vaporização do que na zona de aquecimento, a taxa de transferência de calor total passa a ser governada pelo comprimento da zona de vaporização. Outra consideração importante é a descrição da taxa de circulação de líquido que depende significativamente da queda de pressão e da fração vaporizada.

Zaidi (2015) desenvolveu um modelo para o cálculo do coeficiente de transferência de calor de um termossifão vertical, utilizando *support vector regression* (SVR) como método de modelagem. Esse trabalho apresenta o perfil da temperatura da parede, do coeficiente de convecção ao longo do comprimento, para diferentes fluxos de calor. Como resultados, esse trabalho foi capaz de prever o coeficiente de transferência de calor com alto grau de precisão, indicando a utilização do SVR para propor melhorias em correlações semi-

empíricas existentes, não só na transferência de calor, como também em outros campos da engenharia química.

1.5 O presente trabalho em relação à literatura

A despeito da importância dos refeedores, a revisão bibliográfica realizada identificou um número relativamente pequeno de trabalhos sobre o assunto, do ponto de vista da sua modelagem. Boa parte da literatura é representada por trabalhos mais antigos baseados em correlações (Frank e Prickett, 1973 apud Prashant, Parikh, Jain, 2000) ou na resolução das equações de conservação simplificadas através de procedimentos numéricos de convergência do tipo substituição sucessiva (Smith, 1986). As ferramentas comerciais de simulação empregam modelos proprietários não disponíveis na literatura aberta (por exemplo. HTRI).

Dentro deste contexto, este trabalho busca contribuir para a literatura através da proposição de novas alternativas de simulação para refeedores, baseadas em rotinas de integração numérica utilizando sistemas de equações algébrico-diferenciais.

Esta proposição consiste no desenvolvimento de uma ferramenta de simulação envolvendo a resolução das equações de conservação, formuladas de forma mais rigorosa. Para este objetivo, são utilizados algoritmos de integração numérica, de forma a determinar a solução do sistema algébrico-diferencial resultante.

A investigação do impacto de aspectos da modelagem termodinâmica nas previsões da simulação é também outra discussão que este trabalho busca agregar ao tema.

Finalmente, como último aspecto relevante do presente trabalho em relação ao que já foi publicado sobre o assunto, é possível citar a utilização de recursos de simulação estocástica para análise do impacto da incerteza nos parâmetros da simulação sobre os resultados acerca do desempenho do equipamento.

Do ponto de vista da produção bibliográfica associada a este trabalho, é possível citar:

- (1) O trabalho “Modelagem e Simulação de um termossifão vertical” (Santos et al., 2014), foi apresentado no XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química.
- (2) Dois trabalhos intitulados “Modelagem e simulação de um refeedor com circulação e forçada” e “Análise do impacto das incertezas das previsões do modelo termodinâmico na simulação de vaporizadores” foram submetidos ao XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química (2016).

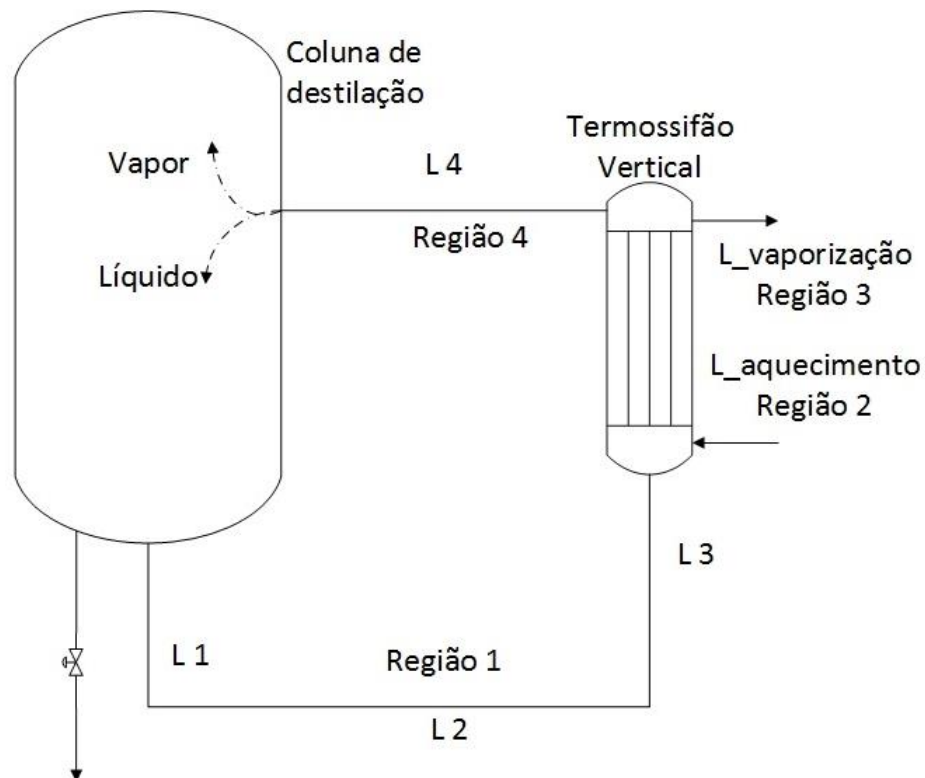
- (3) Outro trabalho produzido durante a dissertação, intitulado “*A Differential Algebraic Model for the Simulation of Thermosiphon Systems*”, está sendo enviado para a *12th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics* (2016).

2 MODELAGEM MATEMÁTICA

2.1 Descrição do sistema

A integração do sistema foi realizada ao longo do comprimento do circuito e a resolução do problema foi dividida em quatro regiões (Figura 10).

Figura 10 – Representação esquemática do sistema utilizando o termosifão vertical como refeedor



Fonte: O autor, 2016.

A Região 1 foi dividida em três partes, L1 com escoamento descendente, L2 com escoamento em trecho horizontal, e L3 com escoamento ascendente. Nessa região tem-se apenas a variação da pressão ao longo do trajeto, levando em consideração que não ocorre variação da temperatura, entalpia e vazão. No caso do refeedor com circulação forçada, há uma bomba no interior desta região localizada no trecho referente ao comprimento L2.

A Região 2 inicia na entrada do trocador de calor até o momento em que a temperatura do sistema (T) se iguala à temperatura de bolha (T_{bol}), ou seja, o momento em que se inicia a vaporização.

A Região 3 compreende a região desde o início da vaporização até o final do trocador de calor.

Já a Região 4 corresponde à corrente bifásica desde a saída do trocador de calor até o retorno para a coluna de destilação.

A Tabela 2 apresenta as variáveis de estado em cada região da simulação.

Tabela 2 - Variáveis de estado em cada região da integração

Regiões	Região 1	Região 2	Região 3	Região 4
			P	
			T	
		P	H	P
		T	mV	T
Variáveis	P	H	mL	H
		T_w	ρ_{tp}	mV
		T_{wonb}	T_w	mL
			T_{wonb}	ρ_{tp}
			h_i	

Fonte: O autor, 2016.

onde P é a pressão, T é a temperatura, \dot{H} é a taxa de entalpia, T_w é a temperatura da parede, T_{wonb} é a temperatura da parede no início da ebulição nucleada, mV é vazão mássica de vapor, mL é a vazão mássica de líquido, ρ_{tp} é massa específica bifásica e h_i é o coeficiente de convecção interno.

2.2 Modelagem do sistema por regiões

2.2.1 Região 1

A região 1 corresponde ao escoamento da corrente líquida até a entrada do trocador. O modelo da região 1 é representado pela equação de balanço de energia mecânica.

2.2.1.1 Balanço de energia mecânica monofásico

Essa equação descreve a variação de pressão em função de três termos: cinético, gravitacional, e um termo devido ao atrito, respectivamente. Assim, pode-se escrever:

$$-\frac{dP}{dL} = -\frac{G^2}{\rho^2} \frac{d\rho}{dL} + \rho g \sin\theta + \frac{f G^2}{2 D \rho} \quad (9)$$

sendo G o fluxo mássico, L o comprimento, ρ a massa específica, P a pressão, θ o ângulo, f o fator de atrito e D o diâmetro. Essa expressão foi escrita utilizando o fator de atrito de Darcy.

2.2.2 Região 2

A região 2 corresponde ao escoamento monofásico no interior do trocador de calor até a corrente atingir a saturação e se iniciar a vaporização da corrente como um todo (bulk). Entretanto, uma situação que pode ocorrer nesta região é a temperatura da parede ultrapassar a temperatura de início da ebulição nucleada. Neste caso, ocorrerá a chamada ebulição nucleada sub-resfriada, ou seja, haverá a vaporização junto à superfície, mas as bolhas ao se juntarem com o restante do fluido irão condensar, caracterizando um balanço de energia monofásico.

O modelo aplicado à região 2 é composto pelas equações de balanço de energia e balanço de energia mecânica. A equação correspondente à taxa de entalpia relaciona dependência da variável em relação à temperatura, pressão e composição. Visando caracterizar o surgimento da ebulição nucleada, estas equações são complementadas pelas equações de cálculo da temperatura da parede do trocador e do cálculo da temperatura de início da ebulição nucleada.

2.2.2.1 Balanço de energia no trocador de calor

Este modelo é composto pelo balanço de energia para a corrente fria, complementado pela equação da taxa de transferência de calor. Em relação à corrente quente, será considerado que a mesma corresponde a vapor d'água saturado que condensa a temperatura constante, não sendo assim necessário a representação de uma equação de balanço específica para esta corrente.

O balanço de energia diferencial para uma corrente de fluido pode ser representado por (SMITH et al., 2007):

$$d\dot{H} + mT(vdv + gdL) = dQ + dW \quad (10)$$

sendo \dot{H} a taxa de entalpia, mT a vazão mássica total, v a velocidade, g a aceleração da gravidade, L o comprimento, Q a carga térmica e W a taxa de trabalho realizado.

No escoamento ao longo do trocador de calor, não há trabalho mecânico e as variações de energia potencial e cinética podem ser desprezadas.

A parcela referente à taxa de transferência de calor pode ser calculada por:

$$dQ = U dA (T_H - T) \quad (11)$$

Sabendo que:

$$dA = N_{tt} \pi D dL \quad (12)$$

Substituindo a Equação 12 nas Equações 10 e 11, obtém-se:

$$\frac{d\dot{H}}{dL} = N_{tt} \pi D U (T_H - T) \quad (13)$$

onde U é o coeficiente global de transferência de calor, T_H é a temperatura da corrente quente, N_{tt} é o número de tubos, L é o comprimento, D é o diâmetro e A é área.

O coeficiente global de transferência de calor foi calculado pela seguinte equação (INCROPERA et al., 2008):

$$U = \frac{1}{\left(\frac{D_e}{D_i}\right)\left(\frac{1}{h_i}\right) + \left(\frac{D_e}{D_i}\right)R_{fi} + \frac{D_e \ln(D_e/D_i)}{2k_w} + R_{fe} + \left(\frac{1}{h_e}\right)} \quad (14)$$

sendo D_e o diâmetro externo do tubo, D_i o diâmetro interno do tubo, k_w a condutividade térmica da parede, R_{fe} a resistência de depósito externa, R_{fi} a resistência de depósito interna, h_i o coeficiente de transferência de calor por convecção interno e h_e o coeficiente de transferência de calor por convecção externo.

- Cálculo do coeficiente de convecção interno

Nessa região, a transferência de calor pode ocorrer de duas maneiras distintas. Quando a temperatura da parede (T_w) é inferior à temperatura de início da ebulição nucleada ($T_{w\text{onb}}$), a transferência de calor está associada apenas à corrente de líquido em movimento, visto que não há ebulição. A outra forma é quando a temperatura da parede é superior à

temperatura de início da ebulição nucleada, ocorrendo a ebulição nucleada sub-resfriada, tal como mencionado anteriormente. Assim, tem-se:

⇒ Quando T_w é inferior a $T_{W_{onb}}$:

O número de Nusselt para o escoamento do líquido foi calculado pela Equação 15, retirada de ESDU (*Engineering Sciences Data Unit*) (1967) apud SMITH (1986):

$$Nu = 0,02246Re^{0,795}Pr^{(0,495-0,0225 \ln(Pr))} \quad (15)$$

Essa equação possui as seguintes restrições:

$$4000 < Re < 10^6 \quad (16)$$

$$0,4 < Pr < 300 \quad (17)$$

$$L > 40D \quad (18)$$

onde:

$$Re_l = \frac{D_l v \rho_l}{\mu_l} \quad (19)$$

$$Pr_l = \frac{\mu_l C_{p_l}}{k_l} \quad (20)$$

$$Nu_l = \frac{h_l D}{k_l} \quad (21)$$

sendo μ_l a viscosidade do líquido, C_{p_l} a capacidade calorífica do líquido, ρ_l a massa específica do líquido, k_l a condutividade térmica do líquido, Re o número de Reynolds, Pr o número de Prandtl e Nu o número de Nusselt.

⇒ Quando T_w é superior a $T_{W_{onb}}$:

Quando essa condição ocorre, o cálculo do coeficiente de ebulição interno é descrito por duas contribuições: a contribuição da convecção forçada (h_{cb}) e a contribuição da ebulição nucleada (h_{nb}).

$$h_i = h_{cb} + (h_{nb}S) \quad (22)$$

em que h_i é coeficiente de convecção interno, h_{cb} é o coeficiente de ebulição convectiva, h_{nb} é o coeficiente de ebulição nucleada e s é o fator de supressão.

O fator de supressão na ebulição nucleada está associado à redução da espessura da subcamada viscosa na camada limite turbulenta. Com a redução da espessura dessa subcamada, o gradiente de temperatura na parede aumenta e o crescimento das bolhas é exposto ao fluido mais frio, o que reduz o número de sítios de nucleação ativos (CHEN,1996).

✓ Contribuição da ebulição convectiva (h_{cb})

A contribuição da convecção forçada foi calculada pelo produto entre o coeficiente de convecção forçada no líquido (h_l) e um fator de amplificação (F) que é uma função da intensificação da convecção forçada devido à mudança de fase da corrente em escoamento (SMITH, 1986). Uma vez que a corrente como um todo neste caso permanece no estado líquido, nas condições da ebulição nucleada sub-resfriada esse fator é igual a 1.

✓ Contribuição da ebulição nucleada (h_{nb})

A contribuição da ebulição nucleada está diretamente ligada à formação de bolhas. Essa contribuição pode ser calculada da seguinte forma (PALEN, 1983):

$$h_{nb} = h_{nb1} F_c^{3,33} \quad (23)$$

em que h_{nb} é coeficiente de ebulição nucleada, h_{nb1} é o coeficiente de ebulição nucleada em um tubo isolado e F_c é um fator relativo à presença de uma mistura.

O cálculo de h_{nb1} pode ser realizado da seguinte forma:

$$h_{nb1} = 1,4 \cdot 10^{-8} P_c^{2,3} (T_w - T_{sat})^{2,33} F_p^{3,33} \quad (24)$$

onde P_c é a pressão crítica, T_w é a temperatura da parede, T_{sat} é a temperatura de saturação e F_p é o fator relativo à pressão.

F_p pode ser calculado pela seguinte expressão:

$$F_p = 1,8 \left(\frac{P}{P_c} \right)^{0,17} \quad (25)$$

O fator relativo à presença de uma mistura (Fc) é dado por:

$$Fc = \exp((Torv - Tbol)^{-0,027}) \quad (26)$$

em que Torv é a temperatura de orvalho e Tbol é a temperatura de bolha.

O fator de supressão da ebulição na região 2 pode ser calculado da seguinte forma:

$$s = \frac{T_w - T_{sat}}{T_w - T} \quad (27)$$

2.2.2.2 Cálculo da temperatura da parede do trocador de calor (T_w)

A temperatura da parede é uma variável muito importante no sistema, uma vez que, faz-se necessária para identificação da condição da ebulição nucleada sub-resfriada.

Essa variável foi calculada utilizando o circuito térmico descrito a seguir. A resistência térmica equivalente (R_{eq}) é expressa através da associação de resistências descrito pela Equação 28 e Figura 11:

$$R_{eq} = R_{conv,e} + R_{depósito,e} + R_{cond} + R_{depósito,i} + R_{conv,i} \quad (28)$$

onde R_{conv} são as resistências de convecção, R_{cond} é a resistência de condução na parede e $R_{depósito}$ são as resistências determinadas pela presença dos depósitos.

As resistências podem ser obtidas pelas seguintes equações:

$$R_{conv,e} = \frac{1}{h_e A_e} \quad (29)$$

$$R_{depósito,e} = \frac{R_{f,e}}{A_e} \quad (30)$$

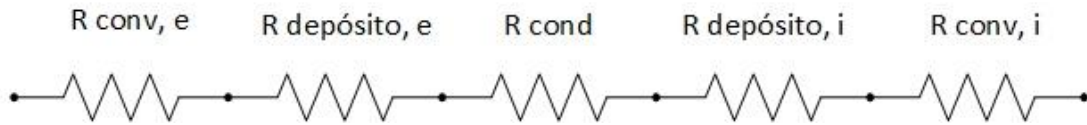
$$R_{cond} = \frac{\ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2\pi L_t k_w} \quad (31)$$

$$R_{depósito,i} = \frac{R_{f,i}}{A_i} \quad (32)$$

$$R_{conv,i} = \frac{1}{h_i A_i} \quad (33)$$

em que L_t é o comprimento do tubo, h_e é coeficiente de convecção externa, A_e é a área externa, $R_{f,e}$ é a resistência de incrustação externa, D_e é o diâmetro externo, k_w é a condutividade térmica da parede, h_i é coeficiente de convecção interna, A_i é a área interna, $R_{f,i}$ é a resistência de incrustação interna e D_i é o diâmetro interno.

Figura 11 – Representação esquemática da resistência equivalente



Fonte: O autor, 2016.

Sabendo-se que:

$$A_e = \pi D_e L_t \quad (34)$$

$$A_i = \pi D_i L_t \quad (35)$$

substituindo as Equações 34 e 35 nas Equações 29,30, 31, 32 e 33, temos:

$$R_{conv,e} = \frac{1}{h_e \pi D_e L_t} \quad (36)$$

$$R_{depósito,e} = \frac{R_{f,e}}{\pi D_e L_t} \quad (37)$$

$$R_{cond} = \frac{\ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2\pi L_t k_w} \quad (38)$$

$$R_{depósito,i} = \frac{R_{f,i}}{\pi D_i L_t} \quad (39)$$

$$R_{conv,i} = \frac{1}{h_i \pi D_i L_t} \quad (40)$$

Para o cálculo da temperatura da parede, pode-se igualar a taxa de transferência de calor do fluido quente até a parede à taxa de transferência de calor da parede até o fluido frio (temperatura do sistema):

$$\frac{T_H - T_w}{R_{conv,e} + R_{depósito,e} + R_{cond} + R_{depósito,i}} = \frac{T_w - T}{R_{conv,i}} \quad (41)$$

Fazendo as substituições das resistências, obtém-se a equação do cálculo de T_w :

$$\frac{T_H - T_w}{\frac{1}{h_e \pi D_e L_t} + \frac{R_{f,e}}{\pi D_e L_t} + \frac{\ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2\pi L_t k_w} + \frac{R_{f,i}}{\pi D_i L_t}} = \frac{T_w - T}{\frac{1}{h_i \pi D_i L_t}} \quad (42)$$

Simplificando:

$$\frac{T_H - T_w}{\frac{1}{h_e D_e} + \frac{R_{f,e}}{D_e} + \frac{\ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2k_w} + \frac{R_{f,i}}{D_i}} = \frac{T_w - T}{\frac{1}{h_i D_i}} \quad (43)$$

2.2.2.3 Cálculo da temperatura da parede no início da ebulição nucleada (T_{wonb})

A temperatura de início da ebulição nucleada pode ser calculada pela correlação proposta por Frost e Dzakowic (1967) apud Smith (1986):

$$T_{wonb} = T_{sat} + \left(\frac{8\sigma q'' T_{sat}}{k_1 \Delta H^V \rho_g} \right)^{\frac{1}{2}} Pr_l \quad (44)$$

sendo k_1 a condutividade térmica do líquido, T_{sat} a temperatura de saturação, σ a tensão superficial, q'' o fluxo de calor por convecção, ρ_g a massa específica do gás, ΔH^V o calor de vaporização e Pr_l é o número de Prandtl do líquido.

2.2.2.4 Cálculo da taxa entalpia

O balanço de energia na região 2 indica como a variação da taxa de entalpia do líquido ocorre ao longo dessa região. A entalpia é uma função de estado e, portanto, o valor desta propriedade para uma dada substância ou mistura dependerá, além da temperatura e da pressão, do estado de agregação em que se encontra esta substância ou mistura, além da composição da respectiva fase.

A entalpia molar da fase líquida foi calculada pela seguinte expressão:

$$H^L(T, x) = H_{ref}^L + \int_{T_{ref}}^T \sum_{j=1}^n x_j Cp_{l_j(molar)}(T) dT + H^E(T, x) \quad (45)$$

onde H^L é a entalpia molar da fase líquida, H_{ref}^L é a entalpia molar de referência, x é a composição molar da fase líquida, H^E é a entalpia molar em excesso e $Cp_{l_j(molar)}(T)$ é a capacidade calorífica molar.

Fixando:

$$H_{ref}^L = \sum_{j=1}^n H_j^{L,sat}(T_{ref}) = 0 \quad (46)$$

sendo $H_j^{L,sat}(T_{ref})$ a entalpia de um líquido saturado para espécie j na temperatura de referência, tem-se:

$$H^L(T, x) = \int_{T_{ref}}^T \sum_{j=1}^n x_j Cp_{l_j(molar)}(T) dT + H^E(T, x) \quad (47)$$

A equação utilizada no balanço de energia é uma equação de taxa de entalpia, representada pela seguinte equação:

$$\dot{H} = \left(\int_{T_{ref}}^T \sum_{j=1}^n x_j C_{p_{l_j}}(T) dT + \frac{H^E(T,x)}{MM_{ml}} \right) mT \quad (48)$$

onde MM_{ml} é a massa molar da mistura líquida (kg/mol), mT é a vazão mássica total (kg/s), $C_{p_{l_j}}$ é a capacidade calorífica mássica e \dot{H} é a taxa de entalpia (J/s).

Os cálculos do C_p e do H^E serão descritos em itens subsequentes.

2.2.2.5 Balanço de energia mecânica monofásico

Nessa região, a equação do balanço de energia mecânica será equivalente aquela empregada no sistema monofásico, de acordo com a Equação 9, mesmo que haja a condição de ebulição nucleada sub-resfriada.

2.2.3 Região 3

A região 3 corresponde ao escoamento bifásico no interior do trocador de calor. O modelo aplicado à região 3 é composto pelas equações de balanço de energia, balanço de energia mecânica e balanço de massa. Outra equação utilizada corresponde ao cálculo da taxa de entalpia. Nessa região, também são necessárias as equações para o cálculo da temperatura da parede do trocador e do cálculo da temperatura de início da ebulição nucleada, visando verificar se há ebulição junto à parede. Essa região utiliza ainda durante a integração duas equações algébricas: uma para o cálculo do coeficiente de ebulição e outra para o cálculo da massa específica bifásica.

2.2.3.1 Balanço de energia mecânica bifásico

Para o escoamento bifásico, a Equação 9 necessita de algumas modificações:

$$-\frac{dP}{dL} = -\frac{G^2}{\rho_{tp}^2} \frac{d\rho_{tp}}{dL} + \rho_{tp} g \sin\theta + \varphi_{lo}^2 \frac{f G^2}{2 D \rho} \quad (49)$$

Na Equação 49, acrescentou-se a massa específica bifásica (ρ_{tp}) e o coeficiente φ_{lo}^2 , que são calculados utilizando metodologias descritas em Smith (1986), conforme descrito a seguir.

- Coeficiente φ_{lo}^2

Esse coeficiente é calculado para adequar o termo referente ao atrito monofásico para o escoamento bifásico através do método de Friedel (1979) apud Smith (1986).

$$\varphi_{lo}^2 = E + \frac{3,24FH}{Fr_{tp}^{0,045} We_{tp}^{0,035}} \quad (50)$$

onde E, F e H são parâmetros utilizados no cálculo do φ_{lo}^2 , Fr_{tp} é o número de Froude bifásico e We_{tp} é o número de Weber bifásico.

Os parâmetros da equação são calculados pelas seguintes equações:

$$E = (1 - x_g)^2 + x_g^2 \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right) \left(\frac{f_{go}}{f_{lo}} \right) \quad (51)$$

$$F = x_g^{0,78} (1 - x_g)^{0,24} \quad (52)$$

$$H = \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0,91} \left(\frac{\mu_g}{\mu_l} \right)^{0,19} \left(1 - \frac{\mu_g}{\mu_l} \right)^{0,7} \quad (53)$$

sendo x_g a fração vaporizada, ρ_l a massa específica do líquido, ρ_g a massa específica do vapor, μ_l a viscosidade do líquido, μ_g a massa específica do vapor, f_{go} o fator de atrito calculado para o escoamento de somente de vapor e f_{lo} o fator de atrito calculado para o escoamento de somente líquido.

O número de Froude bifásico (Fr_{tp}) é calculado por:

$$Fr_{tp} = \frac{G^2}{gD\rho_{tph}} \quad (54)$$

em que G é o fluxo mássico, g é aceleração da gravidade, D é a densidade e ρ_{tph} significa a massa específica bifásica homogênea e é calculada pela Equação 55:

$$\rho_{tph} = \left[\frac{x_g}{\rho_g} + \frac{(1-x_g)}{\rho_l} \right]^{-1} \quad (55)$$

A expressão para cálculo do número de Weber bifásico (We_{tp}) é:

$$We_{tp} = \frac{G^2 D}{\rho_{tph} \sigma} \quad (56)$$

sendo σ a tensão superficial.

2.2.3.2 Massa específica bifásica

A massa específica bifásica é calculada em função da massa específica do líquido e do gás; podendo ser calculada pela seguinte expressão:

$$\rho_{tp} = \rho_l(1 - \varepsilon_g) + \rho_g \varepsilon_g \quad (57)$$

sendo ρ_l a massa específica do líquido, ρ_g a massa específica do vapor e ε_g a fração ocupada pelo vapor:

$$\varepsilon_g = \frac{V_r}{V_r + u_r} \quad (58)$$

onde a razão entre vazões volumétricas (V_r) é dada por:

$$V_r = \left(\frac{x_g}{1-x_g} \right) \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right) \quad (59)$$

A razão de deslizamento (u_r) é estimada através de:

$$C_1 = 0,0273 We_{l0} Re_{l0}^{-0,51} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-0,08} \quad (60)$$

$$C_2 = \left(\frac{V_r}{1+V_r C_1} \right) - V_r C_1 \quad (61)$$

$$C_3 = 1,578 Re_{l0}^{-0,019} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{0,22} \quad (62)$$

$$u_r = \begin{cases} 1, & C_2 \leq 0 \\ u_r = 1 + C_3 C_2^{1/2}, & C_2 > 0 \end{cases} \quad (63)$$

onde C_1 , C_2 e C_3 são parâmetros, Re_{l0} é o número de Reynolds e We_{l0} é número de Weber. Os subscritos “lo” nas equações acima indicam que os respectivos grupos adimensionais são calculados na condição de toda a corrente escoando no estado líquido.

2.2.3.3 Balanço de energia no trocador de calor

O equacionamento do balanço de energia no trocador de calor é o mesmo descrito na subseção 2.2.2.1. Em comparação com a região 2, foram modificados os cálculos das contribuições do coeficiente de convecção interno, conforme descrito a seguir.

- Cálculo do coeficiente de convecção interno

A transferência de calor pode ser descrita por duas contribuições: a contribuição da convecção forçada (h_{cb}) e a contribuição da ebulição nucleada (h_{nb}). Conforme descrito pela Equação 22.

- ✓ Contribuição da ebulição convectiva (h_{cb})

A contribuição da convecção forçada foi calculada pelo produto entre o coeficiente de convecção forçada no líquido (h_l) e um fator de amplificação (F), função do parâmetro (X_{tt}) de Martinelli (LOCKHART e MARTINELLI, 1949 apud SMITH, 1986). Essa contribuição está associada à intensificação da convecção forçada pela mudança de fase.

$$h_{cb} = h_l F \quad (64)$$

onde:

$$F = \begin{cases} 1, & \frac{1}{X_{tt}} \leq 0,1 \\ 2,35 \left(0,213 + \frac{1}{X_{tt}}\right)^{0,736}, & \frac{1}{X_{tt}} > 0,1 \end{cases} \quad (65)$$

$$X_{tt} = \left(\frac{1-x_g}{x_g}\right)^{0,9} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l}\right)^{0,5} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g}\right)^{0,1} \quad (66)$$

sendo X_{tt} é o parâmetro de Martinelli, ρ_g a massa específica do vapor, ρ_l a massa específica do líquido, μ_l a viscosidade do líquido, μ_g a viscosidade do vapor e x_g é a fração vaporizada.

O coeficiente de convecção interno para o escoamento somente de líquidos foi calculado seguindo a Equação 21.

✓ Contribuição da ebulição nucleada (h_{nb})

Para a região onde ocorre a vaporização, as correlações para o cálculo da ebulição nucleada seguiram também seguiram a proposta de Mostinski (1963), onde o cálculo do coeficiente de convecção para ebulição nucleada em um tubo isolado foi calculado em função do fluxo de calor por convecção:

$$h_{nb1} = 0,00417 P_{c_{kPa}}^{0,69} q''^{0,7} F_p \quad (67)$$

onde h_{nb1} o coeficiente de convecção calculado para um tubo isolado, $P_{c_{kPa}}$ é a pressão crítica em kPa, q'' é o fluxo de calor por convecção e F_p é o fator relativo a pressão.

Sabendo-se que o fluxo de calor por convecção (q'') é dado por:

$$q'' = h_i(T_w - T) \quad (68)$$

sendo h_i o coeficiente de convecção de convecção interno.

Substituindo a Equação 68 em 67, temos:

$$h_{nb1} = 0,00417 P_{c_{kPa}}^{0,69} (h_b(T_w - T))^{0,7} F_p \quad (69)$$

O cálculo do h_{nb} , neste caso, é feito pela seguinte equação:

$$h_{nb} = h_{nb1} F_c \quad (70)$$

em que F_c é um fator relativo à presença de uma mistura e foi calculado pela Equação 25.

O h_i foi calculado pela Equação 22, sendo s calculado como sugerido por Collier (1983):

$$s = (1 + (2,53 \cdot 10^{-6} \text{Re}_{tp}^{1,17}))^{-1} \quad (71)$$

onde Re_{tp} é o número de Reynolds bifásico.

Da mesma maneira como na Região 2, a contribuição da ebulição nucleada só vai existir se $T_w > T_{w\text{onb}}$, caso contrário $h_{nb}=0$.

2.2.3.4 Cálculo da taxa de entalpia bifásica

O balanço de energia na região 3 indica como a variação da taxa de entalpia do líquido e do vapor ocorrem ao longo dessa região.

A taxa da entalpia dessa região foi calcula pela seguinte equação:

$$\dot{H} = \left(\int_{T_{\text{ref}}}^T \sum_{j=1}^n x_j C_{p_j}(T) dT + \frac{H^E(T,x)}{MM_{ml}} \right) mL + \left(\frac{\sum_{j=1}^n y_j \Delta H_j^{\text{vap}}(T_{\text{ref}})}{MM_{mg}} + \int_{T_{\text{ref}}}^T \sum_{j=1}^n y_j C_{p_j}^{g,i}(T) dT \right) mV \quad (72)$$

onde MM_{mg} é a massa molar da mistura na fase vapor (kg/mol), mL é a vazão mássica de líquido (kg/s), mV é a vazão mássica de vapor (kg/s), \dot{H} é a taxa de entalpia (W), ΔH_j^{vap} é o calor de vaporização (J/mol), $C_{p_j}^{g,i}$ é a capacidade calorífica mássica da fase vapor (J/kg), x é a fração molar da fase líquida e y é a fração molar da fase vapor.

O cálculo referente à parcela da taxa de entalpia da fase líquida foi descrito na seção 2.2.2.4. Já a entalpia molar da fase vapor foi calculada pela seguinte expressão:

$$H^V(T_1, y) = H_{\text{ref}}^V + \left(\int_{T_{\text{ref}}}^{T_1} \sum_{j=1}^n y_j C_{p_j}^{g,i}(T) dT \right) MM_{ml} \quad (73)$$

sendo H^V a entalpia molar da fase vapor e H_{ref}^V a entalpia molar de referência do vapor.

$$H_{\text{ref}}^V = H_{\text{ref}}^L + \sum_{j=1}^n y_j \Delta H_j^{\text{vap}}(T_{\text{ref}}) \quad (74)$$

Logo,

$$H^V(T, y) = \sum_{j=1}^n y_j \Delta H_j^{\text{vap}}(T_{\text{ref}}) + \left(\int_{T_{\text{ref}}}^T \sum_{j=1}^n y_j C_{p_j}^{g,i}(T) dT \right) MM_{ml} \quad (75)$$

Os cálculos de ΔH_j^{vap} e dos $Cp_j^{\text{g.i.}}(T)$, $Cp_{l_j}(T)$ são descritos em itens posteriores. As integrais foram calculadas numericamente, utilizando a regra do trapézio composta (CHAPRA e CANALE, 2011).

Para calcular as composições de cada fase a cada ponto da integração, faz-se necessário utilizar uma rotina de cálculo *flash*.

- Cálculo do *flash* T,P

O *flash* utilizado neste trabalho é um *flash* no qual a temperatura e a pressão são especificadas, e a composição global (z) é conhecida. As equações de um *flash* T,P para n componentes são:

$$K_j = \frac{y_j}{x_j} \quad j=1,2,\dots,n \quad (76)$$

onde x_j é a composição da fase líquida, y_j é a composição da fase vapor e K_j é a razão de equilíbrio que indica a tendência de uma espécie em se dividir parcialmente nas fases líquida e vapor.

Sendo \mathcal{L} a fração de líquido com composição da fase líquida x_j e \mathcal{V} a fração vaporizada, com composição da fase vapor y_j . O balanço material pode ser representado como descrito a seguir:

$$\mathcal{L} + \mathcal{V} = 1 \quad (77)$$

$$z_j = x_j \mathcal{L} + y_j \mathcal{V} \quad j= 1, 2, \dots, n \quad (78)$$

Combinando essas duas equações, tem-se:

$$z_j = x_j(1 - \mathcal{V}) + y_j \mathcal{V} \quad j= 1, 2, \dots, n \quad (79)$$

Substituindo a Equação 77 na Equação 79 e rearranjando, tem-se:

$$y_j = \frac{z_j K_j}{1 + \mathcal{V}(K_j - 1)} \quad j= 1, 2, \dots, n \quad (80)$$

$$x_j = \frac{z_j}{1 + \mathcal{V}(K_j - 1)} \quad j= 1, 2, \dots, n \quad (81)$$

Como $\sum_{j=1}^n x_j = \sum_{j=1}^n y_j = 1$, tem-se:

$$\sum_{j=1}^n \frac{z_j K_j}{1+\mathcal{V}(K_j-1)} = 1 \quad (82)$$

$$\sum_{j=1}^n \frac{z_j}{1+\mathcal{V}(K_j-1)} = 1 \quad (83)$$

Rearranjando as equações anteriores, obtém-se:

$$F_y = \sum_{j=1}^n \frac{z_j K_j}{1+\mathcal{V}(K_j-1)} - 1 = 0 \quad (84)$$

$$F_x = \sum_{j=1}^n \frac{z_j}{1+\mathcal{V}(K_j-1)} - 1 = 0 \quad (85)$$

A solução do problema de *flash* T, P é obtida ao encontrar o valor de \mathcal{V} que satisfaça F_x ou F_y iguais a zero. Entretanto, uma função mais apropriada para esse cálculo é a diferença: $F_y - F_x = F$, que possui derivada sempre negativa, facilitando a convergência do método numérico:

$$F = \sum_{j=1}^n \frac{z_j(K_j-1)}{1+\mathcal{V}(K_j-1)} = 0 \quad (86)$$

A Equação 87 é conhecida como equação de Rachford-Rice, e sua derivada pode ser calculada da seguinte forma:

$$\frac{dF}{d\mathcal{V}} = - \sum_{j=1}^n \frac{z_j(K_j-1)^2}{[1+\mathcal{V}(K_j-1)]^2} \quad (87)$$

Para a determinação do \mathcal{V} , através do método de Newton, o valor predito para \mathcal{V} na iteração $k+1$ é obtido recursivamente através da seguinte relação:

$$\mathcal{V}^{k+1} = \mathcal{V}^k - \frac{F(\mathcal{V}^k)}{\frac{dF}{d\mathcal{V}}(\mathcal{V}^k)} \quad (88)$$

Neste trabalho, utilizaram-se as seguintes estimativas iniciais (SMITH et al., 2007):

$$\mathcal{V}^1 = \frac{T_{bol}-T}{T_{bol}-T_{orv}} \quad (89)$$

$$Y^1 = \left(\frac{T-T_{bol}}{T_{bol}-T_{orv}} \right) (Y_{bol} - Y_{orv}) + Y_{orv} \quad (90)$$

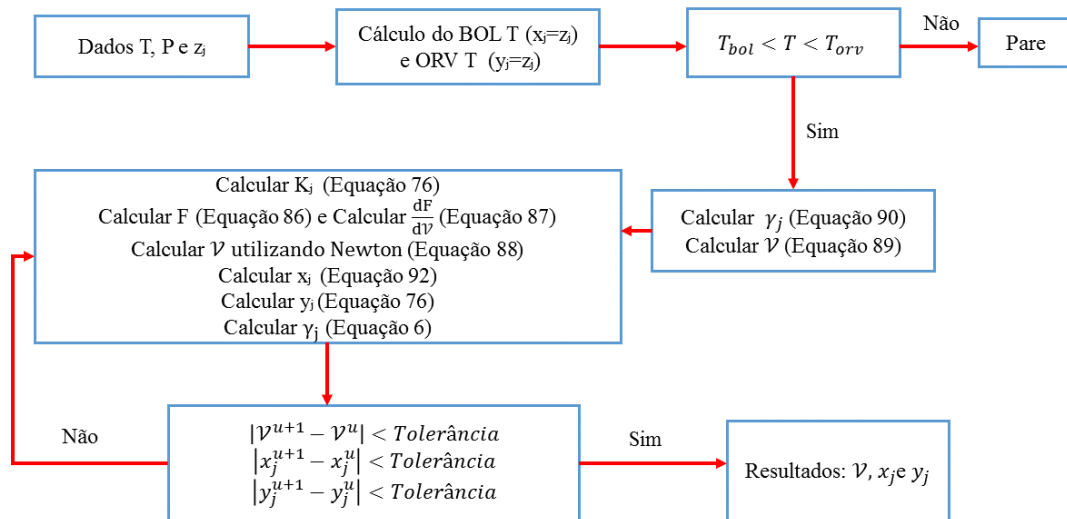
E como critério de parada:

$$|F| < \text{tolerância} \quad (91)$$

A rotina de cálculo envolve cálculos iterativos, que estão representados na Figura 12 (SMITH et al., 2007).

Dois rotinas fazem-se necessárias no cálculo desse *flash*, são elas: cálculo do ponto de bolha e o cálculo do ponto de orvalho. Além disso, essas duas rotinas são necessárias para delimitar a região bifásica durante a simulação do processo.

Figura 12 - Diagrama de blocos para o cálculo de um *flash* T, P



Fonte: Adaptado de SMITH et al., 2007

⇒ Ponto de Bolha

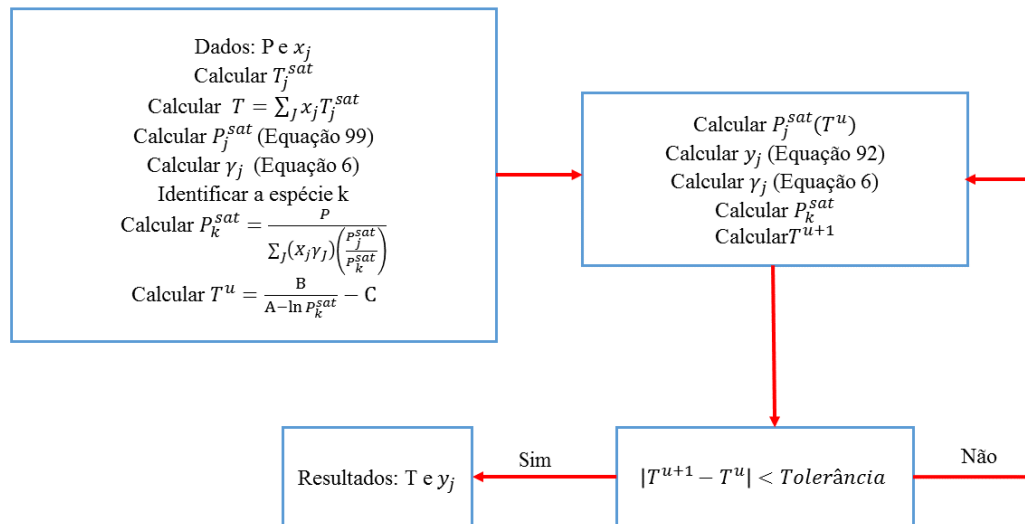
Esse trabalho utilizou o cálculo de bolha T (BOL T), no qual obtém-se a composição da fase vapor (y_j) e a temperatura (T), a partir dos dados da composição da fase líquida (x_j) e da pressão (P). A rotina de cálculo envolve cálculos iterativos, que estão representados na Figura 13.

⇒ Ponto de Orvalho

No ponto de orvalho, utilizou-se um cálculo de orvalho T (ORV T), no qual se calculou x_j e T, dados y_j e P. A rotina de cálculo envolve cálculos iterativos, que estão representados na Figura 14.

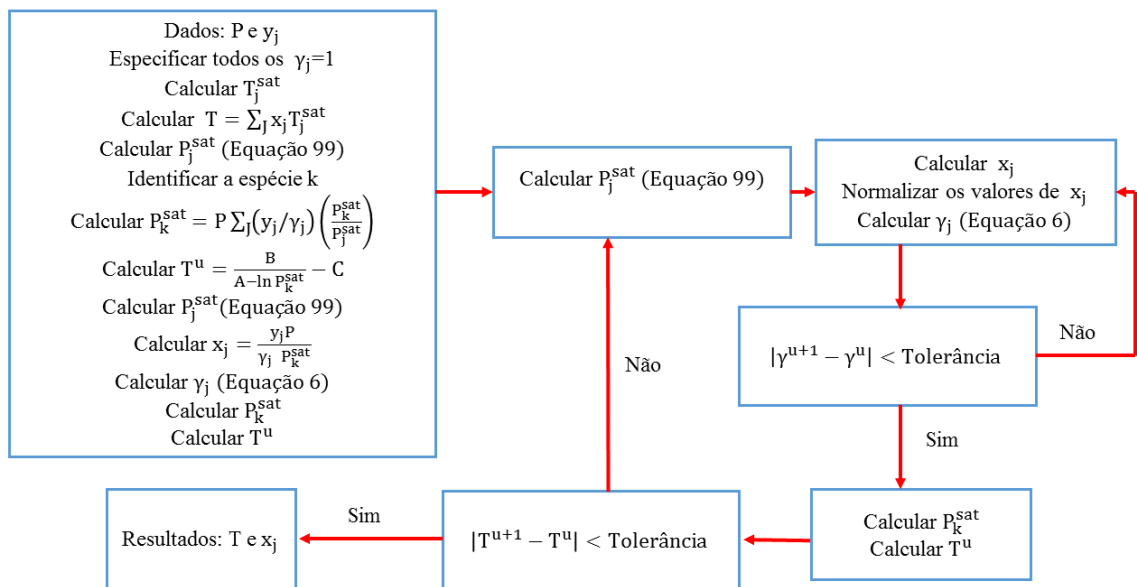
Outros conceitos e equações que se fazem necessários nesse balanço de energia, é o equilíbrio líquido e vapor existente nessa região, bem como o cálculo da entalpia molar em excesso.

Figura 13- Diagrama de blocos para o cálculo do ponto de bolha T (BOL T)



Fonte: Adaptado de SMITH et al., 2007

Figura 14- Diagrama de blocos para o cálculo do ponto de orvalho T (ORV T)



Fonte: Adaptado de SMITH et al., 2007

⇒ Equilíbrio Líquido/Vapor (ELV)

✓ Lei de Raoult Modificada

Utilizada quando a hipótese de solução ideal é deixada de lado, considerando-se os desvios da idealidade de soluções da fase líquida, esta lei é obtida a partir do critério de igualdade de potenciais químicos, conforme já mencionado na Seção 1.2 (SMITH et al., 2007).

$$y_j P = x_j \gamma_j P_j^{\text{sat}} \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (92)$$

onde x_j é a composição da fase líquida, y_j é a composição da fase vapor, γ_j é o coeficiente de atividade e P_j^{sat} é a pressão de saturação.

⇒ Entalpia molar em excesso

A entalpia molar em excesso (H^E) auxilia na compreensão da natureza das interações das forças intermoleculares, através de interações físicas e químicas (WILKINSON, 1980 apud VIOLA, 2011), que são influenciadas pela forma, tamanho e natureza química das moléculas (PANAYTION, 1984 apud VIOLA, 2011).

A relação fundamental das propriedades em excesso é dada por (SMITH et al., 2007):

$$d\left(\frac{nG^E}{RT}\right) = \left(\frac{nV^E}{RT}\right) dP - \left(\frac{nH^E}{RT^2}\right) dT + \sum_{j=1}^n \ln(\gamma_j) dn_j \quad (93)$$

onde G^E é a energia de Gibbs em excesso, R é a constante dos gases, V^E é o volume molar em excesso, n é o número de mols.

Analisando a Equação 93 e aplicando o conceito de diferencial total, para pressão P e composição da fase líquida constantes, obtém-se a Equação 94:

$$H^E = -RT^2 \left(\frac{\partial(G^E/RT)}{\partial T} \right)_{P,x} \quad (94)$$

2.2.3.5 Balanço de massa

A relação entre a quantidade de cada fase em escoamento foi representada por duas equações:

$$mT = mV + mL \quad (95)$$

$$mV = \left(\frac{\mathcal{V} MM_{mg}}{\mathcal{V} MM_{mg} + (1-\mathcal{V}) MM_{ml}} \right) mT \quad (96)$$

em que mV é a vazão mássica de vapor, mL é a vazão mássica de líquido, MM_{mg} é a massa molar da mistura gasosa, MM_{ml} é a massa molar da mistura líquida e \mathcal{V} é a fração vaporizada em base molar.

2.2.4 Região 4

O modelo referente à região 4 é similar ao modelo utilizado na região 3, embora sem os termos associados a transferência de calor, visto que se considera que o isolamento da tubulação de retorno à coluna garante condições adiabáticas.

2.2.5 Inserção da bomba

Ao modelar e simular um refeedor com circulação forçada, insere-se uma bomba na região 1, conforme é possível observar na Figura 15. Neste caso, o comprimento L2 fica subdividido em dois trechos.

Essa nova região levou à inclusão de duas novas equações, em comparação com a modelagem e simulação do termossifão vertical. A primeira equação está associada à carga de pressão fornecida pela bomba:

$$\text{Head} = \frac{P_f - P_i}{\rho g} \quad (97)$$

onde Head é a carga de pressão (m), P_f é a pressão a jusante da bomba, P_i é a pressão a montante da bomba, ρ é a massa específica e g é a aceleração da gravidade.

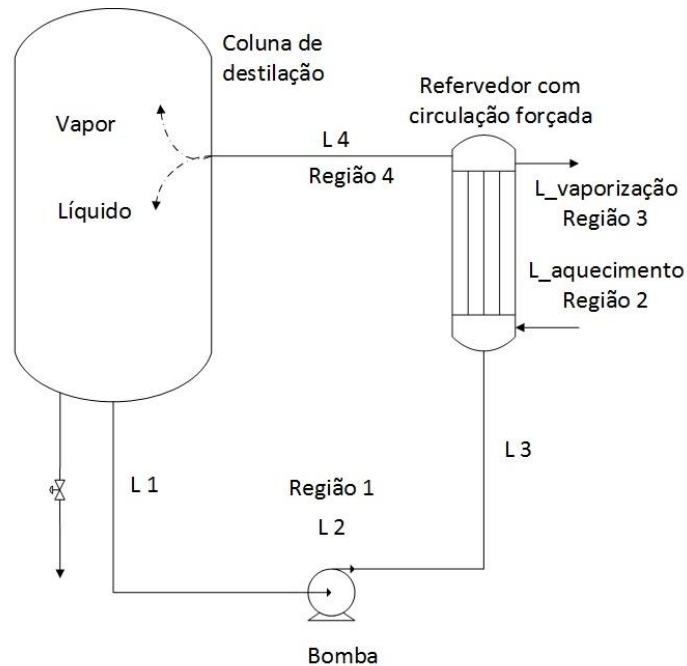
A outra equação utilizada está relacionada com a curva característica real da bomba. Segundo Costa (2013), essa equação pode ser escrita na forma de um polinômio de 2º grau.

$$\text{Head} = a_{\text{bomba}} + b_{\text{bomba}} Q_v + c_{\text{bomba}} Q_v^2 \quad (98)$$

onde a_{bomba} , b_{bomba} e c_{bomba} são parâmetros da equação da bomba e Q_v é a vazão volumétrica.

A pequena variação de temperatura do líquido decorrente da passagem pela bomba foi desprezada.

Figura 15–Representação esquemática do refeedor com circulação forçada



Fonte: O autor, 2016.

2.3 Equações complementares ao modelo

2.3.1 Equação de Antoine

Para estimar a temperatura de saturação em função da pressão, foi utilizada a Equação de Antoine.

$$T_{\text{sat}} = \frac{B_{\text{ant}}}{A_{\text{ant}} - \ln P} - C_{\text{ant}} \quad (99)$$

As constantes de Antoine (A_{ant} , B_{ant} e C_{ant}) foram retiradas de Smith et al. (2007), sendo P em kPa e T em °C.

2.3.2 Fator de atrito

O fator de atrito monofásico foi calculado pela equação de Serghides (1984) apud Ouyang e Aziz (1996), que calcula o fator de atrito de Fanning. Como o fator de atrito utilizado neste trabalho é o fator de Darcy, e sabendo que o fator de Fanning é um quarto do fator de atrito de Darcy, a Equação 100 calcula o fator de atrito de Darcy.

$$f = \left[A - \frac{(B-A)^2}{(C-2B+A)} \right]^{-2} \quad (100)$$

sendo:

$$A = -2\log \left[\left(\frac{\varepsilon}{3,7D} \right) + \left(\frac{12}{Re} \right) \right] \quad (101)$$

$$B = -2\log \left[\left(\frac{\varepsilon}{3,7D} \right) + \left(\frac{2,51 A}{Re} \right) \right] \quad (102)$$

$$C = -2\log \left[\left(\frac{\varepsilon}{3,7D} \right) + \left(\frac{2,51 B}{Re} \right) \right] \quad (103)$$

Onde A, B, C são parâmetros da equação de Serghides, ε é a rugosidade absoluta, Re é o número de Reynolds e D é o diâmetro.

2.3.3 Massa específica

2.3.3.1 Massa específica da mistura de líquidos

O cálculo da massa específica foi realizado através do uso da Equação modificada de Rackett para o cálculo do volume molar da mistura (REID et al.,1987).

O procedimento utilizado para o cálculo da massa específica de uma mistura de líquidos de composição (x) na temperatura T, segundo o método de Rackett, inicia-se através do cálculo do volume molar (V_m):

$$V_m = R \left(\sum_{j=1}^n \frac{x_j T_{cj}}{P_{cj}} \right) Z_{RAm}^{[1+(1-T_r)^{\frac{2}{7}}]} \quad (104)$$

onde R é a constante real dos gases, T_c é a temperatura crítica, P_c é a pressão crítica, Z_{RAm} é a constante de Rackett modificada, V_m é o volume molar e T_r é a temperatura reduzida.

A temperatura reduzida (T_r) dada por:

$$T_r = \frac{T}{T_{cm}} \quad (105)$$

A temperatura crítica da mistura (T_{cm}) foi calculada segundo:

$$T_{cm} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \phi_j \phi_k T_{cjk} \quad (106)$$

A fração de volume superficial (ϕ_i):

$$\phi_j = \frac{x_j V_{cj}}{\sum_{j=1}^n x_j V_{cj}} \quad j=1,2,\dots,n \quad (107)$$

onde V_{c_j} é o volume crítico.

As regras de combinação utilizadas são:

$$T_{c_{jk}} = (1 - k_{jk})(T_{c_j}T_{c_k})^{\frac{1}{2}} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (108)$$

$$1 - k_{jk} = \frac{8(V_{c_j}V_{c_k})^{1/2}}{(V_{c_j}^{\frac{1}{3}} + V_{c_k}^{\frac{1}{3}})^3} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (109)$$

onde k_{jk} é um parâmetro de interação binária.

Por fim, o cálculo da massa específica da mistura líquida pode ser realizado pela seguinte equação:

$$\rho_l = \frac{\sum_{j=1}^n MM_j x_j}{V_m} \quad (110)$$

2.3.3.2 Massa específica da mistura de gases

Uma vez que os sistemas abordados nesta dissertação estão todos a baixas pressões (como é comum em separações por destilação), o procedimento para o cálculo da massa específica da mistura de gases na fase vapor, de composição da fase vapor (y), na temperatura T e na pressão P , foi realizado a partir do modelo de mistura de gases ideais:

$$\rho_g = \frac{P \sum_{j=1}^n MM_j y_j}{RT} \quad (111)$$

2.3.4 Viscosidade

2.3.4.1 Viscosidade da mistura de líquidos

A viscosidade da mistura de líquidos é calculada pelo método de Teja e Rice (1981) apud Reid et al. (1987), para a composição de líquido e temperatura T , baseada no fator de compressibilidade da mistura.

$$\ln(\mu_m \epsilon_m) = \ln(\mu \epsilon)^{(r_1)} + [\ln(\mu \epsilon)^{(r_2)} - \ln(\mu \epsilon)^{(r_1)}] \left(\frac{\omega_m - \omega^{(r_1)}}{\omega^{(r_2)} - \omega^{(r_1)}} \right) \quad (112)$$

onde μ_{ml} é a viscosidade da mistura de líquidos (cP), μ é a viscosidade do líquido puro (cP), ω_m é o fator acêntrico da mistura, ϵ_m e ϵ são parâmetros e (r_1) e (r_2) se referem a dois fluidos de referência.

Cálculo do parâmetro (ϵ):

$$\epsilon = \frac{V_c^{\frac{2}{8}}}{(T_c MM)^{\frac{1}{2}}} \quad (113)$$

Cálculo do parâmetro (ϵ_m):

$$\epsilon_m = \frac{V_{cm}^{\frac{2}{8}}}{(T_{cm} MM_{ml})^{\frac{1}{2}}} \quad (114)$$

Cálculo dos parâmetros de mistura:

Volume crítico da mistura (V_{cm}):

$$V_{cm} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n x_j x_k V_{cjk} \quad (115)$$

Temperatura crítica da mistura (T_{cm}):

$$T_{cm} = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n x_j x_k T_{cjk} V_{cjk}}{V_{cm}} \quad (116)$$

Massa molar da mistura (MM_{ml}):

$$MM_{ml} = \sum_{j=1}^n x_j MM_j \quad (117)$$

Cálculo do fator acêntrico da mistura (ω_m):

$$\omega_m = \sum_{j=1}^n x_j \omega_j \quad (118)$$

As regras de combinação utilizadas são as seguintes:

$$V_{cjk} = \frac{(V_{cj}^{\frac{1}{3}} + V_{ck}^{\frac{1}{3}})^3}{8} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (119)$$

$$T_{cjk} V_{cjk} = \psi_{jk} (T_{ck} T_{cj} V_{cj} V_{ck})^{1/2} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (120)$$

onde T_c é a temperatura crítica, V_c é o volume crítico e ψ_{ij} é um parâmetro de interação binária da ordem da unidade (o valor utilizado foi 1).

As viscosidades dos líquidos puros (μ_i) são obtidas de acordo com Reid et al. (1987):

$$\mu_i = \exp\left(A_\mu + \frac{B_\mu}{C_\mu + T}\right) \quad (121)$$

onde A_μ , B_μ , C_μ são parâmetros da equação da viscosidade dos líquidos puros.

2.3.4.2 Viscosidade da mistura de gases

A viscosidade da mistura dos gases é obtida através do método de Chung et al. (1984 e 1986), apud Reid et al. (1987). O procedimento utilizado para o cálculo da viscosidade de uma mistura de gases de composição y , na temperatura T e pressão P , é realizado pela seguinte equação:

$$\mu_{mg} = \frac{26,69 F_{cm} (MM_m T)^{1/2}}{\sigma_m^2 \Omega_v} \quad (122)$$

onde Ω_v é integral da colisão para viscosidades, σ_m é o diâmetro molecular (Å), F_{cm} é um fator, T é a temperatura (K), MM_m é a massa molar da mistura (g/mol) e μ_{mg} é a viscosidade da mistura gasosa (μP).

Sendo $\Omega_v = f(T'_m)$.

Alguns parâmetros importantes são abaixo definidos:

Temperatura da mistura (T'_m):

$$T'_m = \frac{T}{\left(\frac{\epsilon}{k}\right)_m} \quad (123)$$

Integral da colisão para viscosidades (Ω_v):

$$\Omega_v = 1,16145 (T'_m)^{-0,14874} + 0,52487 e^{(-0,77320 T'_m)} + 2,16178 e^{(-2,43787 T'_m)} \quad (124)$$

Regras de mistura:

Diâmetro molecular (σ_m):

$$\sigma_m^3 = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n y_j y_k \sigma_{jk}^3 \quad (125)$$

Razão entre a energia característica e a constante de Boltzman- (ϵ/k)_m:

$$\left(\frac{\epsilon}{k}\right)_m = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n y_j y_k \left(\frac{\epsilon_{jk}}{k}\right) \sigma_{jk}^3}{\sigma_m^3} \quad (126)$$

Massa molar da mistura (MM_{mg}):

$$MM_{mg} = \left[\frac{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n y_j y_k \left(\frac{\epsilon_{jk}}{k}\right) \sigma_{jk}^2 MM_{jk}^{1/2}}{\left(\frac{\epsilon}{k}\right)_m \sigma_m^2} \right]^2 \quad (127)$$

Fator acêntrico da mistura (ω_m):

$$\omega_m = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n y_j y_k \omega_{jk} \sigma_{jk}^3}{\sigma_m^3} \quad (128)$$

Momento de dipolo da mistura (μ_m):

$$\mu_m^4 = \sigma_m^3 \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \left(\frac{y_j y_k \mu_j^2 \mu_k^2}{\sigma_{jk}^3} \right) \quad (129)$$

Fator de associação da mistura (κ_m):

$$\kappa_m = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n y_j y_k \kappa_{jk} \quad (130)$$

Temperatura crítica da mistura (T_{cm}):

$$T_{cm} = 1,2593 \left(\frac{\epsilon}{k} \right)_m \quad (131)$$

Momento dipolar adimensional (μ_{rm}):

$$\mu_{rm} = \frac{131,3 \mu_m}{(V_{cm} T_{cm})^{1/2}} \quad (132)$$

Fator F_{cm} :

$$F_{cm} = 1 - 0,275 \omega_m + 0,059035 \mu_{rm}^4 + \kappa_m \quad (133)$$

As regras de combinação utilizadas são:

$$\sigma_{jj} = \sigma_j = 0,809 V_{cj}^{1/3} \quad j=1,2,\dots,n \quad (134)$$

$$\sigma_{jk} = \xi_{jk} (\sigma_j \sigma_k)^{1/2} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (135)$$

$$\frac{\epsilon_{jj}}{k} = \frac{\epsilon_j}{k} = \frac{T_{cj}}{1,2593} \quad j=1,2,\dots,n \quad (136)$$

$$\frac{\epsilon_{jk}}{k} = \zeta_{jk} \left(\frac{\epsilon_j}{k} \frac{\epsilon_k}{k} \right)^{1/2} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (137)$$

$$\omega_{jj} = \omega_j \quad j=1,2,\dots,n \quad (138)$$

$$\omega_{jk} = \frac{\omega_j + \omega_k}{2} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (139)$$

$$\kappa_{jj} = \kappa_j \quad j=1,2,\dots,n \quad (140)$$

$$\kappa_{jk} = (\kappa_j \kappa_k)^{1/2} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (141)$$

$$MM_{jk} = \frac{2MM_j MM_k}{M_j + M_k} \quad j=1,2,\dots,n \quad (142)$$

2.3.5 Condutividade térmica

2.3.5.1 Condutividade térmica da mistura de líquidos

A condutividade da mistura de líquidos é calculada pelo método de Li (1976) apud Reid et al. (1987):

$$k_{ml} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n \phi_j \phi_k k_{jk} \quad (143)$$

onde ϕ_j é a fração de volume superficial, calculado pela Equação 107.

A regra de combinação utilizada é:

$$k_{jk} = 2(k_{jl}^{-1} + k_{kl}^{-1})^{-1} \quad j=1,2,\dots,n \quad k=1,2,\dots,n \quad (144)$$

As condutividades dos líquidos puros são obtidas, segundo Faghri e Zhang (2006):

$$k_{jl} = \exp(k_{lA} + k_{lB}T + k_{lC}T^2 + k_{lD}T^3 + k_{lE}T^4 + k_{lF}T^5) \quad j=1,2,\dots,n \quad (145)$$

onde k_{lA} , k_{lB} , k_{lC} , k_{lD} , k_{lE} e k_{lF} são parâmetros ajustáveis.

2.3.6 Tensão superficial

A tensão superficial das substâncias puras foram calculadas por um polinômio em função da temperatura, segundo Faghri e Zhang (2006):

$$\sigma_j = \exp(\sigma_A + \sigma_B T + \sigma_C T^2 + \sigma_D T^3 + \sigma_E T^4 + \sigma_F T^5) \quad j=1,2,\dots,n \quad (146)$$

em que σ_A , σ_B , σ_C , σ_D , σ_E e σ_F são parâmetros ajustáveis.

Para a mistura, uma vez que não foi encontrada uma correlação para sistemas multicomponentes, utilizou-se a seguinte regra de mistura:

$$\sigma_m = \sum_{j=1}^n x_j \sigma_j \quad (147)$$

Devido a limitações na literatura pesquisada sobre modelos generalizados para a tensão superficial de misturas, a proposta acima foi adotada, mesmo sabendo-se que existe um erro associado à diferença de concentração entre a superfície e o interior da fase, existindo um excesso de um dos componentes na superfície.

2.3.7 Capacidade calorífica

A capacidade calorífica pode ser calculada através de um polinômio função da temperatura, segundo Faghri e Zhang (2006).

$$Cp_{g_j} = \exp(Cp_{gA} + Cp_{gB}T + Cp_{gC}T^2 + Cp_{gD}T^3 + Cp_{gE}T^4 + Cp_{gF}T^5) \quad j=1,2,\dots,n \quad (148)$$

$$Cp_{l_j} = \exp(Cp_{l_A} + Cp_{l_B}T + Cp_{l_C}T^2 + Cp_{l_D}T^3 + Cp_{l_E}T^4 + Cp_{l_F}T^5) \quad j=1,2,\dots,n \quad (149)$$

onde $Cp_{g_A}, Cp_{g_B}, Cp_{g_C}, Cp_{g_D}, Cp_{g_E}, Cp_{g_F}, Cp_{l_A}, Cp_{l_B}, Cp_{l_C}, Cp_{l_D}, Cp_{l_E}$ e Cp_{l_F} são parâmetros ajustáveis.

Para a mistura, desprezou-se a capacidade calorífica em excesso, utilizando-se a seguinte regra de mistura:

$$Cp_{m_g} = \sum_{j=1}^n y_j Cp_{j_g} \quad (150)$$

$$Cp_{m_l} = \sum_{j=1}^n x_j Cp_{j_l} \quad (151)$$

2.3.8 Calor latente de vaporização

O calor de vaporização foi calculado através do método de Riedel (1974) apud Reid et al. (1987), pela seguinte expressão:

$$\Delta H_{vb} = 1,093 R T_c \left[T_{br} \frac{\ln P_c - 1,013}{0,930 - T_{br}} \right] \quad (152)$$

onde ΔH_{vb} é a entalpia de vaporização no ponto de ebulição normal (J/ mol), P_c é a pressão crítica (bar), T_c é a temperatura crítica e T_{br} é a razão entre o ponto de ebulição normal (T_b) e T_c :

$$T_{br} = \frac{T_b}{T_c} \quad (153)$$

A variação do ΔH^V (entalpia de vaporização na T do sistema) com a temperatura foi expressa utilizando a Relação de Watson (THEK e STIEL, 1966 e 1967 apud REID et al., 1987), segundo a Equação 154:

$$\Delta H^V = \Delta H_{vT_b} \left(\frac{1-T}{1-T_b} \right)^n \quad (154)$$

onde T é a temperatura e n é um parâmetro cujo valor normalmente é fixado entre 0,375 e 0,380. O valor utilizado neste trabalho foi $n = 0,380$.

3 SIMULAÇÃO

O sistema foi modelado e resolvido utilizando o *Software Scilab*, versão 5.5.2. Para a resolução do sistema algébrico-diferencial, utilizou-se o integrador DASSL (Petzold, 1983) existente no *software*. O *software* de simulação foi executado em um computador com a seguinte configuração: Windows 8.1 *Home Single Language* 64 bits, Processador Intel® Core i7-4510U CPU 2.00Ghz, 8.00GB de memória RAM.

Este capítulo descreve a abordagem utilizada na simulação do sistema e na simulação estocástica.

3.1 Simulação do sistema

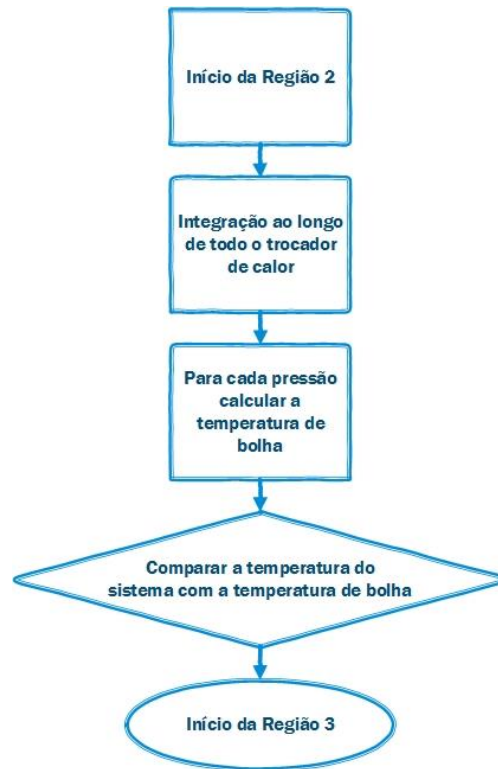
A simulação do sistema foi realizada ao longo de todo o trajeto. As equações descritas no capítulo 2 foram organizadas por regiões e resolvidas pelo integrador.

A determinação do início da região 3 foi realizada calculando o ponto no qual a temperatura de bolha (T_{bol}) se igualasse a temperatura (T), calculando T_{bol} para cada pressão ao longo de todo o trocador de calor. Essas temperaturas de bolha foram comparadas com a temperatura em cada ponto do trocador. Quando a temperatura do sistema intercepta a temperatura de bolha, inicia-se a Região 3.

Na região 3, a pressão e o comprimento iniciais foram obtidos através de uma interpolação linear na temperatura. A temperatura de início dessa região foi determinada a partir de T_{bol} , com um pequeno incremento de 0,2 K, com o objetivo de evitar problemas numéricos.

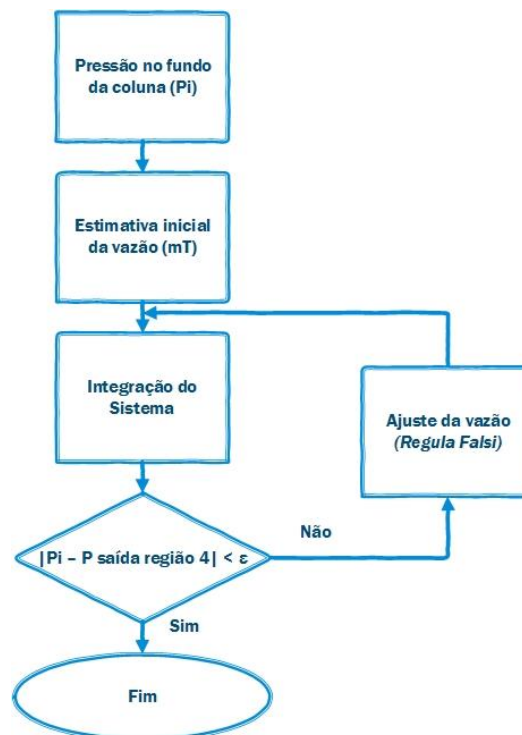
As rotinas necessitam de uma convergência externa na vazão mássica total, com o objetivo que as pressões se igualem no ponto inicial, ou seja, a pressão na saída na superfície da coluna de líquido deve ser igual à do retorno da mistura bifásica. O método numérico de convergência externa (ver Figura 17) utilizado foi o método *Regula Falsi*. (LAGE e PINTO, 2005).

Figura 16 – Representação esquemática do início da região 3



Fonte: O autor, 2016.

Figura 17 – Representação esquemática do *loop* externo



Fonte: O autor, 2016.

As variáveis (Tabela 2) utilizadas no início de cada região são sempre as finais da região anterior. Na região 2 utilizam-se duas novas variáveis, a temperatura da parede (T_w) e a temperatura da parede no início da ebulição nucleada (T_{w0b}). Os valores iniciais para essas variáveis foram calculados conforme descrito nos itens 2.2.2.2 e 2.2.2.3, utilizando o método de convergência de Newton-Raphson multivariável, implementado no Scilab. Já para a região 3, as novas variáveis calculadas utilizando esse método são T_w , T_{w0b} , h_i inicial descrito na seção 2.2.3.3 e o ρ_{p0} inicial foi calculado segundo a metodologia descrita em 2.2.3.2(LAGE e PINTO, 2005).

3.2 Simulação estocástica

Uma simulação pode ser determinística ou estocástica. Na simulação determinística, o comportamento de todos os componentes é conhecido. Já na simulação estocástica têm-se alguns ou todos os componentes influenciados por efeitos aleatórios, simulados com o uso de distribuições de probabilidade (DIWEKAR e RUBIN, 1991).

A simulação estocástica é a técnica de gerar amostras aleatoriamente e analisar a influência dessas amostras em variáveis de saída.

Esse tipo de simulação aumenta o volume de informações em comparação com a simulação determinística. Antes do início da simulação estocástica, as funções de distribuição para as variáveis de entrada devem ser encontradas. A simulação em si é constituída por dois passos que são repetidos o número de vezes desejado: (i) geração da variável de entrada seguindo a função da distribuição adotada, e (ii) a simulação determinística (MELAAEN e OWREN, 1996).

A Figura 18 mostra uma representação esquemática da simulação estocástica. As variáveis de saída podem não seguir a curva Gaussiana (BUSSAB e MORETTIN, 2004), devido à não linearidade do sistema.

Figura 18- Representação esquemática da simulação estocástica



Fonte: O autor, 2016.

A variável operacional utilizada como variável de entrada foi a pressão no fundo da coluna). A nova pressão influenciada pelo número aleatório foi calculada da seguinte maneira:

$$P_i = P_{\text{fundo}} + DP \cdot \text{num}_{\text{rand}} \cdot P_{\text{fundo}} \quad (155)$$

onde P_{fundo} é a pressão no fundo da coluna no caso base, DP é o desvio-padrão e num_{rand} é um número aleatório sorteado de acordo com a distribuição normal padronizada.

Esses valores de P_i foram utilizados como novos valores de pressão inicial, sendo esta a variável de entrada. Com esse valor, a simulação foi calculada, gerando um ponto para a construção do histograma a cada simulação.

4 RESULTADOS

Com o objetivo de aplicar os algoritmos desenvolvidos, criou-se um exemplo referente à vaporização de uma mistura binária (acetona e água).

4.1 Dados de entrada

A Tabela 3 tem-se o serviço térmico e a Tabela 4 apresenta os dados do sistema.

Tabela 3- Dados das correntes

	Fluido	Acetona e Água
Lado dos Tubos	Pressão de entrada (kPa)	164,3
	Resistência de incrustação (m ² K/W)	0,00053
	Composição global referente a acetona	0,2
	Fluido	Vapor d'água saturado
Lado do Casco	Temperatura de entrada (K)	460
	Resistência de incrustação (m ² K/W)	0,000088

Fonte: O autor, 2016.

Tabela 4 – Dados do sistema

Condutividade térmica da parede [W/m K]	50
Coefficiente de convecção externa (h _e) [W/m ² K]	8500

Fonte: O autor, 2016.

A pressão inicial foi calculada utilizando como referência o fundo de uma coluna de destilação atmosférica. Esse valor foi obtido utilizando o valor de queda de pressão por estágio sugerida por Coker (2007), considerando-se 33 estágios de equilíbrio.

A pressão foi calculada pela seguinte equação:

$$P_i = P_{\text{fundo}} = P_{\text{interface}} + \rho gh \quad (156)$$

onde:

$$P_{\text{interface}} = P_{\text{topo}} + \Delta P_{\text{condensador}} + \Delta P_{\text{estágios}} N^{\circ}_{\text{estágios}} \quad (157)$$

O valor obtido para a pressão inicial foi de 164,3 kPa.

A temperatura inicial (T_i) foi calculada utilizando a rotina de temperatura de bolha implementada, em função da pressão inicial (P_i) e da composição global (z_i).

As constantes utilizadas nas equações estão descritas na Tabela 5, 6 e 7.

Tabela 5 – Constantes utilizadas na modelagem para água e acetona

Parâmetros	Água	Acetona	Eq.
Tsat	$A_{ant}=16,3872$	$A_{ant}=14,3145$	99
P (kPa) e Tsat (°C)	$B_{ant}=3885,70$	$B_{ant}=2756,22$	
	$C_{ant}=230,17$	$C_{ant}=228,06$	
μ (Cp) e T (K)	$A_{\mu}=-3,7188$	$A_{\mu}=-3,37955$	121
	$B_{\mu}=578,919$	$B_{\mu}=553,403$	
	$C_{\mu}=-135,546$	$C_{\mu}=-46,9657$	
k_l (W/m K) e T (°C)	$k_{lA} = -5,6528 \cdot 10^{-1}$	$k_{lA} = 1,6958$	145
	$k_{lB} = 3,1743 \cdot 10^{-3}$	$k_{lB} = -1,1504 \cdot 10^{-3}$	
	$k_{lC} = -1,4392 \cdot 10^{-5}$	$k_{lC} = 1,2496 \cdot 10^{-5}$	
	$k_{lD} = -1,3224 \cdot 10^{-8}$	$k_{lD} = -3,0675 \cdot 10^{-7}$	
	$k_{lE} = 2,5534 \cdot 10^{-10}$	$k_{lE} = 2,9314 \cdot 10^{-10}$	
	$k_{lF} = -6,4454 \cdot 10^{-12}$	$k_{lF} = 4,9935 \cdot 10^{-12}$	
σ_j (N/m) e T (°C)	$\sigma_A = 4,3438$	$\sigma_A = 3,2514$	146
	$\sigma_B = -3,0664 \cdot 10^{-3}$	$\sigma_B = -3,9116 \cdot 10^{-3}$	
	$\sigma_C = 2,0743 \cdot 10^{-5}$	$\sigma_C = -1,0745 \cdot 10^{-5}$	
	$\sigma_D = -2,5499 \cdot 10^{-7}$	$\sigma_D = -4,2728 \cdot 10^{-7}$	
	$\sigma_E = 1,0377 \cdot 10^{-9}$	$\sigma_E = 4,4000 \cdot 10^{-9}$	
	$\sigma_F = -1,7156 \cdot 10^{-12}$	$\sigma_F = -1,7122 \cdot 10^{-11}$	

Cp_{l_j} (J/ kg K) e T (°C)	$Cp_{l_A} = 1,4338$	$Cp_{l_A} = 7,463 \cdot 10^{-1}$	149
	$Cp_{l_B} = 2,2638 \cdot 10^{-4}$	$Cp_{l_B} = 1,0064 \cdot 10^{-3}$	
	$Cp_{l_C} = 4,2819 \cdot 10^{-6}$	$Cp_{l_C} = 6,3091 \cdot 10^{-6}$	
	$Cp_{l_D} = -2,7411 \cdot 10^{-8}$	$Cp_{l_D} = 3,0226 \cdot 10^{-8}$	
	$Cp_{l_E} = -1,4699 \cdot 10^{-10}$	$Cp_{l_E} = -5,0475 \cdot 10^{-10}$	
	$Cp_{l_F} = -2,2589 \cdot 10^{-13}$	$Cp_{l_F} = 2,2900 \cdot 10^{-12}$	
Cp_{g_j} (J/ kg K) e T (°C)	$Cp_{g_A} = 6,2084 \cdot 10^{-1}$	$Cp_{g_A} = 1,9452 \cdot 10^{-1}$	148
	$Cp_{g_B} = 3,1420 \cdot 10^{-3}$	$Cp_{g_B} = 2,2900 \cdot 10^{-3}$	
	$Cp_{g_C} = 1,6110 \cdot 10^{-6}$	$Cp_{g_C} = -8,6330 \cdot 10^{-7}$	
	$Cp_{g_D} = 4,0156 \cdot 10^{-8}$	$Cp_{g_D} = -2,0672 \cdot 10^{-8}$	
	$Cp_{g_E} = -3,4841 \cdot 10^{-11}$	$Cp_{g_E} = -1,9250 \cdot 10^{-10}$	
	$Cp_{g_F} = -2,0709 \cdot 10^{-13}$	$Cp_{g_F} = 6,5969 \cdot 10^{-13}$	

Fonte: O autor, 2016.

Tabela 6 - Parâmetros de interação binária do modelo de Wilson (1- acetona e 2- água)

¹ Formulação original (Eq. 7)	² Formulação modificada (Eq.8)
$a_{1,2} = -291,27$	$a_{1,2} = -0,4374$
	$a_{2,1} = -9,7051$
$a_{2,1} = -1448,01$	$b_{1,2} = -291,079$
	$b_{2,1} = 2719,214$

Fontes: ¹GMEHLING et al., 1981-1988 apud SMITH et al., 2007 e ²AspenTech, 2006.

Tabela 7- Volume molar utilizado na Formulação original do modelo de Wilson (1- acetona e 2- água)

Formulação original (Eq. 7)
$V_2 = 74,05$
$V_1 = 18,07$

Fontes: GMEHLING et al., 1981-1988 apud SMITH et al., 2007

4.1.1 Dados da simulação do termossifão vertical

Neste trocador, a vaporização ocorre nos tubos e os dados mecânicos do trocador de calor podem ser observados na Tabela 8.

Tabela 8- Dados mecânicos do termossifão vertical

Comprimento dos tubos (m)	1,2192
Número de tubos	29
Diâmetro interno dos tubos (m)	0,02622
Diâmetro externo dos tubos (m)	0,03175

Fonte: O autor, 2016.

Na Figura 10 e na Tabela 9, é possível ver a configuração do sistema.

Tabela 9- Configuração do sistema do termossifão vertical

Comprimento Região 1	
L1 (m)	2
L2 (m)	2
L3 (m)	1,5
Comprimento Região 2 + Região 3	
L_tubos (m)	1,2192
Comprimento Região 4	
L4 (m)	0,9586

Fonte: O autor, 2016.

4.1.2 Dados da simulação do refeedor com circulação forçada

Nesta simulação, o refeedor utilizado é do tipo com circulação forçada. Os dados mecânicos do trocador de calor utilizados são descritos na Tabela 10.

Tabela 10 - Dados mecânicos do refervedor com circulação forçada

Comprimento dos tubos (m)	1,2192
Número de tubos	158
Diâmetro interno dos tubos (m)	0,01575
Diâmetro externo dos tubos (m)	0,01905

Fonte: O autor, 2016.

Os parâmetros utilizados na Equação 98, referente à curva característica da bomba, foram obtidos a partir de um perfil típico de curva da bomba, capaz de fornecer uma carga hidráulica compatível com o serviço (Tabela 11).

Tabela 11 –Parâmetros utilizados na curva característica real da bomba

Parâmetros	Valores	Unidades
a	3,27	[m]
b	-0,22	[s/m ²]
c	300	[s ² /m ⁵]

Fonte: O autor, 2016.

Na Tabela 12 podemos observar a configuração do sistema utilizada.

Tabela 12 - Configuração do sistema do refervedor com circulação forçada

Comprimento Região 1	
L1 (m)	1,1
L2 (m)	1,8
L3 (m)	1,5
Comprimento Região 2+ Região 3	
L_tubos (m)	1,2192
Comprimento Região 4	
L4 (m)	0,6921
L_bomba	0,5

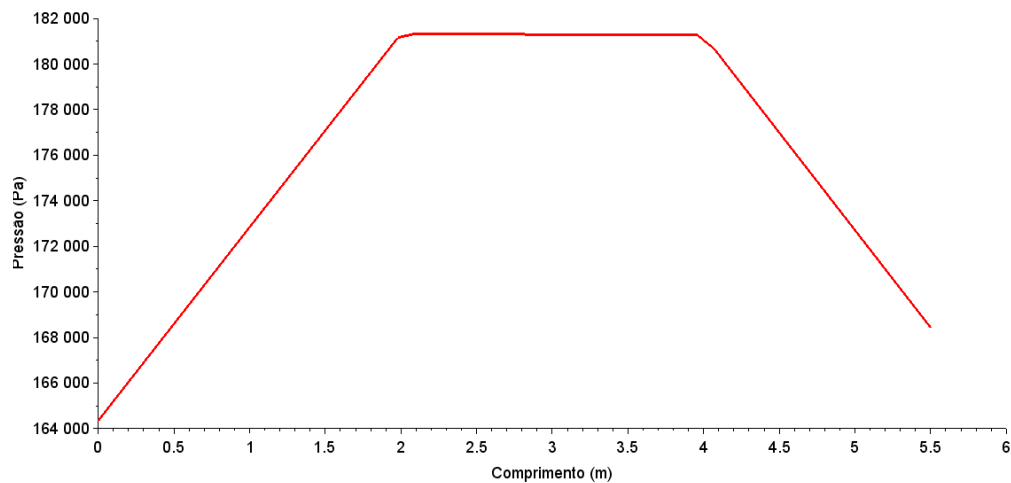
Fonte: O autor, 2016.

4.2 Resultados das simulações dos refervedores

4.2.1 Simulação do termosifão vertical

As Figuras 19, 20, 21e 22 apresentam os perfis ao longo da Região 1, Região 2, Região 3 e Região 4.

Figura 19 – Perfil de pressão ao longo do comprimento da região 1

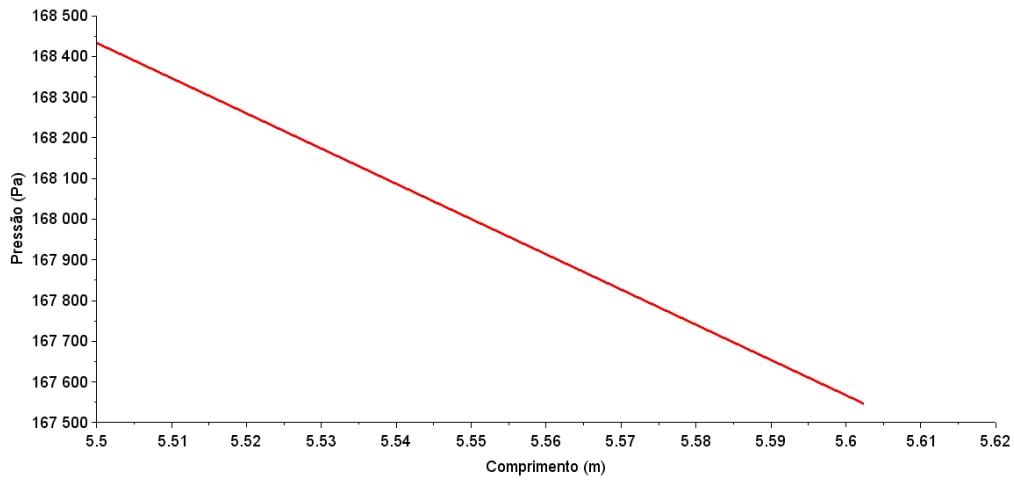


Fonte: O autor, 2016.

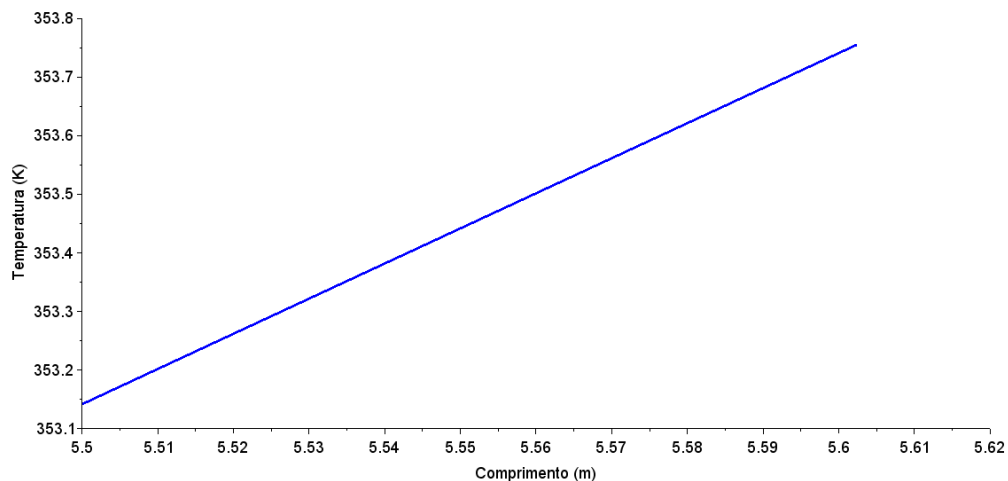
A Figura 19, descreve o perfil de pressão ao longo da região 1. Nesse gráfico pode-se observar que até 2 metros a pressão aumenta devido ao escoamento descendente nessa região, onde ocorre a transformação da energia potencial em energia de pressão. De 2 a 4 metros, a pressão fica aproximadamente constante, pois o escoamento está na parte horizontal dessa região. Já nos 1,5 metros finais (4 a 5,5 m), a pressão cai como consequência do escoamento ascendente.

A região 2 é caracterizada pelo aquecimento do fluido, antes do início da vaporização. A pressão (Figura 20 (a)) cai devido ao escoamento ascendente. A temperatura aumenta, já que essa região é onde ocorre a zona de aquecimento no refervedor (Figura 20 (b)).

Figura 20 - Perfis de pressão e temperatura ao longo do comprimento da região 2



(a)



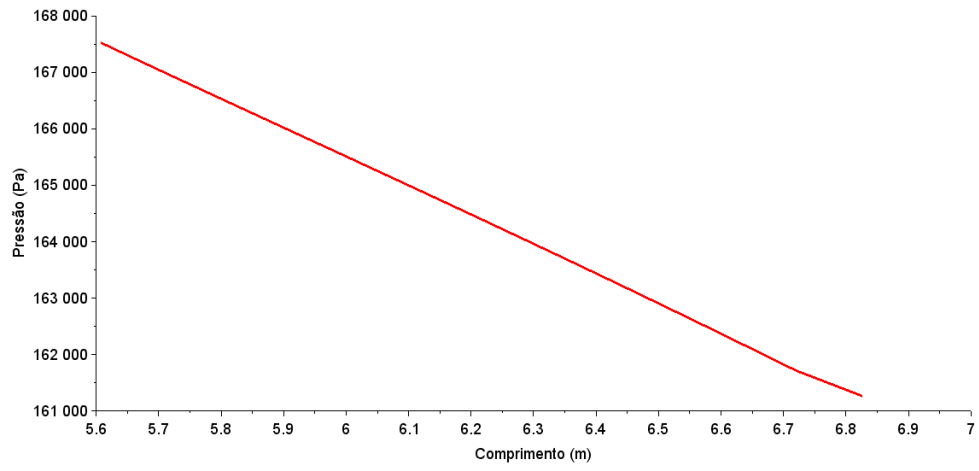
(b)

Legenda: (a) perfil de pressão da região 2 e(b) perfil de temperatura da região 2.

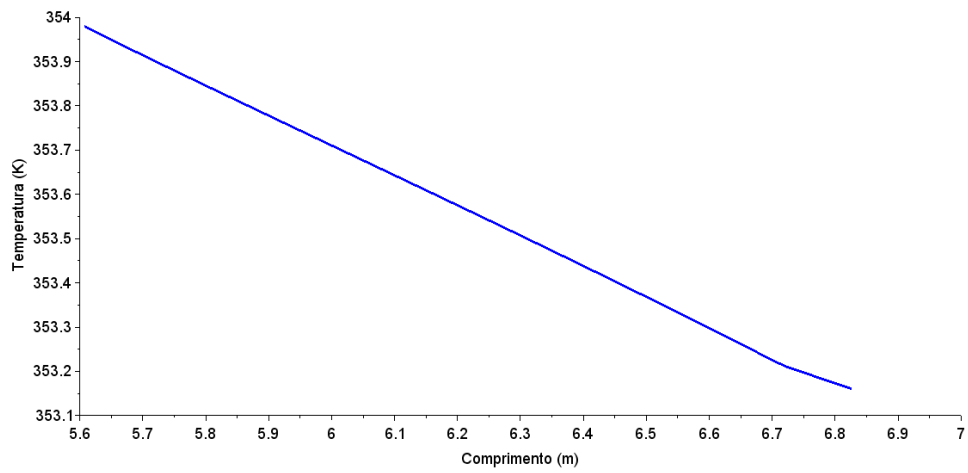
Fonte: O autor, 2016.

Na região 3, pode-se observar uma redução da pressão, decorrente do escoamento ascendente, conforme explicado anteriormente (Figura 21 (a)). Ocorre também a redução da temperatura este comportamento está associado à variação da temperatura de bolha atrelada a dois fatores: variação da pressão e vaporização. Já os resultados apresentados nas Figuras 21 (c) e (d) estão relacionadas com a vaporização que ocorre nessa região, ou seja, o decréscimo da vazão de líquido e o conseqüente aumento da vazão de vapor.

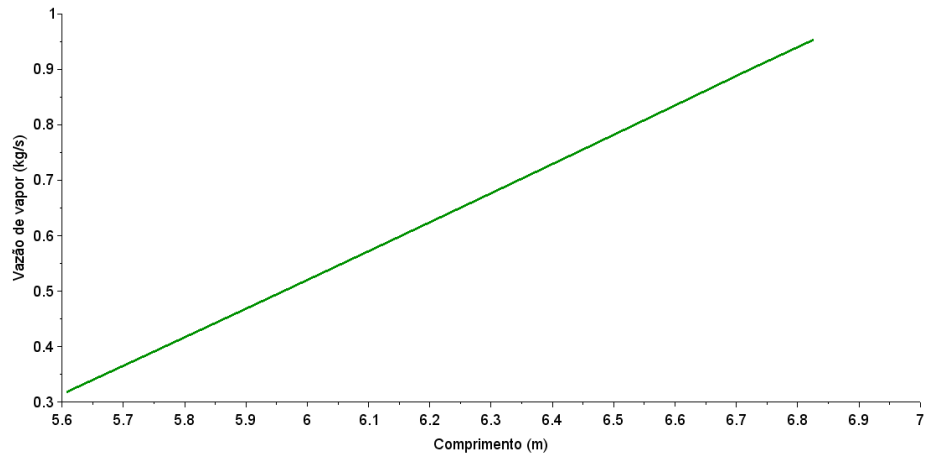
Figura 21- Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 3



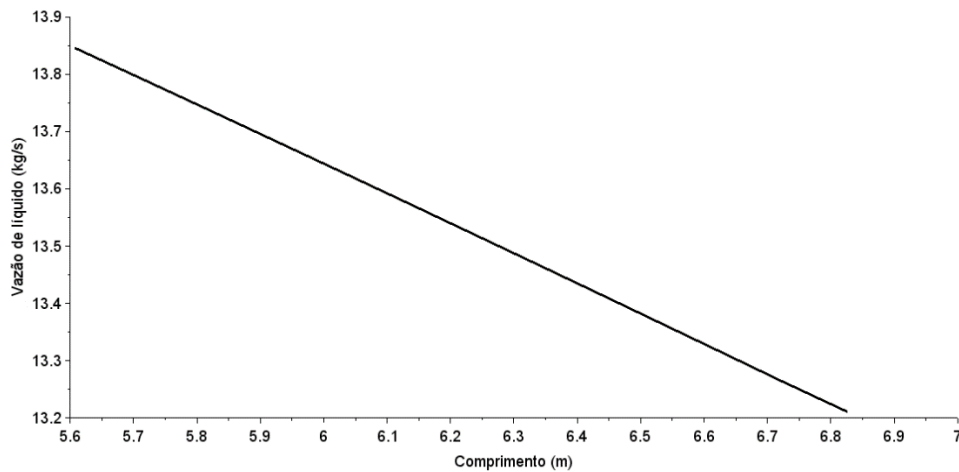
(a)



(b)



(c)



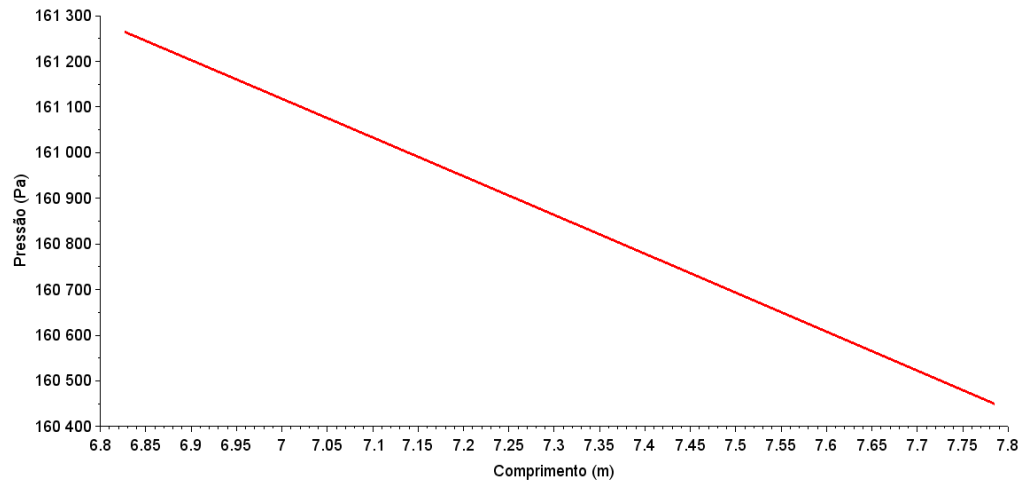
(d)

Legenda: (a) perfil de pressão da região 3, (b) perfil de temperatura da região 3, (c) perfil de vazão mássica de vapor da região 3, (d) perfil de vazão mássica de líquido da região 3

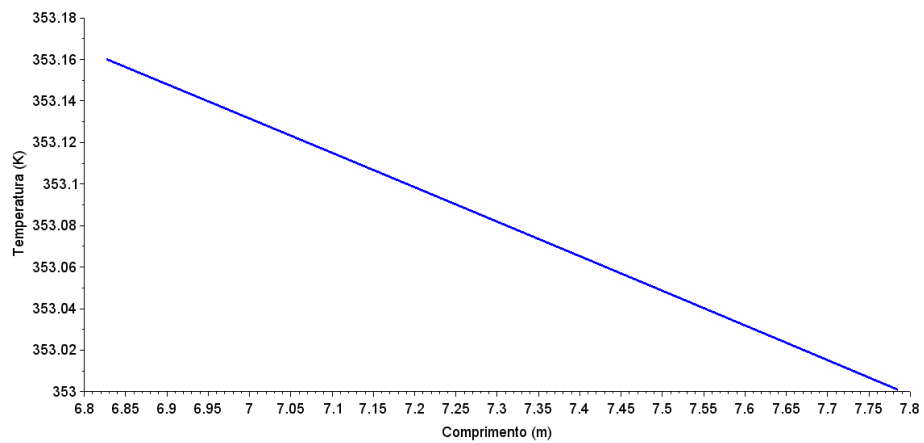
Fonte: O autor, 2016.

A região 4 é caracterizada pela redução na pressão associada à perda de carga do escoamento bifásico (Figura 22 (a)). A temperatura cai aproximadamente 0,05 K, associada à variação de pressão nessa região (Figura 22 (b)). As variações observadas nas Figuras 22(c) e (d) estão relacionadas com a pequena vaporização que ocorre nessa região.

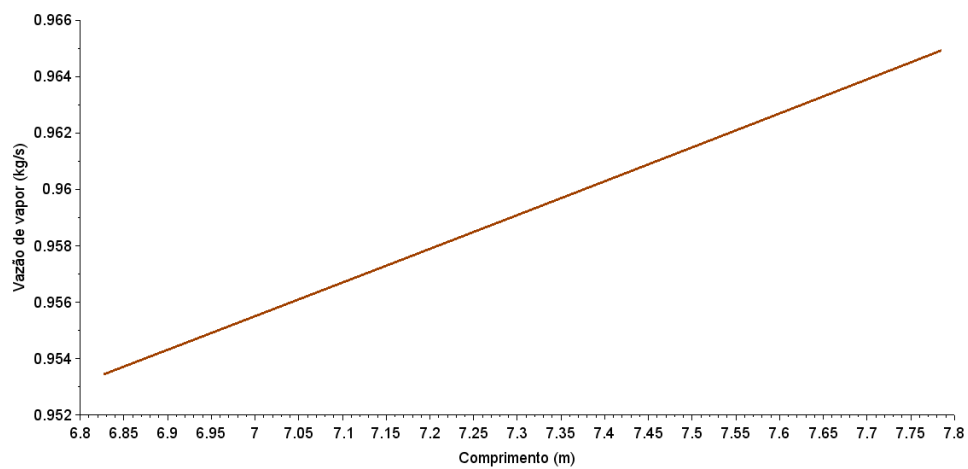
Figura 22 - Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 4



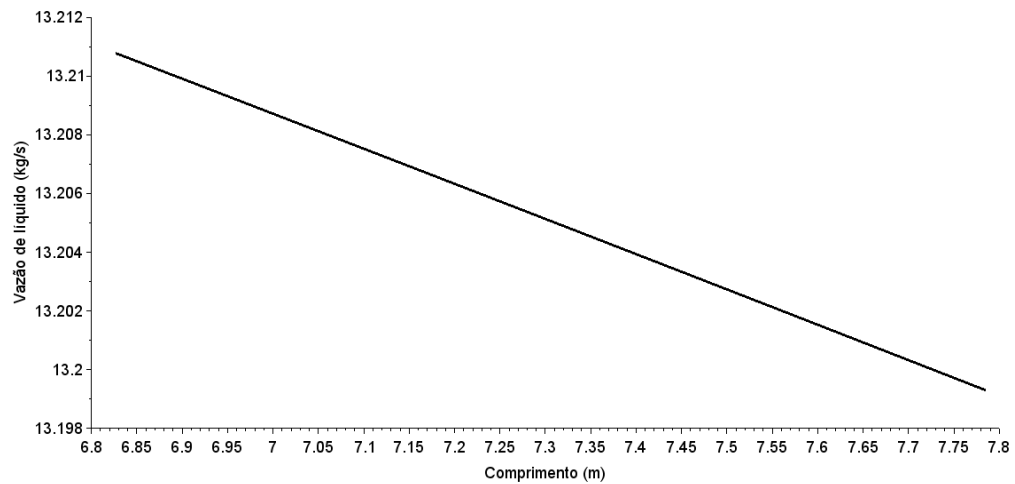
(a)



(b)



(c)



(d)

Legenda: (a) perfil de pressão da região 4, (b) perfil de temperatura da região 4, (c) perfil de vazão mássica de vapor da região 4, (d) perfil de vazão mássica de líquido da região 4

Fonte: O autor, 2016.

Os resultados obtidos na saída da região 4, ao final da simulação, após a convergência do *loop* externo, são apresentados na Tabela 13.

Tabela 13 - Resultados da simulação do termossifão vertical

Variáveis	Resultados
Vazão mássica convergida (kg/s)	14,16
Carga térmica do Refervedor (kW)	621,5
Fração mássica vaporizada (%)	6,73

Fonte: O autor, 2016.

Um dos objetivos do trabalho era a convergência da pressão final na região 4, que deveria se igualar à pressão inicial. Os resultados obtidos com a simulação indicam que essa convergência foi alcançada na vazão mássica de 14,16 kg/s.

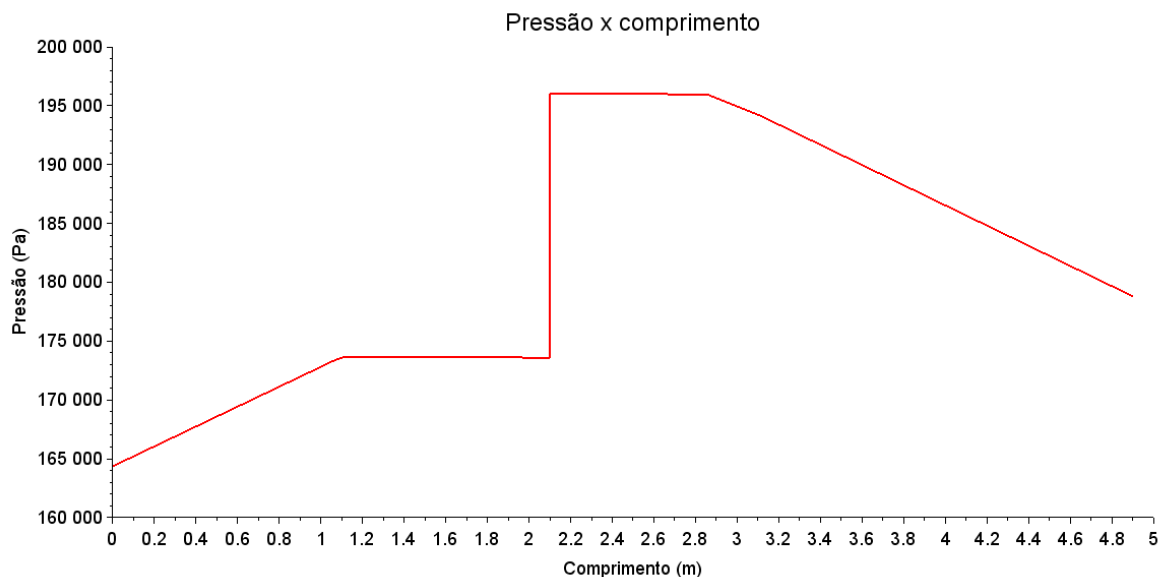
A carga térmica do trocador utilizado no serviço térmico é de 621,5 kW. Já a fração vaporizada na saída do trocador é de 6,73%, que está de acordo com os limites especificados para água e soluções aquosas que são de 2% até 10% (PALEN, 1983).

4.2.2 Simulação do refervedor com circulação forçada

As Figuras 23, 24, 25, 26 apresentam os perfis ao longo das Regiões 1, 2, 3 e 4, respectivamente.

A Figura 23 mostra um aumento mais acentuado da pressão a partir de 2,1 m do trajeto, aumento esse associado ao ΔP fornecido pela bomba. Após esse aumento, a pressão fica aproximadamente constante, relacionada com o trecho reto após a bomba. A partir dos 3 m, a pressão é reduzida devido ao escoamento ascendente.

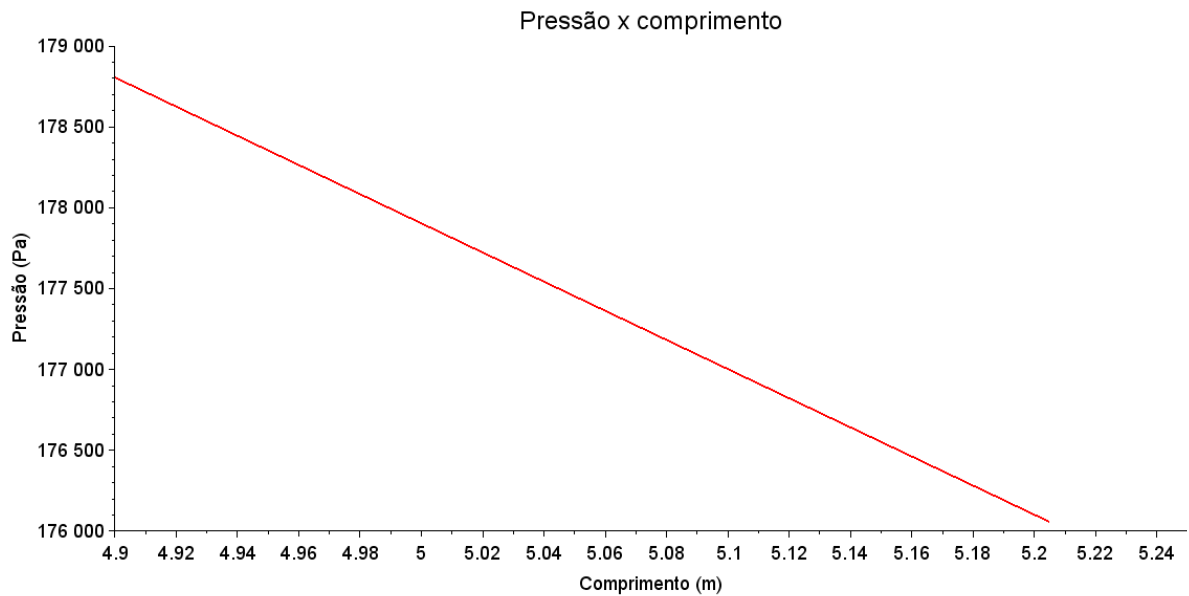
Figura 23–Perfil de pressão ao longo do comprimento da Região 1



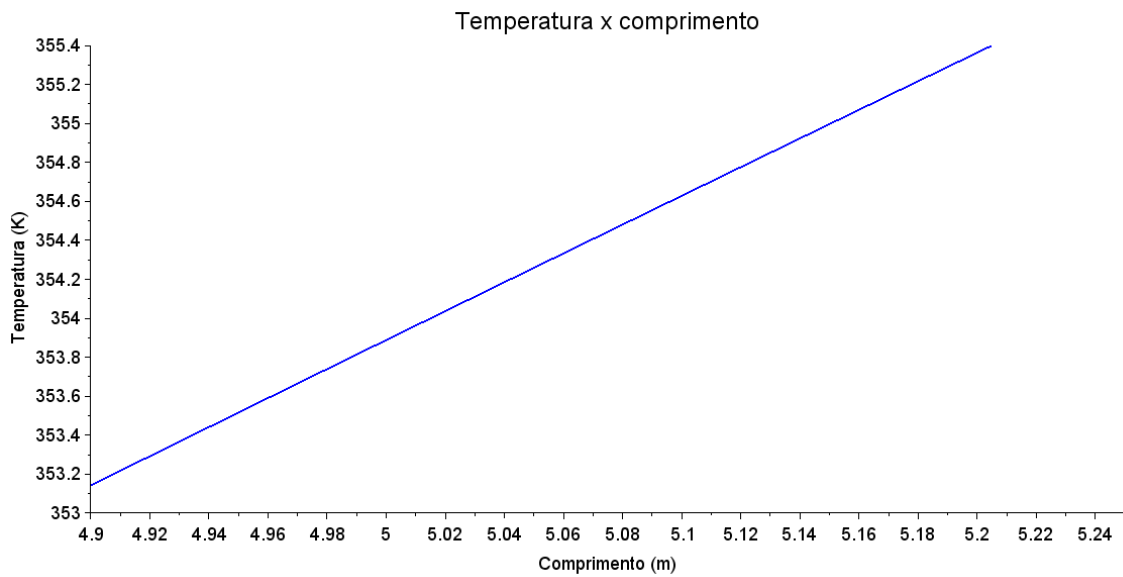
Fonte: O autor, 2016.

O perfil da região 2 pode ser observado na Figura 24, onde a pressão (a) apresenta-se decrescente devido ao escoamento ascendente. Já na Figura 24 (b), a temperatura aumenta, pois, essa região é a região da zona de aquecimento do refervedor.

Figura 24 - Perfis de pressão e temperatura ao longo do comprimento da Região 2



(a)



(b)

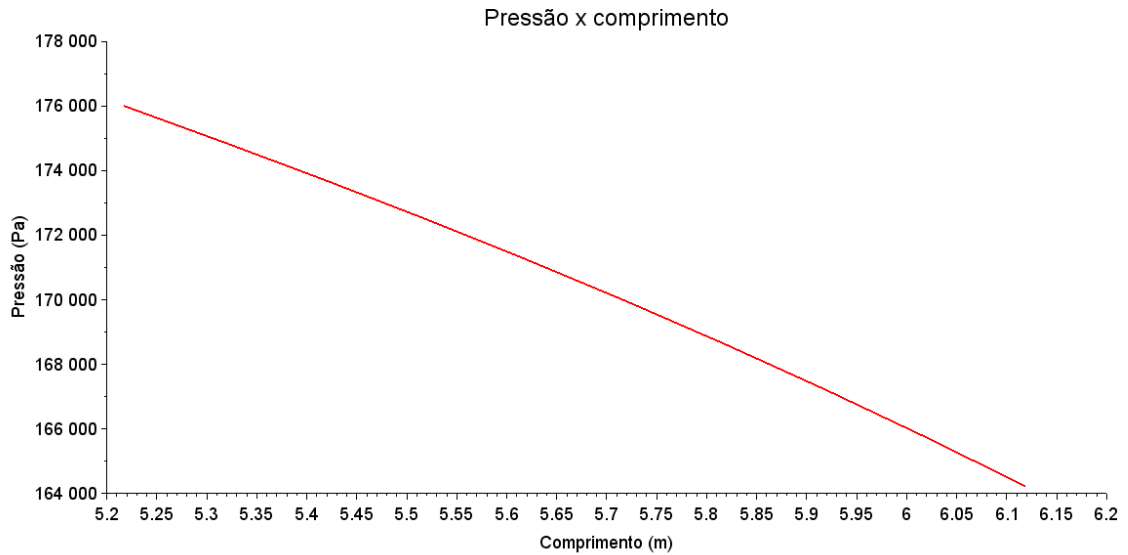
Legenda: (a) perfil de pressão da região 2 e (b) perfil de temperatura da região 2.

Fonte: O autor, 2016.

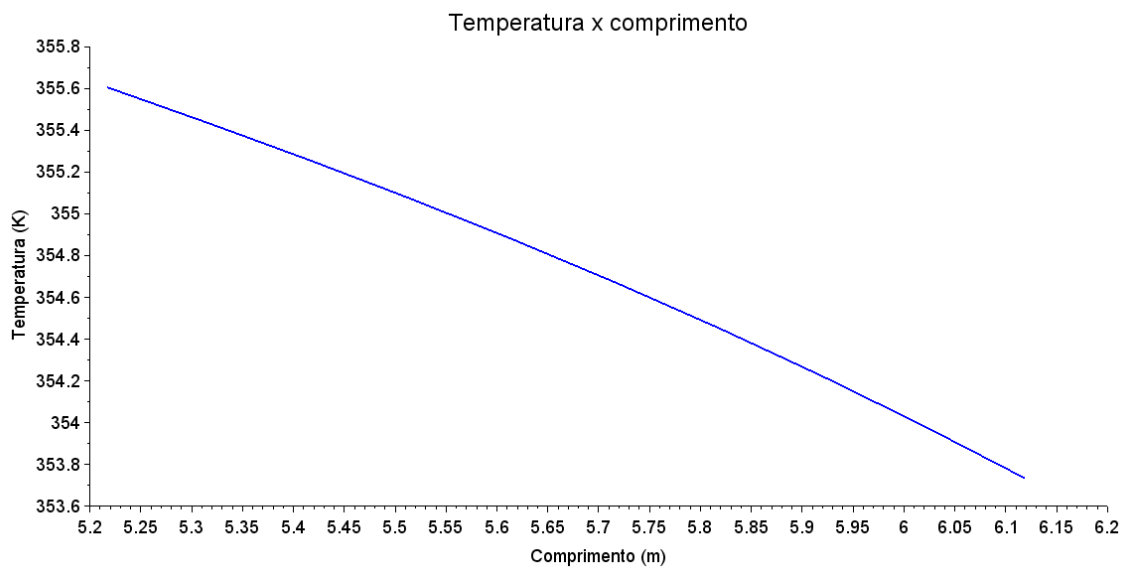
A região 3 é caracterizada pela vaporização, que ocasiona uma redução na vazão de líquido e um aumento na vazão de vapor (Figura 25 (c) e (d)). A pressão continua reduzindo

devido ao escoamento ascendente (Figura 25 (a)). Já a temperatura reduz ligeiramente, associada à variação na pressão (Figura 25 (b)).

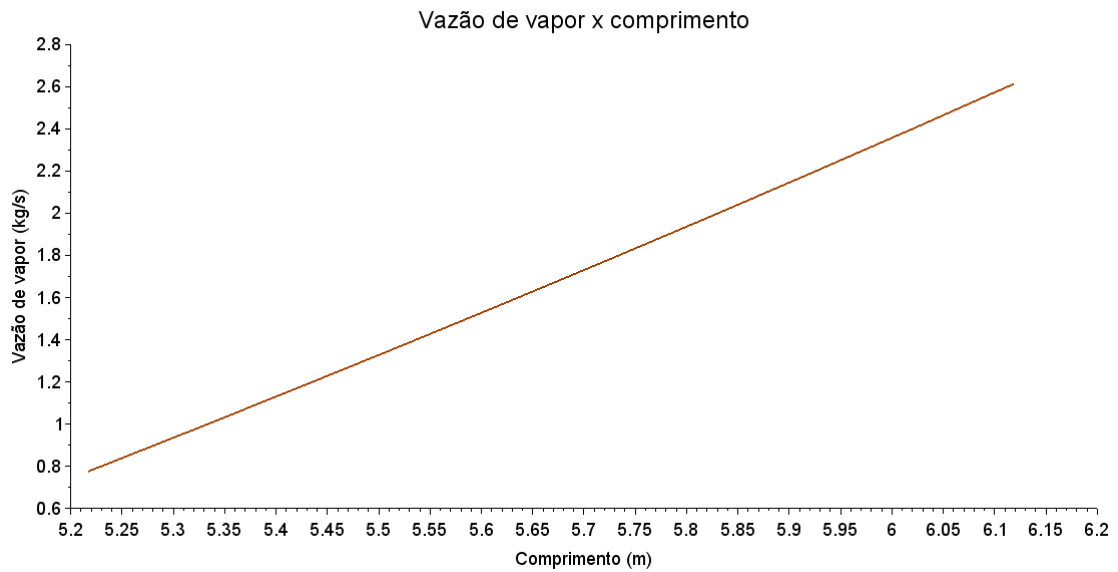
Figura 25 - Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 3



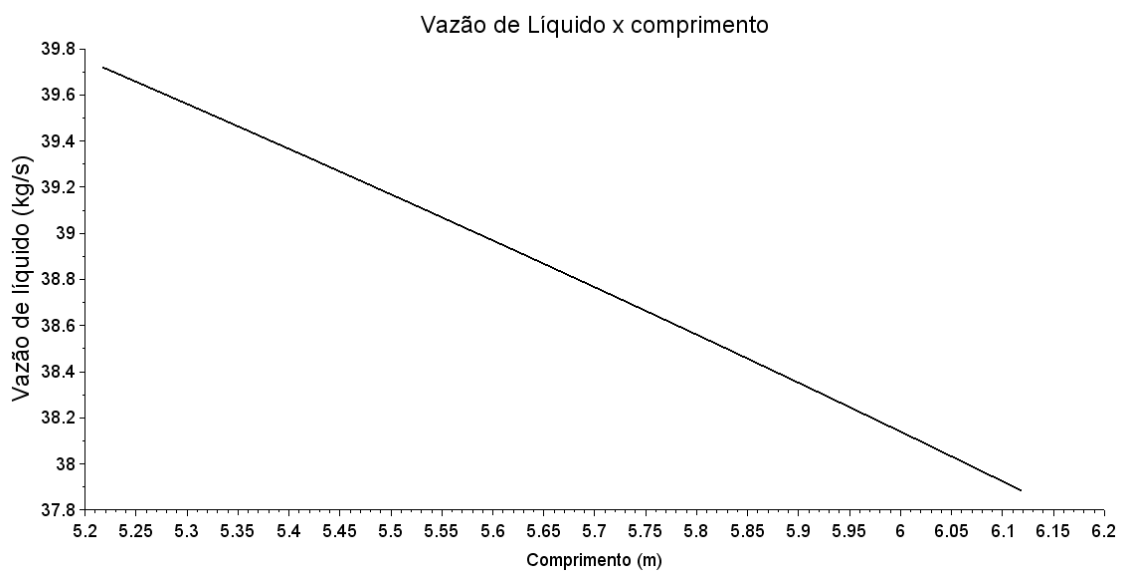
(a)



(b)



(c)



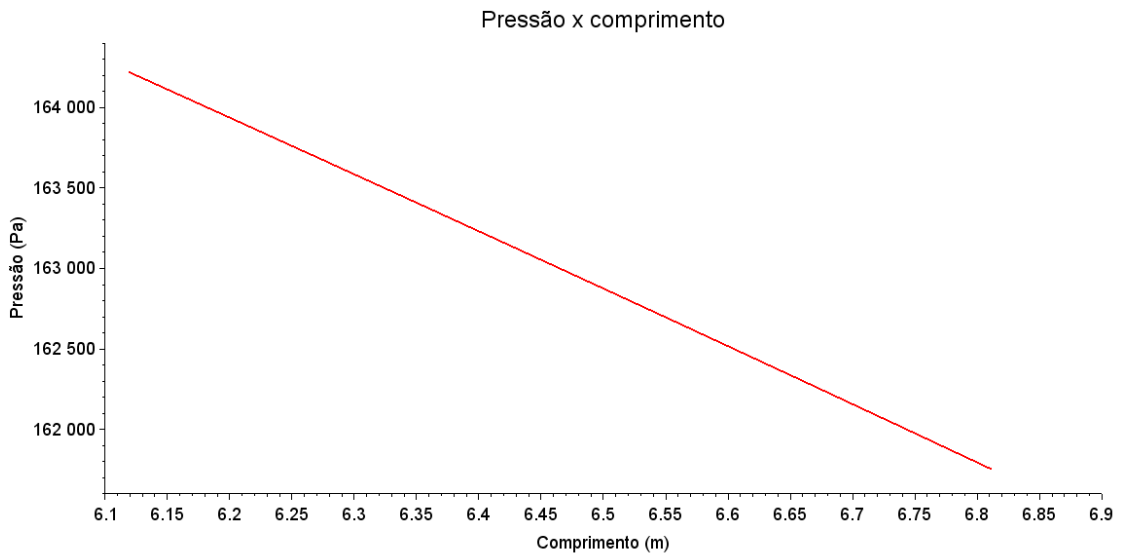
(d)

Legenda: (a) perfil de pressão da região 3, (b) perfil de temperatura da região 3, (c) perfil de vazão mássica de vapor da região3, (d) perfil de vazão mássica de líquido da região 3

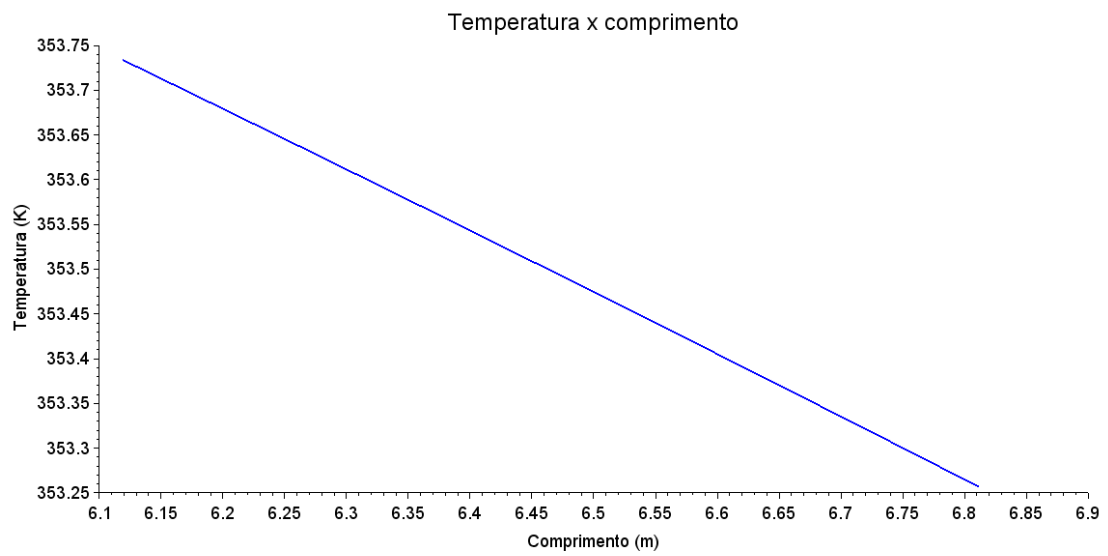
Fonte: O autor, 2016.

A Figura 26 refere-se aos perfis da corrente bifásica que retorna para a coluna e a explicação é semelhante à explicação realizada na região 4 da simulação do termosifão vertical.

Figura 26 - Perfis de pressão, temperatura, vazão de vapor e vazão de líquido da região 4



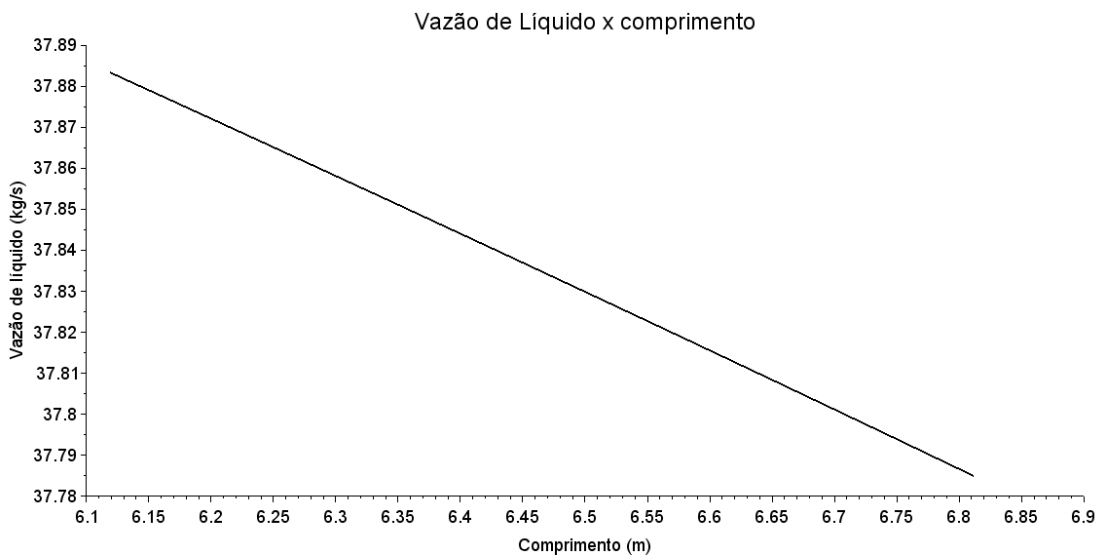
(a)



(b)



(c)



(d)

Legenda: (a) perfil de pressão da região 4, (b) perfil de temperatura da região 4, (c) perfil de vazão mássica de vapor da região 4, (d) perfil de vazão mássica de líquido da região 4

Fonte: O autor, 2016.

Os resultados da simulação podem ser vistos na Tabela 14.

Tabela 14- Resultados da simulação com circulação forçada

Variáveis	Resultados
Vazão mássica convergida (kg/s)	40,49
Carga térmica do Refervedor (kW)	1780,9
Fração mássica vaporizada (%)	6,45
Pressão antes da bomba (10^5 Pa)	1,73
Pressão após a bomba (10^5 Pa)	1,96

Fonte: O autor, 2016.

A fração vaporizada recomendada nesse tipo de trocador é menor quando comparada à recomendada para o termossifão vertical.

4.3 Análise do impacto das incertezas das predições do modelo termodinâmico na simulação

A simulação de um vaporizador necessita de um modelo termodinâmico que seja capaz de prever o equilíbrio de fases da corrente, uma vez que a força motriz da transferência de calor está diretamente associada ao perfil de temperatura, e o cálculo do coeficiente de convecção depende da quantidade e da composição de cada fase. Entretanto, muitas vezes o comportamento termodinâmico da mistura se afasta consideravelmente da idealidade, dificultando predições acuradas. Visando avaliar o impacto destas questões no comportamento previsto para um refervedor, esta análise utiliza um algoritmo de simulação de um termossifão vertical, utilizando o modelo de Wilson para coeficiente de atividade, com o objetivo de explorar esta questão via análise de sensibilidade

Os estudos foram realizados considerando uma mistura binária: acetona (1) e água (2). Os parâmetros utilizados na Equação 7 para o cálculo dos parâmetros de interação binária estão descritos na Tabela 15.

As variações dos parâmetros de interação binária utilizados podem ser observadas na Tabela 16.

Tabela 15- Parâmetros utilizados na formulação original (Eq. 7)

Parâmetros	Valores
a(1,1)	0
a(1,2)	291,27
a(2,1)	1448,01
a(2,2)	0

Fonte: GMEHLING et al., 1981-1988 apud SMITH et al.,2007.

Tabela 16- Variação dos parâmetros na análise de sensibilidade

Estudo	Parâmetro $\Lambda_{1,2}$	Parâmetro $\Lambda_{2,1}$
Caso base	$\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	$\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
1	1,1 $\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	$\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
2	$\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	1,1 $\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
3	1,1 $\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	1,1 $\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
4	1,1 $\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	0,9 $\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
5	0,9 $\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	1,1 $\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
6	0,9 $\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	0,9 $\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
7	$\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	0,9 $\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$
8	0,9 $\Lambda_{1,2}(\text{caso base})$	$\Lambda_{2,1}(\text{caso base})$

Fonte: O autor, 2016

Os diagramas de equilíbrio T-x-y e $\ln(\gamma)$ -x foram traçados para a pressão de, 181,9 kPa, e comparados com o caso base (Figuras 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33 e 34).

4.3.1 Influência no ELV

4.3.1.1 Variação de 10% no parâmetro de interação binária $\Lambda_{1,2}$

Ao aumentar o parâmetro $\Lambda_{1,2}$ em 10% e ao analisar os resultados obtidos para o coeficiente de atividade (γ), apresentados na Figura 28 e tabelados (Apêndice A-Tabela 1), observa-se que o coeficiente da atividade de ambos os componentes diminui, indicando que a repulsão na fase líquida é menos pronunciada. Ao analisar a influência desse aumento na curva de equilíbrio (Figura 27), percebe-se que tanto a curva de pontos de bolha quanto a de pontos de orvalho são deslocadas ligeiramente para cima em relação ao caso base. Isso ocorre porque a repulsão menos pronunciada na fase líquida diminui a tendência de escape das moléculas para a fase vapor, aumentando assim tanto T_{bol} quanto T_{orv} .

Já na redução de $\Lambda_{1,2}$ observa-se que os valores de T_{bol} e T_{orv} são menores, quando comparados ao caso base. Isso, mais uma vez, pode ser explicado pelos valores de γ (Figura 28 e Tabela 1- Apêndice A), uma vez que a redução de $\Lambda_{1,2}$ resulta em coeficientes de atividade maiores, indicando uma maior repulsão existente na fase líquida e, como consequência, um aumento na tendência de escape para a fase vapor, que provoca essa redução em T_{bol} e T_{orv} .

Cabe ressaltar ainda que as curvas de equilíbrio foram mais afetadas pela redução do parâmetro que pelo seu aumento, indicando uma assimetria nesta relação causa-efeito. Além disso, a curva referente a T_{orv} é praticamente coincidente com a do caso base até aproximadamente 0,75 de composição y_1 , o que já era de se esperar uma vez que se trata de uma modificação da não idealidade do líquido e, neste ponto, há apenas uma quantidade residual de líquido.

Figura 27- Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{1,2}$

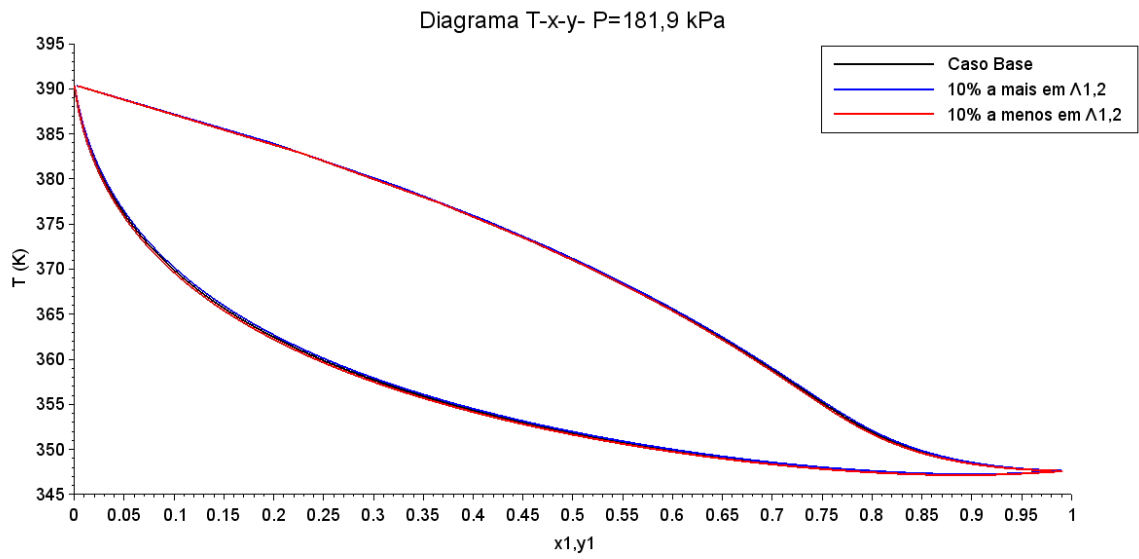
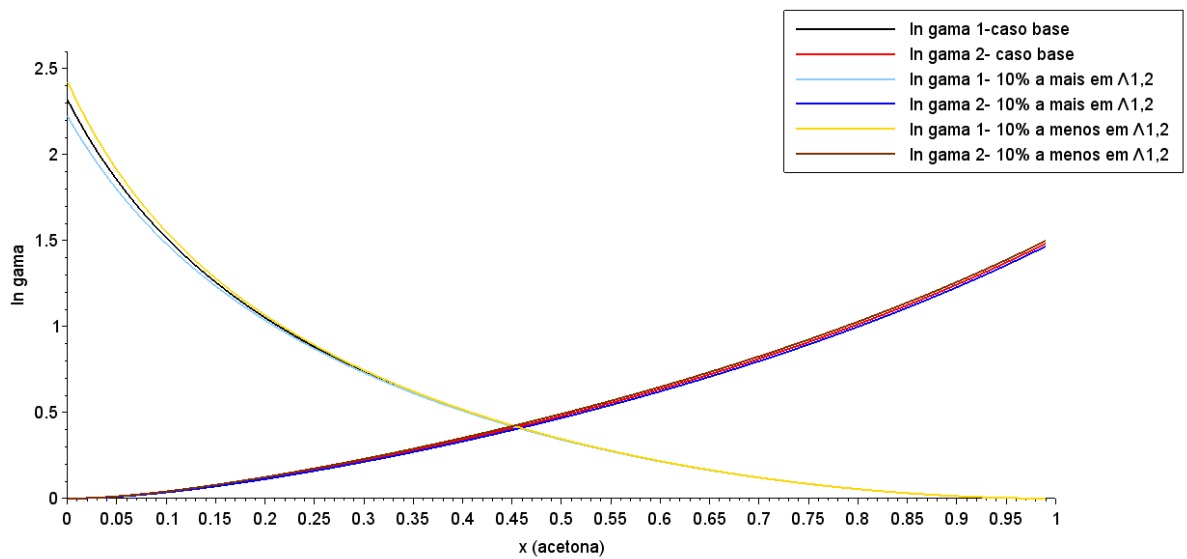


Figura 28- Influência no Diagrama $\ln(\gamma)$ -x com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{1,2}$
T=350K

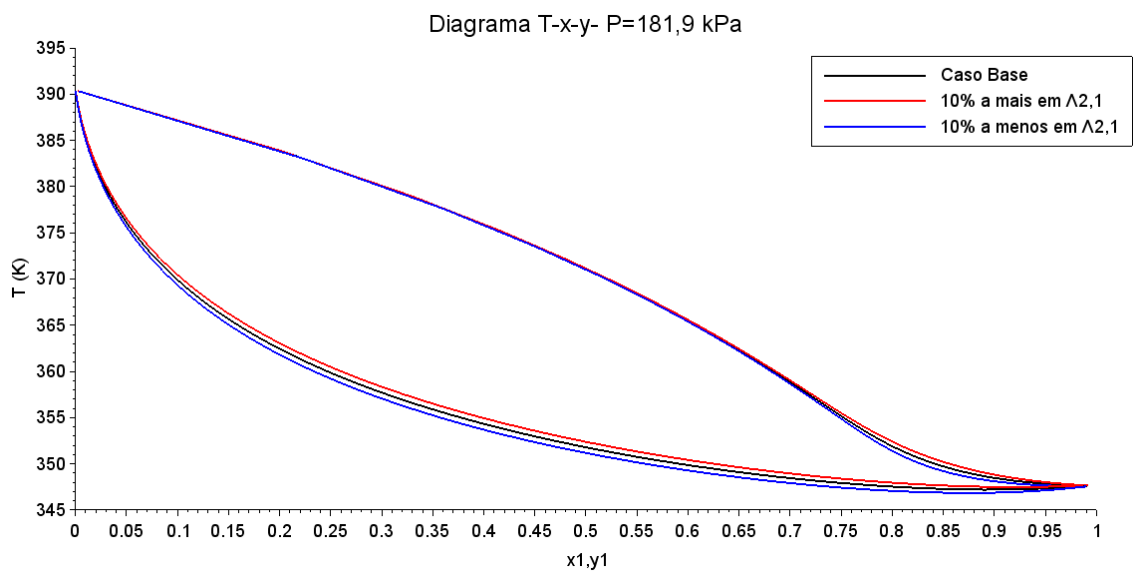


4.3.1.2 Variação de 10% no parâmetro de interação binária $\Lambda_{2,1}$

Os efeitos do aumento e a redução do parâmetro de interação binária $\Lambda_{2,1}$ (Figura 29) assemelham-se ao que ocorre com a variação no parâmetro $\Lambda_{1,2}$, conforme descrito na seção 4.3.1.1.

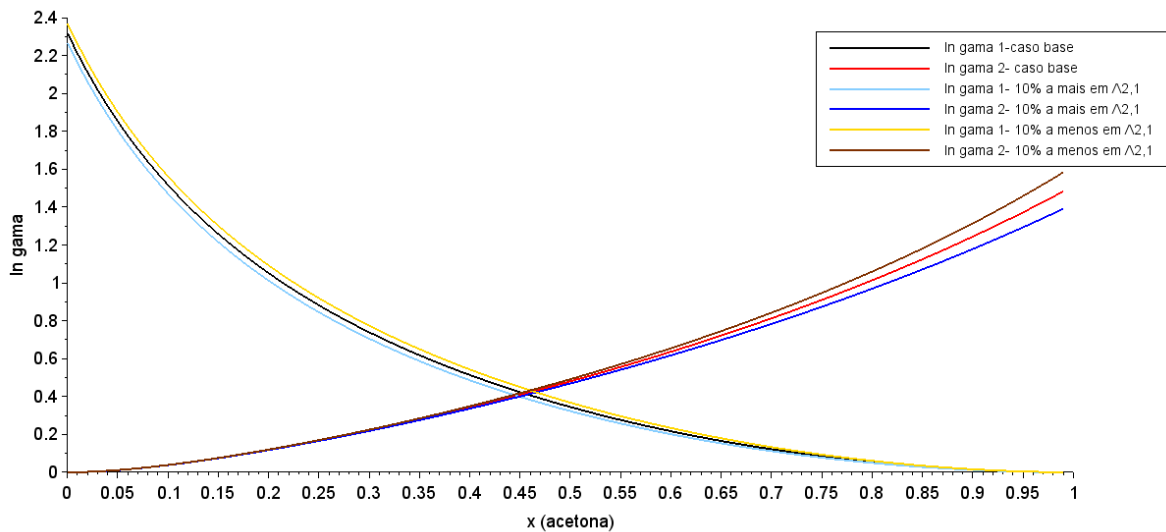
Ao variar o parâmetro $\Lambda_{2,1}$, T_{orv} apresenta uma maior variação em cerca de 0,7 de composição y_1 . Para composições menores as curvas são praticamente sobrepostas, uma vez que se está levando em consideração a não idealidade do líquido, e este está presente em quantidade ínfima no ponto de orvalho.

Figura 29- Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{2,1}$



Fonte: O autor, 2016.

Figura 30- Influência no Diagrama $\ln(\gamma) - x$ com a variação de 10% no parâmetro $\Lambda_{2,1}$
 $T=350K$



Fonte: O autor, 2016.

4.3.1.3 Análise da influência da variação de ambos os parâmetros de interação binária

4.3.1.3.1 Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$

Ao aumentar ambos os parâmetros, é possível verificar, na Figura 31, que T_{bol} é maior que para o caso base, indicando uma repulsão na fase líquida um pouco mais pronunciada que o efeito do aumento de cada parâmetro em separado.

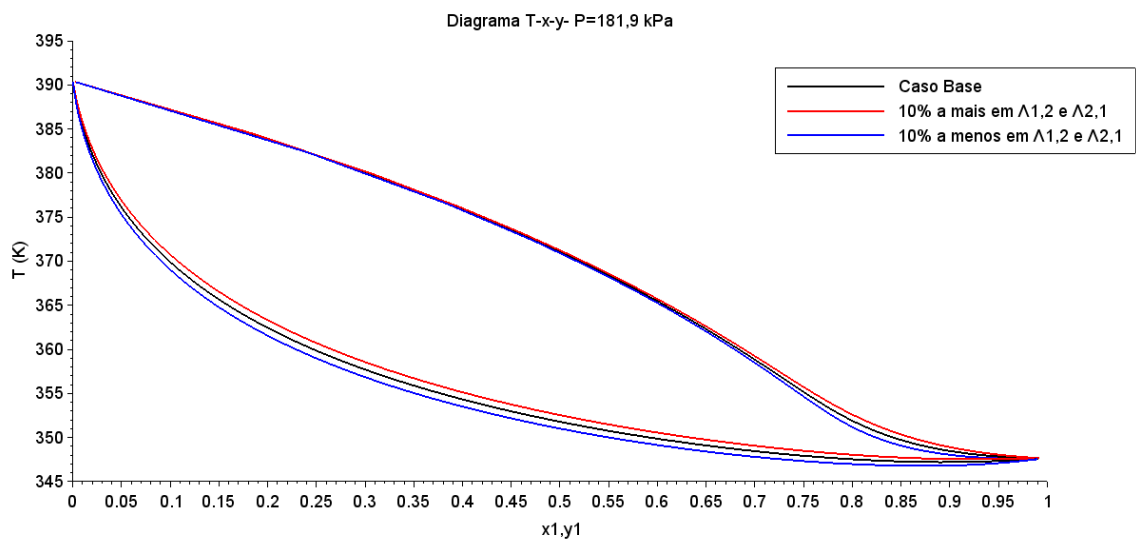
4.3.1.3.2 Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$

Ao reduzir conjuntamente os parâmetros verifica-se, na Figura 31, que as temperaturas de bolha são menores, quando comparados ao caso base (coeficientes de atividades maiores) indicando uma maior repulsão existente na fase líquida e, como

consequência, um aumento na tendência de escape para a fase vapor, que provoca essa redução em T_{bol} e T_{orv} .

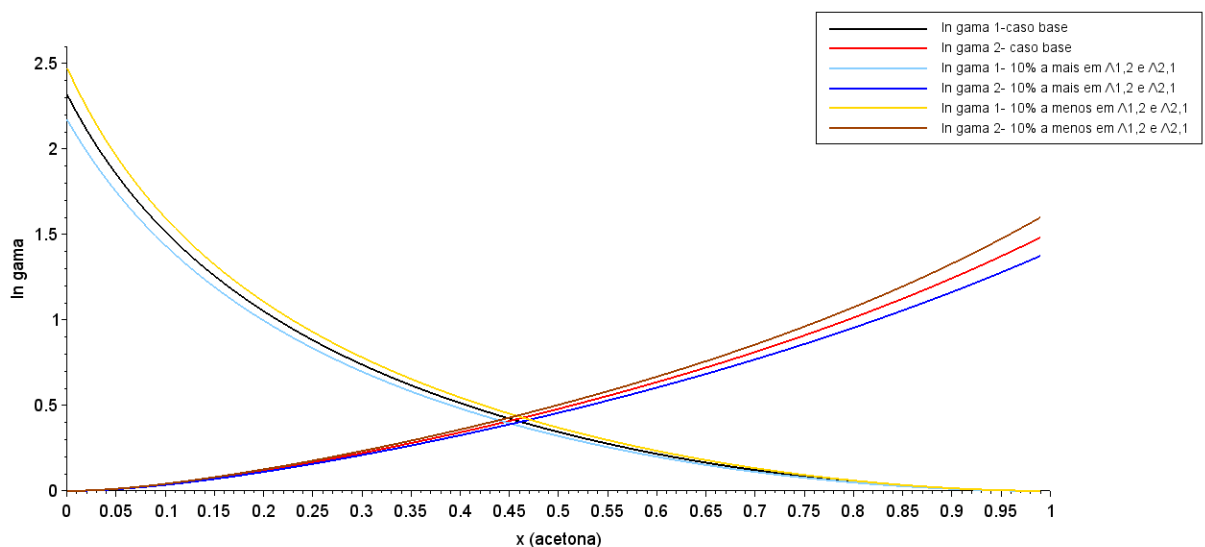
Novamente, o efeito quantitativo da redução dos dois parâmetros em conjunto foi mais pronunciado que o efeito da redução de cada parâmetro em separado.

Figura 31- Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% a mais e a menos em ambos em os parâmetros simultaneamente.



Fonte: O autor, 2016.

Figura 32- Influência no Diagrama $\ln(\gamma)$ -x com a variação de 10% a mais e a menos em ambos em os parâmetros simultaneamente $T=350K$



Fonte: O autor, 2016.

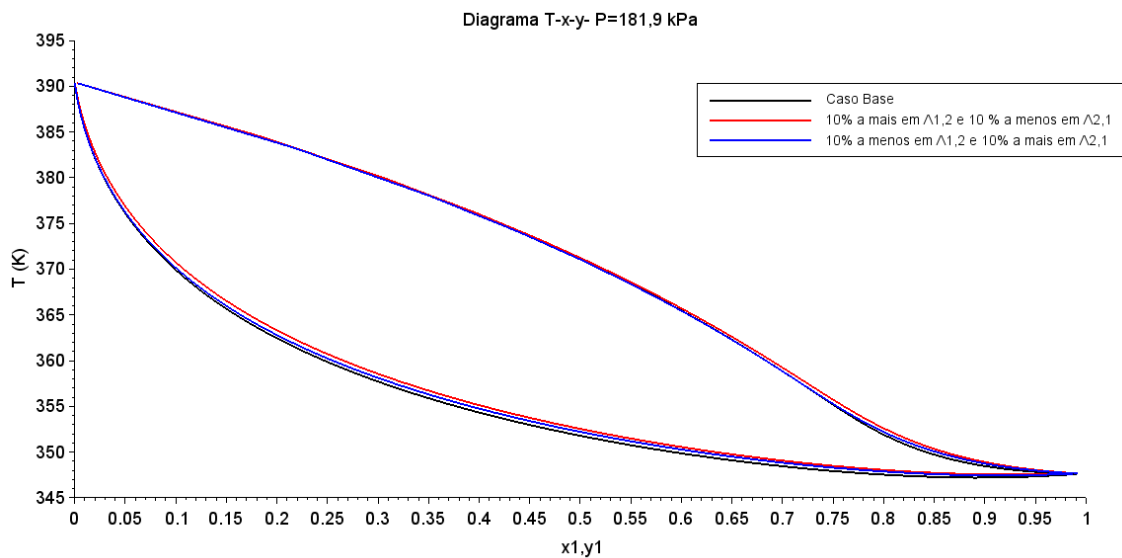
4.3.1.3.3 Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e redução de 10% em $\Lambda_{2,1}$

Ao aumentar o parâmetro $\Lambda_{1,2}$ e reduzir o parâmetro $\Lambda_{2,1}$, é possível verificar, na Figura 33, valores menores de T_{bol} , quando comparados ao caso base, indicando que ao realizar essa variação nos parâmetros é possível alcançar uma maior repulsão na fase líquida.

4.3.1.3.4 Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e aumento de 10% em $\Lambda_{2,1}$

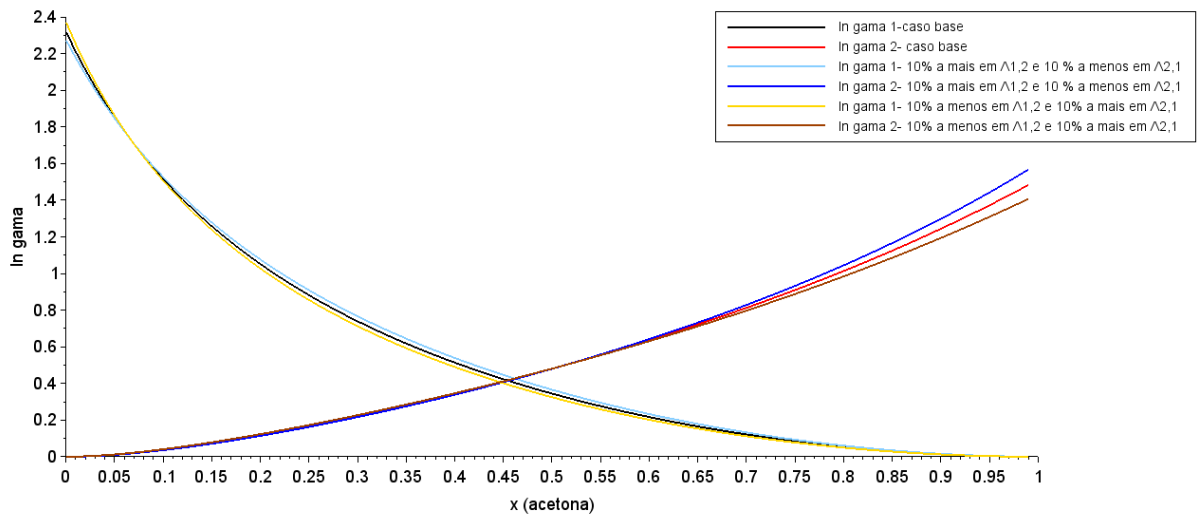
Ao reduzir o parâmetro $\Lambda_{1,2}$ e aumentar o parâmetro $\Lambda_{2,1}$, observa-se, na Figura 33, valores maiores de T_{bol} em comparação com o caso base, o que indica que essa modificação nos parâmetros gera uma menor repulsão na fase líquida.

Figura 33 - Influência no Diagrama T-x-y com a variação de 10% a mais em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a menos em $\Lambda_{2,1}$ e variação de 10% a menos em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a mais em $\Lambda_{2,1}$



Fonte: O autor, 2016.

Figura 34 - Influência no Diagrama $\ln(\gamma) - x$ com a variação de 10% a mais em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a menos em $\Lambda_{2,1}$ e variação de 10% a menos em $\Lambda_{1,2}$ e 10% a mais em $\Lambda_{2,1}$ T=350K



Fonte: O autor, 2016.

4.3.2 Influência na simulação do sistema

Conhecendo a necessidade da utilização de um modelo termodinâmico no projeto de um refeedor, essa análise avaliou a influência dos parâmetros de interação binária nas variáveis de saída: vazão mássica, carga térmica do trocador de calor e fração vaporizada. A Tabela 17 mostra os resultados da simulação.

Cabe lembrar que esses resultados se devem não só a modificações na predição do equilíbrio de fases, mas também no cálculo da entalpia em excesso, que utiliza o mesmo modelo, logo vários fatores estão envolvidos e a interpretação dos resultados não é direta. No entanto, de forma geral, pode-se concluir que variações de 10% na determinação dos parâmetros de interação podem influenciar nos resultados da simulação do sistema.

Tabela 17–Resultados da simulação variando o parâmetro de interação binária do modelo de Wilson

	Vazão (kg/s)	Variação relativa (%)	Carga térmica (kW)	Variação relativa (%)	Fração vaporizada (%)	Variação relativa (%)
Caso base	14,164	-	621,5	-	6,731	-
Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$	15,082	6,4788	581,5	-6,443	5,918	-12,080
Aumento de 10% em $\Lambda_{2,1}$	15,042	6,1941	608,0	-2,1775	6,319	-6,122
Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$	15,083	6,4876	597,9	-3,8044	6,180	-8,1956
Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e Redução de 10% em $\Lambda_{2,1}$	15,079	6,4590	584,9	-5,889	5,885	-12,568
Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e Aumento de 10% em $\Lambda_{2,1}$	14,98810	5,8165	620,6	-0,155	6,493	-3,543
Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$	14,996	5,8697	605,2	-2,6316	6,158	-8,5119
Redução de 10% em $\Lambda_{2,1}$	15,042	6,1999	594,0	-4,4308	6,008	-10,751
Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$	14,953	5,5715	632,1	1,695	6,552	-2,663

Fonte: O autor, 2016.

4.4 Comparação entre duas formulações de parâmetro de interação binária

Com objetivo de prever o impacto do parâmetro de interação binária no equilíbrio de fases e na simulação do trocador de calor, implementaram-se as rotinas utilizando duas equações para os parâmetros de interação binária. As equações 7 e 8 foram comparadas em relação ao equilíbrio de fases e na simulação do refeedor.

Os parâmetros utilizados na Equação 7 para o cálculo dos parâmetros de interação binária foram descritos na Tabela 15

Já os parâmetros utilizados na formulação modificada (Equação 8), estão descritos na Tabela 18.

Tabela 18- Parâmetros utilizados na formulação modificada (Eq. 8)

Parâmetros	Valores
a(1,1)	0
a(1,2)	-0,4374
a(2,1)	-9,7051
a(2,2)	0
b(1,1)	0
b(1,2)	-291,079
b(2,1)	2719,214
b(2,2)	0

Fonte: AspenTech,2006.

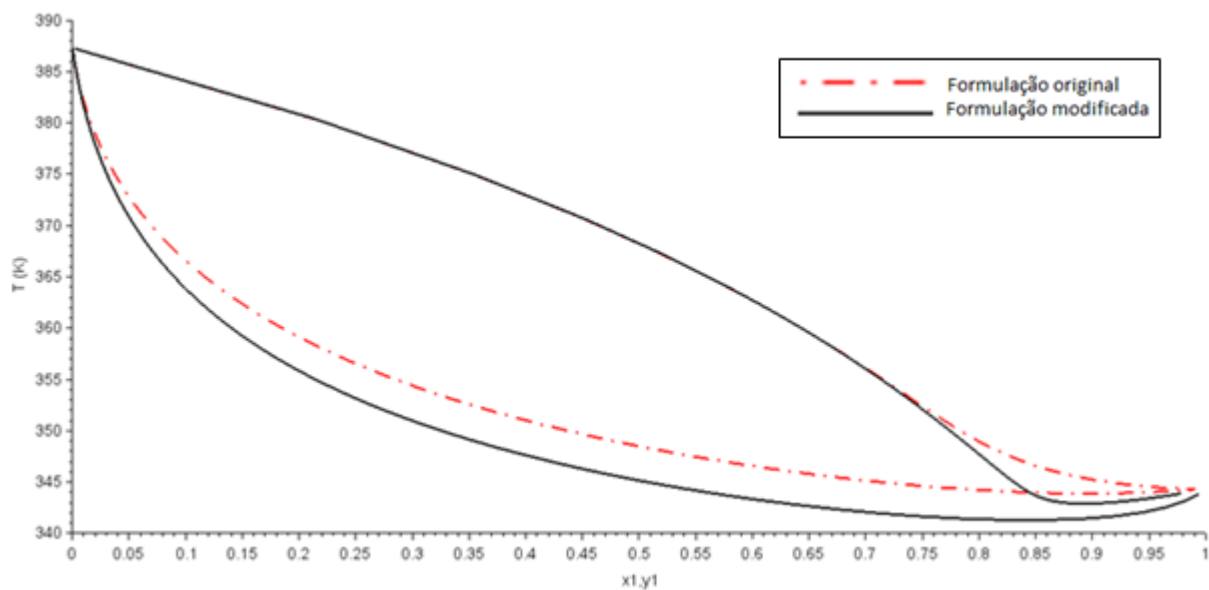
Para a mistura binária utilizada (acetona e água), os demais parâmetros ($c_{i,j}$, $d_{i,j}$ e $e_{i,j}$) da formulação modificada são nulos.

4.4.1 Influência no ELV

O Diagrama de equilíbrio T-x-y foi plotado utilizando a formulação original (Equação 7) e a formulação modificada (Equação 8), e pode ser visto na Figura 35. A formulação original apresenta valores maiores de T_{bol} , quando comparada à formulação modificada, indicando que, de acordo com a teoria de atração e repulsão, essa formulação prevê uma menor repulsão na fase líquida, dificultando a passagem das moléculas para a fase vapor, em comparação com a formulação modificada.

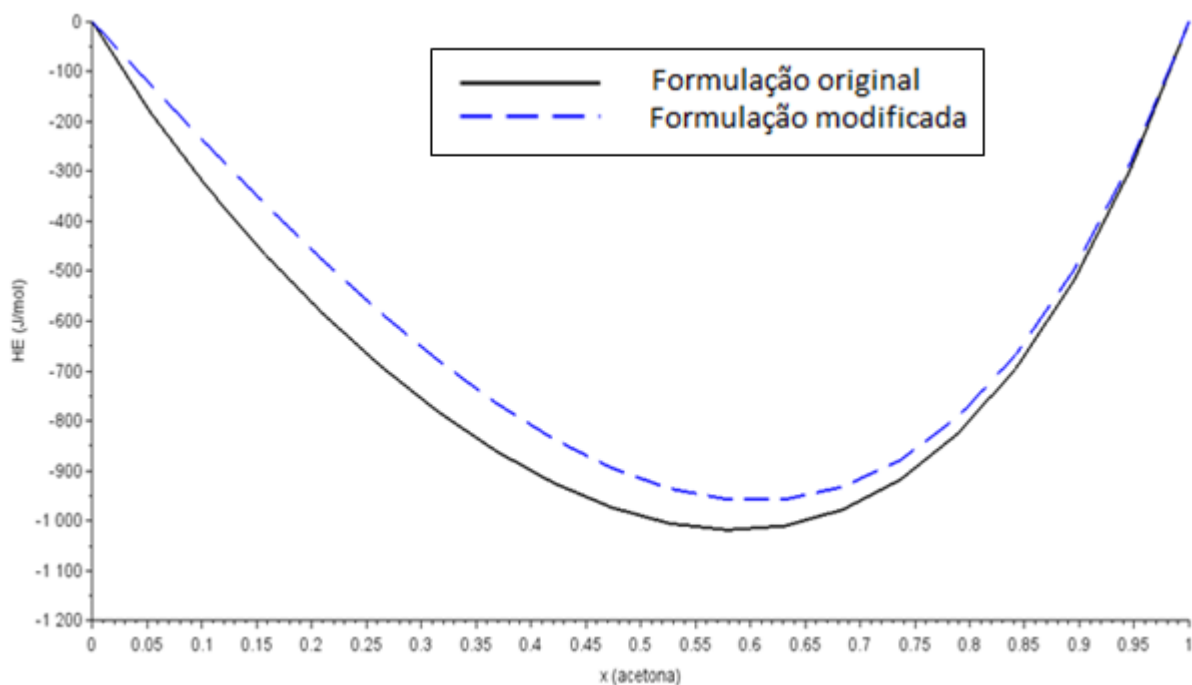
A Figura 36 apresenta os resultados da dependência da entalpia molar em excesso em função da composição. O gráfico possui uma característica comum para todas as propriedades em excesso, que é se tornarem nulas quando qualquer espécie tende a ficar pura. Outra característica que se pode observar é que quando uma propriedade em excesso possui apenas um sinal, o máximo ou mínimo ocorre próximo à composição equimolar.

Figura 35- Diagrama T-x-y comparativo entre as Equações 7 e 8- P=181,9kPa



Fonte: O autor, 2016.

Figura 36- Diagrama $H^E - x$ comparativo entre as equações 7 e 8



Fonte: O autor, 2016.

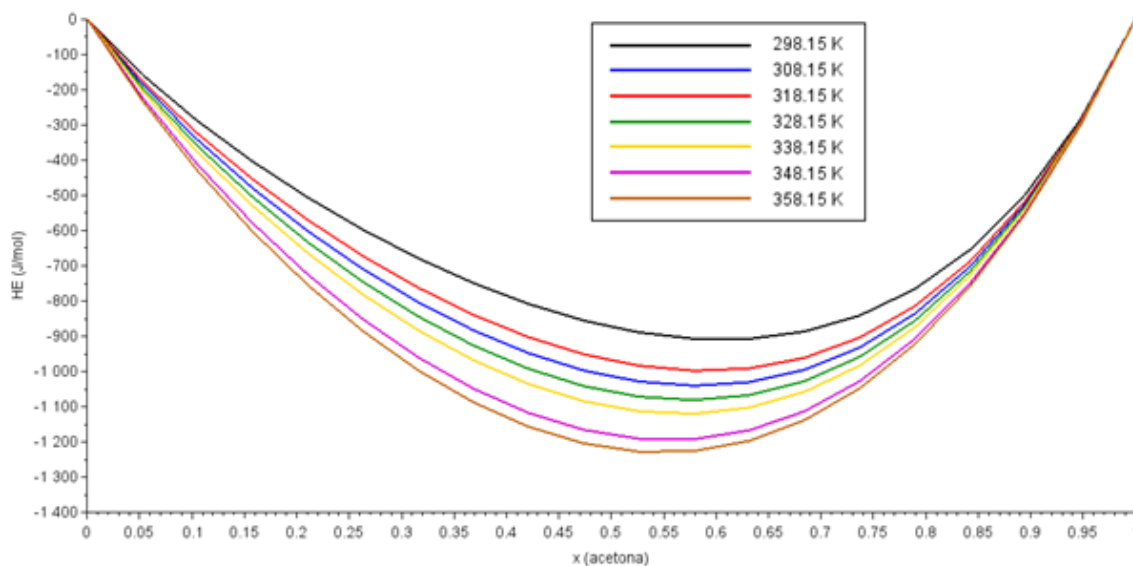
Abbott et al. (1994) apud Smith (2007) classificam as misturas binárias orgânicas e aquosas/orgânicas em um sistema que se baseia em ligações de hidrogênio. Uma espécie

pura pode ser classificada como polar mas não associativa (NA), como a acetona, ou polar e associativa (AS), como a água. Assim a mistura binária utilizada é classificada como AS/NA. Esses sistemas costumam possuir uma variedade de ligações de hidrogênio, dificultando uma generalização simples, mas possuem H^E negativas.

Ao comparar as curvas na Figura 36, observa-se que a formulação original apresenta valores mais negativos para o H^E , quando comparada à formulação modificada. Para composições maiores que 0,9, as duas curvas se sobrepõem.

A entalpia molar em excesso é sensível a alterações na temperatura, as Figuras 37 e 38, mostram essa dependência. A variação em relação à temperatura costuma apresentar uma variedade de comportamentos. Percebe-se que a formulação modificada é mais sensível à variação de temperatura (Figura 38). Ao comparar as duas figuras é possível observar um comportamento oposto em relação à variação da temperatura, assim pode-se dizer que as duas formulações predizem capacidades caloríficas em excesso (Cp^E , variação da H^E com a temperatura) com sinais opostos.

Figura 37- Diagrama $H^E - x$ em diferentes temperaturas- equação 7

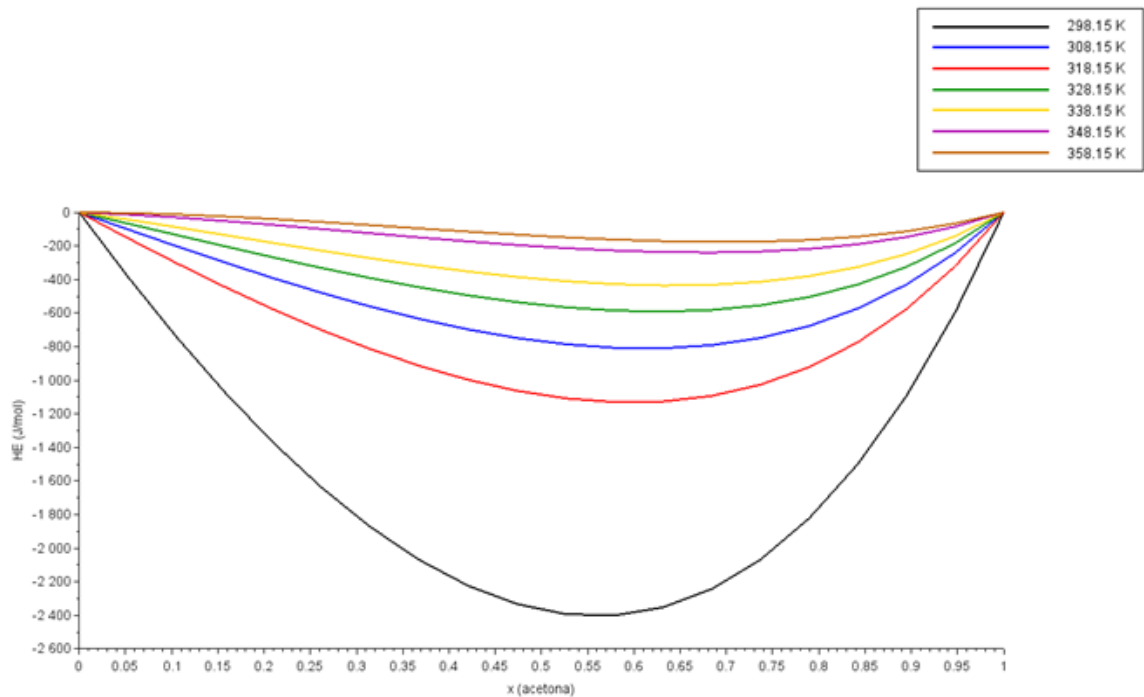


Fonte: O autor, 2016.

Nas Figuras 39 e 40, são apresentadas quatro funções termodinâmicas, $\ln \gamma_1$, $\ln \gamma_2$, $G^E/(RT)$ e $G^E/(x_1x_2RT)$, que são propriedades da fase líquida, em função da composição para uma temperatura fixa. A temperatura utilizada para traçar os gráficos foi de 350 K.

A figura obtida é característica de γ_1 e γ_2 maiores ou iguais a 1 e $\ln \gamma_1$ e $\ln \gamma_2$ maiores ou iguais a 0, indicando que a fase líquida apresenta um desvio positivo em relação à lei de Raoult.

Figura 38- Diagrama $H^E - x$ em diferentes temperaturas- equação 8

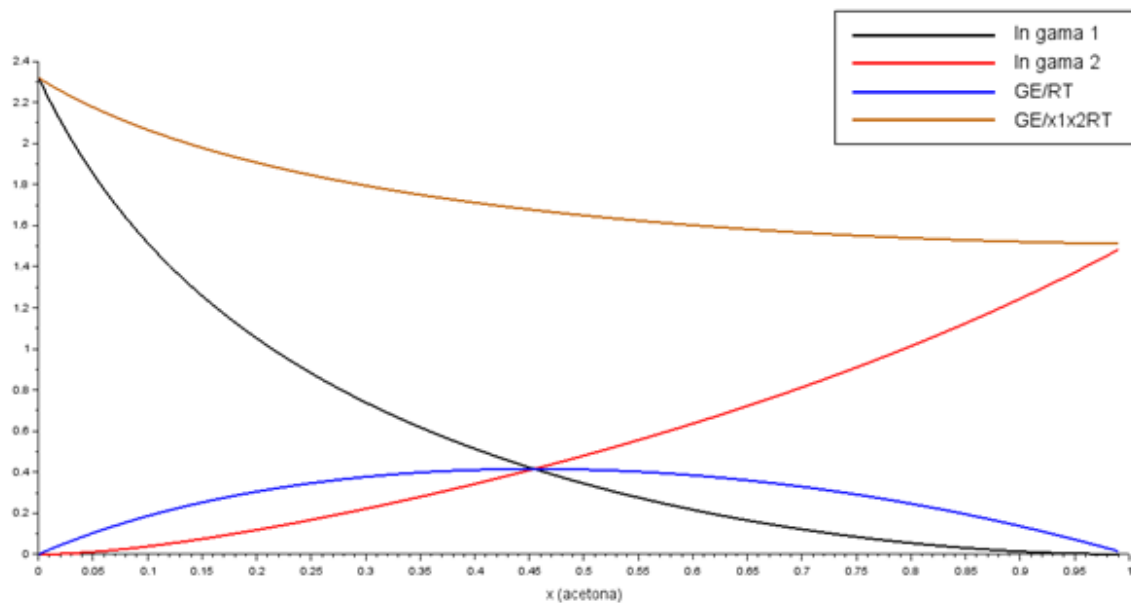


Fonte: O autor, 2016.

O coeficiente de atividade representa o desvio em relação à atividade de uma espécie em solução ideal, assim ele se aproxima de 1 à medida que a substância se torna pura ($x_j \rightarrow 1$) e, conseqüentemente, o $\ln \gamma \rightarrow 0$. Já o outro limite que é quando $x_j \rightarrow 0$, a espécie j tende a estar infinitamente diluída e o $\ln \gamma$ tende para um valor finito chamado de γ a diluição infinita, representado por $\ln \gamma_i^\infty$.

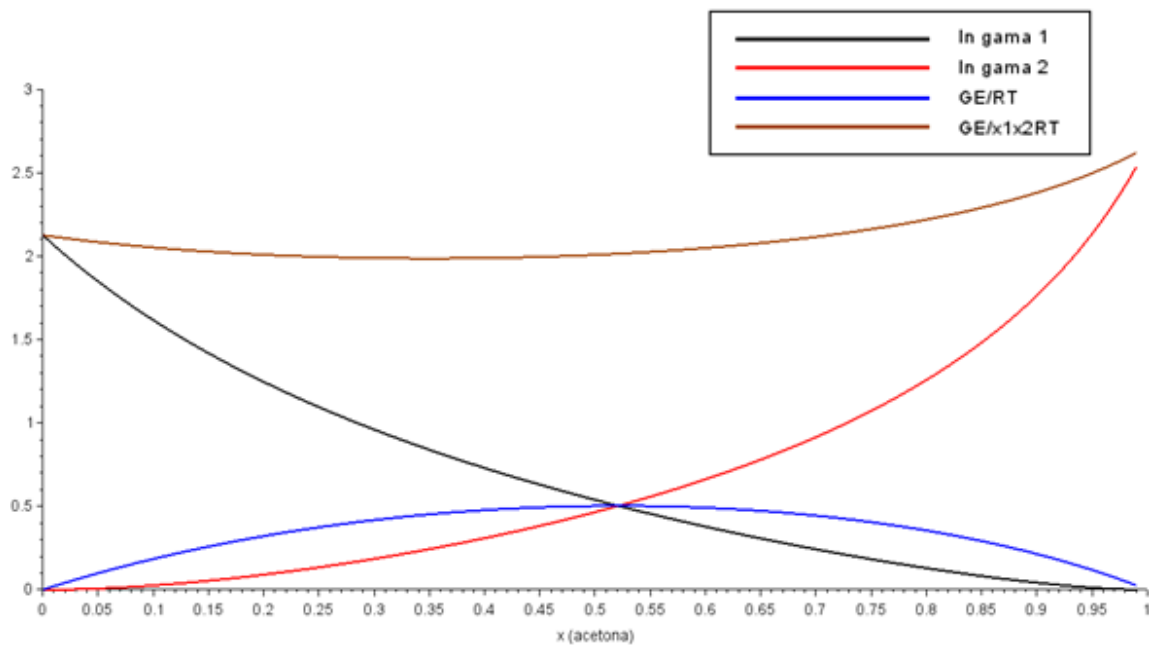
Já a curva de energia de Gibbs adimensional, G^E/RT , tende a zero quando $x_i=0$ e $x_i=1$. A grandeza G^E/x_1x_2RT , por sua vez, torna-se indeterminada para $x_i=0$ e $x_i=1$, pois $G^E=0$ e $x_1x_2=0$. Os limites dessa grandeza são iguais aos limites de diluição infinita de $\ln \gamma$.

Figura 39- Propriedades da fase líquida –T= 350 K- equação 7



Fonte: O autor, 2016.

Figura 40- Propriedades da fase líquida –T= 350 K- equação 8



Fonte: O autor, 2016.

4.4.2 Influência na simulação do sistema

Ao calcular a simulação completa do sistema com as duas formulações e analisando as variáveis de saída, vazão mássica convergida, fração vaporizada e carga térmica do refervedor, obtiveram-se os resultados expressos na Tabela 19.

Tabela 19 – Resultados da simulação comparando a formulação original e a formulação modificada

	Vazão mássica (kg/s)	Fração vaporizada mássica (%)	Carga térmica (kW)
Formulação original (Eq. 7)	14,16	6,73	621,5
Formulação modificada (Eq. 8)	14,19	6,52	564,9
Variação relativa (%)	0,2119	-3,120	-9,107

Fonte: O autor, 2016.

A formulação original apresentou a fração vaporizada mássica e a carga térmica maiores do que a formulação modificada. Já a vazão mássica convergida foi menor. Esses valores de variações relativas indicam a necessidade de escolha cuidadosa da formulação do parâmetro de interação binária com a dependência da temperatura, além da inserção de margens de segurança adequadas no projeto final para levar em conta eventuais limitações do modelo termodinâmico adotado. A escolha entre um dos modelos demandaria a comparação com dados experimentais de equilíbrio líquido-vapor e de entalpia em excesso para a mistura em questão.

4.5 Simulação estocástica

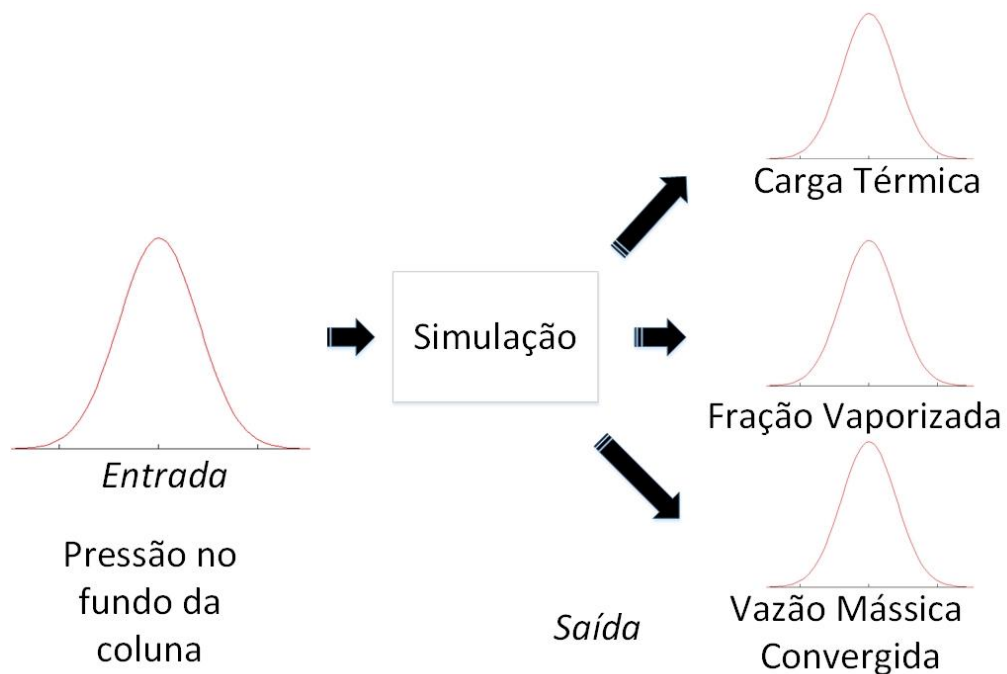
A aplicação da simulação estocástica foi ilustrada através da análise da influência de variações na pressão no fundo da coluna no desempenho de um termosifão vertical.

Adotando como exemplo o trocador descrito na seção 4.1.1, verifica-se que este seria capaz de atender com uma certa folga a uma carga térmica mínima requerida de 622

kW estipulada para um determinado serviço (*set-point*). Entretanto, a simulação determinística convencional realizada não permite avaliar se a folga adotada é suficiente para garantir a confiabilidade dos resultados frente a eventuais variações operacionais.

Admitindo que o padrão de variação da pressão no fundo da coluna possa ser representado por uma distribuição normal com média 167,3kPa e desvio-padrão 4,7 kPa, foram realizadas 200 simulações. Em cada simulação, o valor da pressão foi sorteado de acordo com a distribuição estatística adotada e os resultados referentes à carga térmica, fração vaporizada e vazão mássica foram armazenados, conforme ilustra a Figura 41.

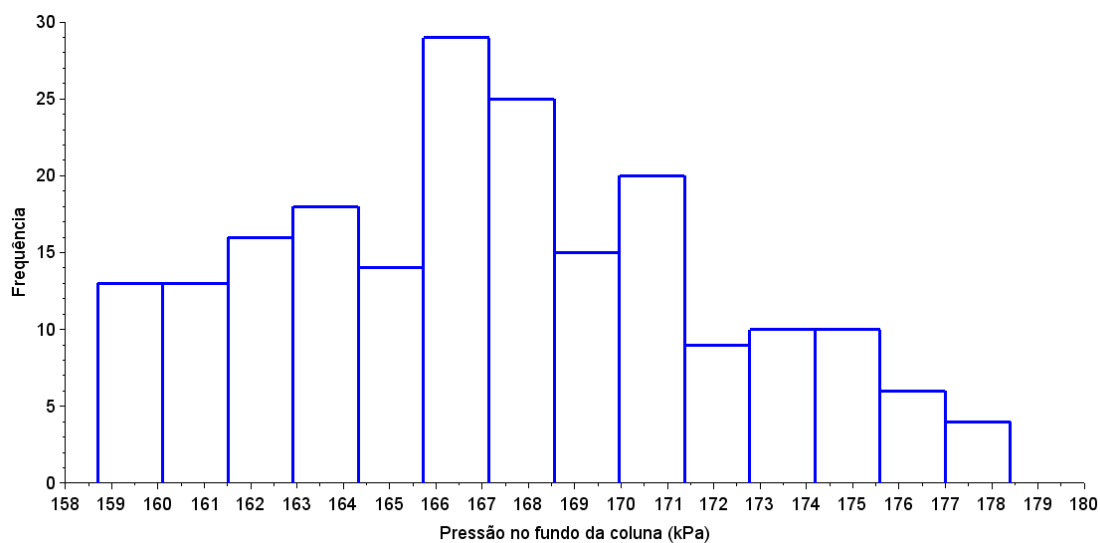
Figura 41- Representação esquemática da simulação estocástica utilizada no trabalho



Fonte: O autor, 2016.

Na Figura 42 é possível observar o histograma da variável de entrada na simulação, a pressão inicial.

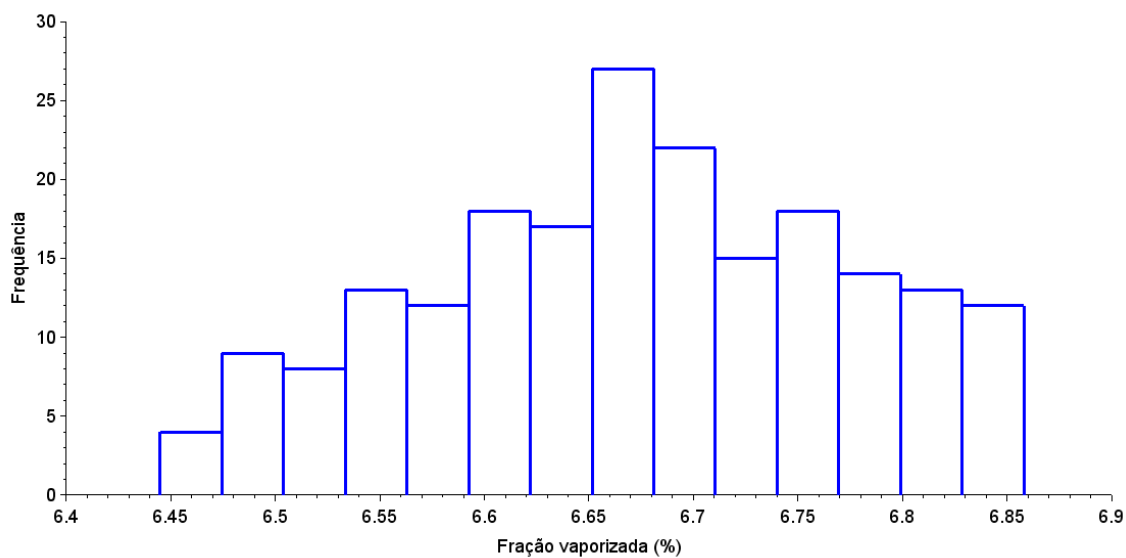
Figura 42 – Histograma da pressão no fundo da coluna



Fonte: O autor, 2016.

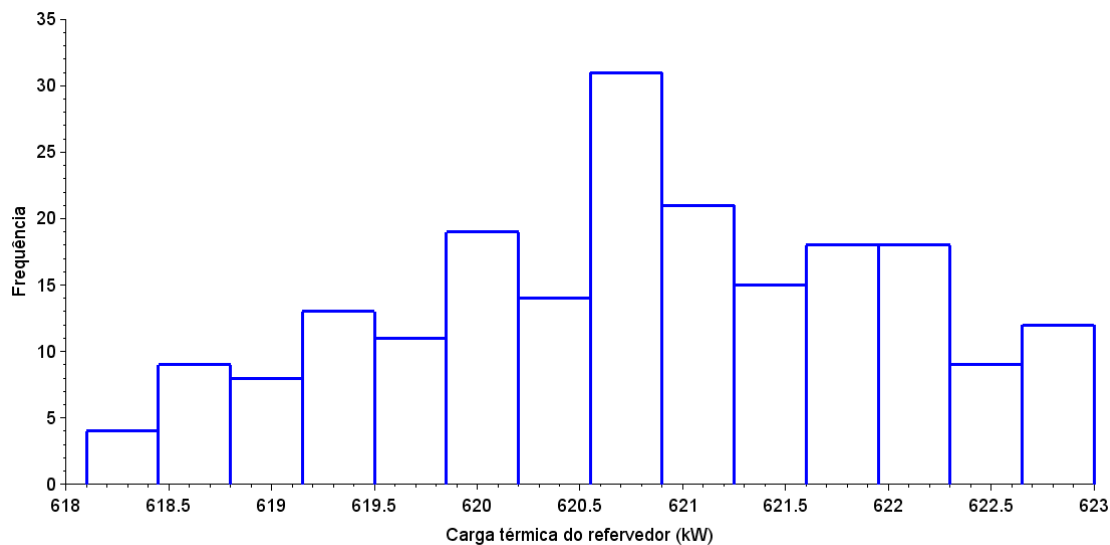
Os histogramas para fração vaporizada, carga térmica e vazão mássica, para o grupo de simulações realizadas, são apresentados nas Figuras 43, 44 e 45, respectivamente.

Figura 43 – Histograma da fração vaporizada mássica



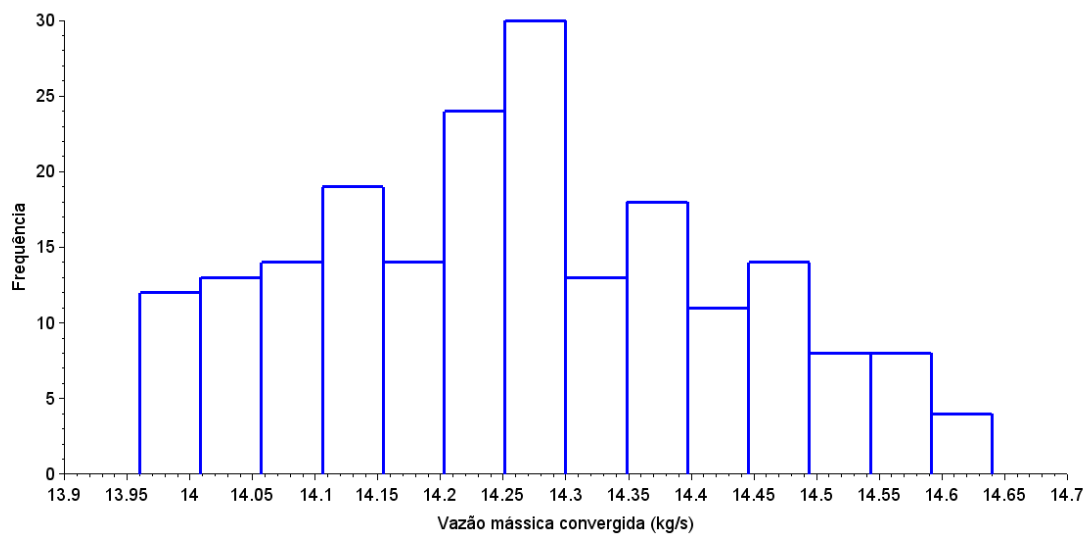
Fonte: O autor, 2016.

Figura 44 – Histograma da carga térmica do refeedor



Fonte: O autor, 2016.

Figura 45 – Histograma da vazão mássica convergida



Fonte: O autor, 2016.

Esses histogramas das variáveis de saída sugerem que as mesmas seguem aproximadamente uma distribuição normal.

A Tabela 20 mostra a média e o desvio padrão para cada variável de saída.

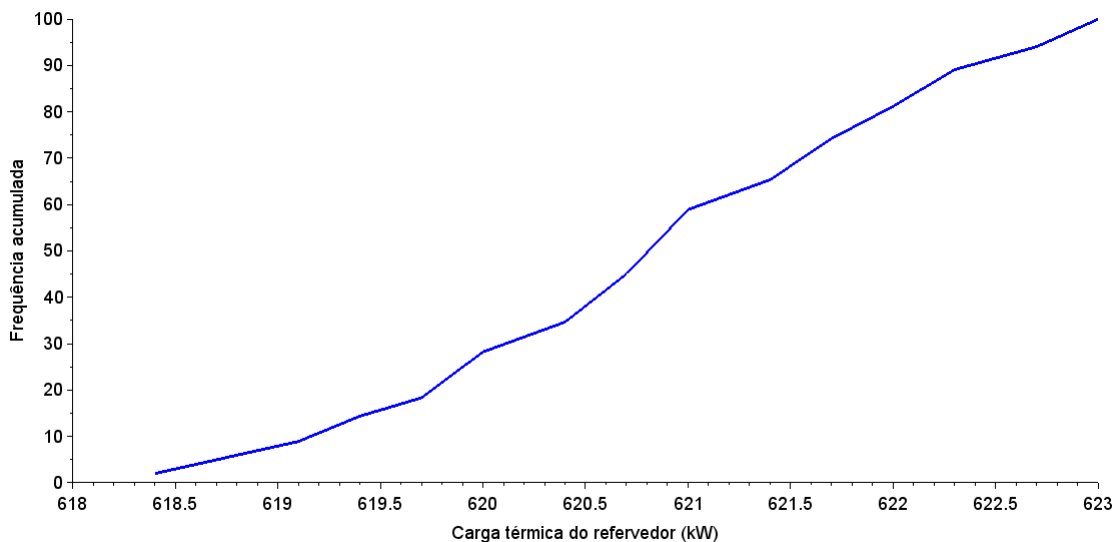
Tabela 20 – Média e desvio padrão das variáveis de saída na simulação estocástica

	Média	Desvio padrão
Vazão mássica (kg/s)	14,3	0,2
Carga térmica (kW)	620,8	1,2
Fração vaporizada mássica (%)	6,7	0,1

Fonte: O autor, 2016.

A Figura 46 apresenta a curva da distribuição de frequência acumulada para a carga térmica do refeededor.

Figura 46 – Curva de frequência acumulada da carga térmica do refeededor



Fonte: O autor, 2016.

Examinando este gráfico, é possível observar que há uma adequação do desempenho do equipamento em relação à demanda do serviço em apenas 81 % das simulações. Como este valor é substancial, a simulação estocástica indica a necessidade de refazer o projeto do trocador, aumentando assim a folga, de maneira a se alcançar uma maior confiabilidade (e.g. 95%).

Este exemplo ilustra como a ferramenta de simulação estocástica pode ser capaz de balizar a margem de segurança do projeto de forma mais precisa do que a abordagem convencional, baseada na experiência do projetista.

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Este capítulo apresenta as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Conclusões

A modelagem e simulação de refervedores é muito importante no projeto desses equipamentos, que são de grande importância na indústria química. O presente trabalho objetivou apresentar a modelagem para sistemas multicomponentes de dois tipos de refervedores, o termossifão vertical e o refervedor com circulação forçada, utilizando um sistema de equações algébrico-diferenciais. A obtenção de resultados que estão de acordo com os comportamentos esperados indica que a modelagem sugerida representou bem o sistema proposto.

Outro importante aspecto nessa modelagem é o equilíbrio líquido-vapor, uma vez que este tem impacto direto nas predições realizadas. Essa avaliação foi realizada de duas maneiras: análise de sensibilidade realizada para o parâmetro de interação binária e comparação de duas formulações distintas no cálculo desses parâmetros.

A análise de sensibilidade dos parâmetros indicou pequenas variações nos resultados do equilíbrio de fases, concluindo-se que variações de 10% nos parâmetros pouco influenciam na simulação do sistema completo.

Ao comparar duas formulações diferentes para o parâmetro de interação binária, obtiveram-se variações relativas que ressaltam o cuidado necessário ao escolher a formulação do parâmetro de interação binária.

A simulação estocástica auxiliou na previsão de resultados mais realistas, sendo necessário refazer o projeto de simulação do refervedor para o exemplo sugerido, em função das incertezas.

Sugestões

- Desenvolvimento da modelagem, levando em consideração os diferentes padrões de escoamento bifásico.
- Desenvolver um modelo dinâmico capaz de descrever o comportamento transiente do refeedor frente a perturbações externas.
- Comparar os resultados obtidos para dados de equilíbrio de fases e entalpia em excesso com resultados experimentais e, se necessário, reestimar os parâmetros.
- Testar o desempenho do algoritmo proposto considerando outras misturas, que contenham substâncias com características diferentes daquelas aqui testadas.
- Implementar outros modelos de G^E , para que se possa selecionar o modelo mais adequado a cada mistura.

REFERÊNCIAS

ARNETH, S.; STICHLMAIR, J. Characteristics of thermosiphon reboilers. *International Journal of Thermal Sciences*, v. 40, p. 385–391, 2001.

BUSSAB, W.O. e MORETTIN, P.A. *Estatística básica*. 5. ed. São Paulo: Saraiva, 2004.

CALDAS, J.N...[et al.]. *Internos de Torres: pratos e recheio*. 2. ed. Rio de Janeiro: Interciência: PETROBRAS, 2007.

ÇENGEL, Y.A. *Transferência de calor e massa: uma abordagem prática*. 3 ed. São Paulo: McGraw-Hill, 2009.

ÇENGEL, Y.A.; GHAJAR, J. *Transferência de calor e massa*. 4 ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 2012.

CHAPRA, S.C.; CANALE, R.P. *Métodos numéricos para engenharia*. 5. ed. [S.l.] Porto Alegre: Editora AMGH, 2011.

CHEN, J.C. A correlation for boiling heat transfer to saturated fluids in convective flow. *Ind. and. Eng Chem.:* process design and development, 5, p.322-329, 1966.

CHEN, J (editor). *Convective flow boiling*. Taylor & Francis Group. USA, 1996.

COKER, K. *Ludwig's applied process design for chemical and petrochemical plants*. 3 ed. [S.l.]: Gulf professional publishing. v. 1. 2007.

COLLIER, J.G. *Boiling within vertical tubes*, in Heat Exchanger Design Handbook. 1 ed. [S.l.]: Hemisphere, v. 2.1983

COSTA, M. J. F. *Aplicação de equações não lineares visando determinar o ponto de operação de sistemas de bombeamento para dois tanques em níveis diferentes*. 2013. 70 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia mecânica) - Universidade Santa Cecília, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Santos, SP, 2013.

FAGHRI, A.; ZHANG, Y. *Transport phenomena in multiphase systems*. 1 ed. Amsterdam: Elsevier, 2006.

FURZER, I. A. Vertical thermosyphon reboilers. Maximum heat flux and separation efficiency. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 29, p. 1396–1404, 1990.

INCROPERA, F.P.; DEWITT, D.P.; BERGMAN, T. L.; LAVINE, A.S. *Fundamentos de Transferência de Calor e Massa*. 6 ed. Rio de Janeiro: LTC- Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2008.

INDIO DO BRASIL, N. *Introdução à engenharia química*. 2. ed. Rio de Janeiro: Interciência: PETROBRAS, 2004.

LAGE, P.L.C.; PINTO, J.C.S. *Métodos numéricos em problemas de engenharia química*. 1 ed. Rio de Janeiro: e-papers serviços editorais, 2001.

MCKEE, H. R. Thermosiphon reboilers: a review. *Industrial & Engineering Chemistry*, n. 45, 1970.

MCNEIL, D. A.; BAMARDOUF, K.; BURNSIDE, B. M.; ALMESHAAAL, M. Investigation of flow phenomena in a kettle reboiler. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 53, n. 5-6, p. 836–848, 2010.

MELAAEN, I.S. and OWREN, G. How Do the Incuracies of Enthalpy and Vapour- Liquid Equilibrium Calculations Influence Baseload LNG Plant Design?, *Computers and Chemical Engineering*, 20, No. 1. p.1,1996.

MIZUTANI, F. T.; COSTA, A. L. H. and PESSOA, F. L. P. Stochastic simulation of supercritical fluid extraction processes. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*. v.17, n.3, p. 307-314, 2000.

MOSTINSKI, I.L. Application of the Rule of Corresponding States for the Calculation of Heat Transfer and Critical Heat Flux, *Teploenergetika*. v. 4. p. 66, 1963.

NUKIYAMA, S. The maximum and minimum values of the heat Q transmitted from metal to boiling water under atmospheric pressure. *Journal Japan Society of Mechanical Engineers*, v. 37, p. 367–374, 1934.

PALEN, J.W. *Thermal design*, in Heat Exchanger Design Handbook. Hemisphere, v. 3. 1983

PERRY, R.H.; GREEN, D.W. Perry's Chemical Engineers' Handbook. 8 th edition. McGraw-Hill. 2008.

PETZOLD, L.R. *A Descriptions of DASSL: A differential/algebraic system solver*, in: Scientific Computing, R.S. Stepleman et al., eds., 65-68, North-Holland, Amsterdam, 1983.

POLING, B.E.; PRAUSNITZ, M.; O'CONNELL, J.P. *The properties of gases and liquids*, 5 ed. [S.l.]: McGRAW-HILL, 2001.

PRASHANT, S.; PARIKH, J.; JAIN, D. Design of a Vertical Thermosyphon Reboiler. *Indian Chemical Engineering Congress 2000*, Technical Sessions Transcriptions. v.1, Calcutta, December 18-21, 2000.

OUYANG, L.; AZIZ, K. Steady-state gas flow in pipes. *Journal of petroleum science and engineering*, v 14. p. 137-158, 1996.

REID, R. C., PRAUSNITZ, J. M. AND POLING, B. E., *The properties of gases and liquids*, 4th ed. New York: McGraw-Hill, 1987.

SANTOS, M. P.; LIMA, E. R. A.; COSTA, A. L. H.; "MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM TERMOSSIFÃO VERTICAL", p. 12536-12543 . In: *Anais do XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química - COBEQ 2014* [Blucher Chemical Engineering Proceedings, v.1, n.2]. São Paulo: Blucher, 2015.

SARMA, N. V. L.; REDDY, P. J.; MURTI, P. S. A Computer Design Method for Vertical Thermosyphon Reboilers. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, v. 12, n. 3, 1973.

Scilab Enterprises S.A.S. *SCILAB, software livre*. Versão 5.5.2. IRIA, 2015, Disponível em: <www.scilab.org>. Acesso em: 30/10/2015.

SERTH, R.W., LESTINA, T. *Process Heat Transfer: Principles, Applications and Rules of Thumb*. 2 ed. [S.l.]: Elsevier, 2014.

SMITH, R. *Chemical process design and integration*. John Wiley & Sons Ltd, Chi Chester, UK. 2005.

SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C.; ABBOTT, M.M. *Introdução à Termodinâmica da*

Engenharia Química. 7 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

SMITH, R.A. *Vaporisers: Selection, Design and Operation*. Longman Scientific and Technical, UK, 1986

SPENCER, C.F.; DANNER, R.P. Improved Equation for Prediction of Saturated liquid Density. *Journal of Chemical and Engineering Data*, v. 17, n.2, 1972.

TEMA, Tubular Exchanger Manufactures Association. *Standards of the tubular exchanger Manufactures Association*. 7th ed. New York: TEMA, 1988.

VIOLA, D. H.L. Estudo experimental e correlação da entalpia em excesso molar de soluções líquidas binárias contendo 1- nonanol ou 1-decanol e acetonitrila a diferentes temperaturas e pressão atmosférica utilizando os modelos ERAS e PFP, 2011.193 f. Dissertação de mestrado- Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química. 2011.

WILSON, G. M. Vapor-Liquid Equilibrium. XI. A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing. *Journal of the American Chemical Society*, v. 86, n. 2, p. 127–130, 1964.

ZAIDI, S. Novel application of Support Vector Machines to model the two phase boiling heat transfer coefficient in a vertical tube thermosiphon reboiler. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 98, p. 1–52, 2015. Institution of Chemical Engineers.

ZINEMANAS, D.; HASSON, D.; KEHAT, E. simulation of heat exchangers with change of phase. *Computers & chemical engineering*, v. 8, n. 6, p. 367–375, 1984.

APÊNDICE A-Tabela 1- Exemplo de coeficientes de atividades (análise de sensibilidade)

γ	Caso base	Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$	Aumento de 10% em $\Lambda_{2,1}$	Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$	Aumento de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e Redução de 10% em $\Lambda_{2,1}$	Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e Aumento de 10% em $\Lambda_{2,1}$	Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$ e $\Lambda_{2,1}$	Redução de 10% em $\Lambda_{2,1}$	Redução de 10% em $\Lambda_{1,2}$
Teste 1- 0,1 (acetona) e 0,9 (água)									
γ_1	4,555	4,399	4,352	4,204	4,607	4,508	4,940	4,769	4,718
γ_2	1,039	1,036	1,038	1,036	1,036	1,041	1,042	1,039	1,042
Teste 2- 0,5 (acetona) e 0,5 (água)									
γ_1	1,411	1,408	1,381	1,379	1,441	1,383	1,447	1,444	1,414
γ_2	1,616	1,597	1,597	1,579	1,615	1,617	1,655	1,635	1,636
Teste 3- 0,9 (acetona) e 0,1 (água)									
γ_1	1,014	1,014	1,012	1,012	1,016	1,012	1,016	1,016	1,014
γ_2	3,469	3,415	3,249	3,199	3,662	3,300	3,777	3,719	3,523

Fonte: O autor, 2016.

APÊNDICE B-Lista de símbolos em ordem alfabética

A	Área de troca térmica	[m ²]
a _{bomba}	Parâmetro da equação da bomba	[m]
a _{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 1.7	[cal/mol]
a _{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 1.8	[-]
b _{bomba}	Parâmetro da equação da bomba	[s/m ² -]
b _{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 1.8	[K]
c _{bomba}	Parâmetro da equação da bomba	[s ² /m ⁵]
c _{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 1.8	[1/K]
C _p	Capacidade calorífica	[J/kg]
D	Diâmetro.	[m]
d _{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 1.8	[1/K]
e _{jk}	Parâmetro utilizado na Eq. 1.8	[K ²]
F	Fator de amplificação	[-]
f	Fator de atrito	[-]
F _c	Fator relativo à presença de uma mistura	[-]
F _{cm}	Fator utilizado no cálculo da viscosidade dos gases	[-]
F _p	Fator relativo à pressão	[-]
F _r	Número de Froude	[-]
g	Aceleração da gravidade	[m/s ²]
G	Fluxo mássico	[kg/(m ² s)]
G ^E	Energia de Gibbs molar em excesso	[J/mol]
h	Coefficiente de transferência de calor por convecção	[W/(m ² K)]
Ĥ	Taxa de entalpia	[J/s]
h _{cb}	Coefficiente de convecção de ebulição convectiva	[W/(m ² K)]
H ^E	Entalpia molar em excesso	[J/mol]
Head	Carga de pressão	[m]
H _j ^{L,sat}	Entalpia de um líquido saturado	[J/mol]
H ^L	Entalpia molar da fase líquida	[J/mol]
h _{nb}	Coefficiente de convecção de ebulição nucleada	[W/(m ² K)]
k	Condutividade térmica	[W/(m K)]
K _j	Razão de equilíbrio	[-]

k_w	Condutividade térmica da parede	[W/(m K)]
\mathcal{L}	Fração de líquido com composição da fase líquida x_j	[-]
L	Comprimento	[m]
L_t	Comprimento do tubo	[m]
mL	Vazão mássica de líquido	[kg/s]
$MMmg$	Massa molar da mistura gasosa	[kg/mol]
$MMml$	Massa molar da mistura líquida	[kg/mol]
m_T	Vazão mássica total	[kg/s]
mV	Vazão mássica de vapor	[kg/s]
N_{tt}	Número total de tubos	[-]
Nu	Número de Nusselt	[-]
Pr	Número de Prandtl.	[-]
$P_{c\text{kPa}}$	Pressão crítica em kPa	[kPa]
Q	Carga térmica	[J/s]
Q_v	Vazão volumétrica	[m ³ /s]
q''	Fluxo de calor por convecção	[W/m ²]
q''_{max}	Fluxo de calor máximo por convecção	[W/m ²]
R	Constante universal dos gases	[J/mol K]
R_{cond}	Resistência de condução na parede	[K/W]
R_{conv}	Resistências de convecção	[K/W]
$R_{\text{depósito}}$	Resistência térmica devido à incrustação	[K/W]
Re	Número de Reynolds	[-]
R_f	Resistência de depósito	[m ² K/W]
s	Fator de supressão	[-]
T	Temperatura	[K]
T_b	Ponto de ebulição normal	[K]
T_{br}	Razão entre o ponto de ebulição normal e temperatura crítica	[-]
T_{cm}	Temperatura crítica da mistura	[K]
T_H	Temperatura da corrente quente	[K]
T'_m	Temperatura da mistura	[K]
Tr	Temperatura reduzida	[-]
T_{ref}	Temperatura referência	[K]

T_{sat}	Temperatura de saturação	[K]
T_w	Temperatura da parede	[K]
U	Coefficiente global de transferência de calor	[W/(m ² K)]
u_r	Estimação da taxa de deslizamento	[m/s]
V	Volume molar	[cm ³ /mol]
v	Velocidade	[m/s]
V_{cm}	Volume crítico da mistura	[cm ³ /mol]
V_m	Volume molar da mistura	[cm ³ /mol]
V_r	Taxa de fluxo volumétrico de vapor em relação ao líquido	[-]
W	Taxa de trabalho realizado	[J/s]
W_e	Número de weber	[-]
x	Fração molar da fase líquida	[-]
x_g	Fração vaporizada	[-]
X_{tt}	Parâmetro de Martinelli	[-]
Z_{RAm}	Cálculo da constante modificada da eq. de Rackett	[-]
y	Composição da fase vapor	[-]
z	Composição global	[-]
Letras gregas		
γ	Coefficiente de atividade	[-]
ΔH_j^v	Calor de vaporização do componente j.	[J/mol]
ΔT_e	Excesso de temperatura	[K]
ΔT_{eA}	Excesso de temperatura no ponto A (Figura 1)	[K]
ΔT_{eC}	Excesso de temperatura no ponto C (Figura 1)	[K]
ΔT_{eD}	Excesso de temperatura no ponto D (Figura 1)	[K]
ΔT_{eE}	Excesso de temperatura no ponto E (Figura 1)	[K]
ΔH_{vb}	Entalpia de vaporização no ponto de ebulição normal	[J/mol]
ε_g	Fração de vazios	[-]
ϵ	Parâmetro utilizado no cálculo da viscosidade da mistura líquida	[-]
ϵ_m	Parâmetro utilizado no cálculo da viscosidade da mistura líquida	[-]
$(\epsilon/k)_m$	Razão entre a energia característica e a constante de Boltzman	[K]

θ	Ângulo	[rad]
κ_m	Fator de associação da mistura	[-]
k_{jk}	Parâmetro de interação binária cálculo da massa específica da mistura de líquidos	[-]
Λ_{jk}	Parâmetro de interação binária	[-]
μ	Viscosidade	[Pa.s]
μ_m	Momento de dipolo da mistura	[debyes]
μ_{rm}	Momento dipolar adimensional	[-]
\mathcal{V}	Fração vaporizada	[-]
ξ	Parâmetro de interação binária utilizado no cálculo da viscosidade da mistura de gases	[-]
ζ	Parâmetro de interação binária utilizado no cálculo da viscosidade da mistura de gases	[-]
ρ	Massa específica	[kg/m ³]
σ	Tensão superficial	[n/m]
σ_m	Diâmetro molecular	[Å]
ϕ_i	Fração de volume superficial	[-]
ϕ_{10}^2	coeficiente calculado para adequar o termo referente ao atrito monofásico para o bifásico	[-]
ψ_{ij}	Parâmetro de interação binária utilizado no cálculo da viscosidade da mistura líquida.	[-]
Ω_v	Integral da colisão para viscosidade	[-]

Subscritos

bol	Bolha
c	Crítico
e	externo
go	Somente vapor
H	Corrente quente
i	Interno
lo	Somente líquido
orv	Orvalho
sat	Saturação
tp	Bifásico

tph Bifásico homogêneo

ANEXO A- Produção científica

Este anexo apresenta a produção científica desenvolvida durante o mestrado e é apresentado apenas a primeira página do artigo completo.

Congresso: XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química – COBEQ 2014. De 19 a 22 de outubro de 2014. Centro Sul. Florianópolis, SC, Brasil.

⇒ Título: Modelagem e simulação de um termossifão vertical. Autores: M. P. SANTOS, E. R. A. LIMA, A. L. H. COSTA

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UM TERMOSSIFÃO VERTICAL

M. P. SANTOS, E. R. A. LIMA, A. L. H. COSTA

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química
E-mail para contato: mischellepaiva@gmail.com

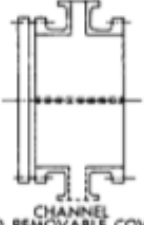
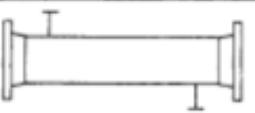
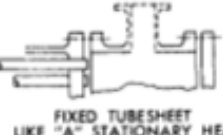
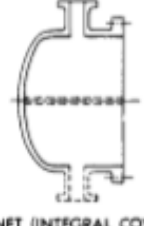
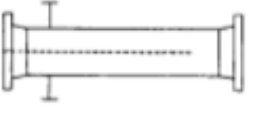
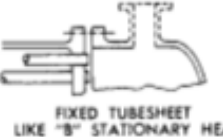
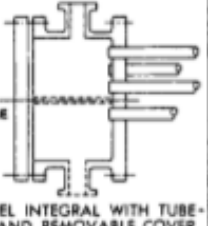
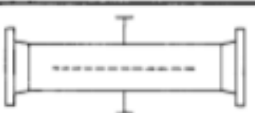
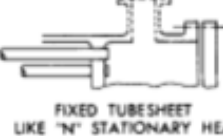
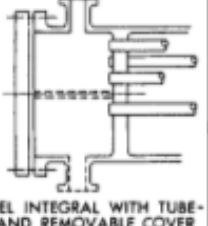
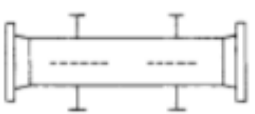
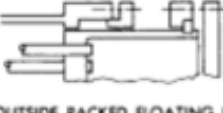
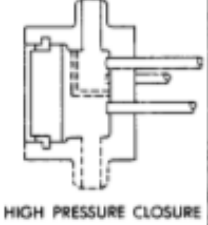
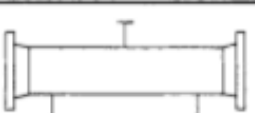
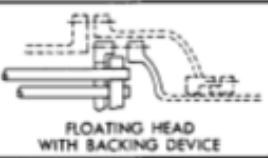
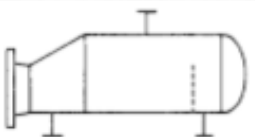
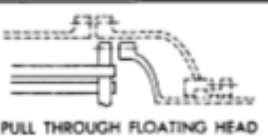
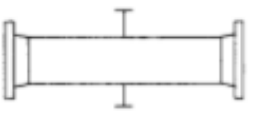
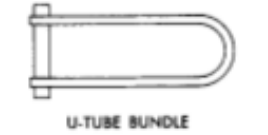

RESUMO – Destilação é uma das técnicas de separação mais utilizadas no âmbito da indústria de processos químicos. Um elemento fundamental na operação de uma coluna de destilação corresponde ao refeedor, equipamento responsável por fornecer energia para o fracionamento. Em função desta condição, este trabalho apresenta a modelagem e simulação de um sistema completo de vaporização do tipo termossifão contendo todo o circuito, desde a saída da torre de destilação até o retorno da corrente bifásica. O modelo proposto corresponde a um sistema de equações algébrico-diferenciais contemplando balanços de massa, energia e momento. A aplicação do algoritmo proposto é ilustrada através de um exemplo referente à vaporização de uma substância pura, sendo possível descrever os perfis de distribuição de pressão, temperatura e vazão de líquido e vapor ao longo do circuito.

1. INTRODUÇÃO

A destilação possibilita a obtenção de produtos mais ricos em determinados componentes, por meio da interconexão de estágios de equilíbrio. Nesses estágios, uma corrente de vapor cruza com uma corrente de líquido, trocando calor e massa. O vapor ao percorrer o equipamento se enriquece dos componentes mais voláteis, enquanto o líquido dos componentes mais pesados (Caldas et al., 2007). Esses sistemas necessitam de trocadores de calor, com o objetivo de fornecer calor ao fundo da coluna, refeedores, e para remover calor do topo da coluna, condensadores (Indio do Brasil, 2004).

Uma alternativa de refeedor muito utilizada na prática corresponde ao termossifão vertical. Neste equipamento, a circulação da corrente de processo ocorre em função da diferença de densidade entre a coluna de líquido proveniente da torre e a mistura bifásica na saída do trocador de calor. Neste tipo de equipamento o mais comum é que a vaporização ocorra no interior dos tubos.

ANEXO B – Padrão TEMA para trocadores de calor casco-e-tubos

	FRONT END STATIONARY HEAD TYPES		SHELL TYPES		REAR END HEAD TYPES
A	 CHANNEL AND REMOVABLE COVER	E	 ONE PASS SHELL	L	 FIXED TUBESHEET LIKE "A" STATIONARY HEAD
B	 BONNET (INTEGRAL COVER)	F	 TWO PASS SHELL WITH LONGITUDINAL BAFFLE	M	 FIXED TUBESHEET LIKE "B" STATIONARY HEAD
C	 REMOVABLE TUBE BUNDLE ONLY CHANNEL INTEGRAL WITH TUBE- SHEET AND REMOVABLE COVER	G	 SPLIT FLOW	N	 FIXED TUBESHEET LIKE "N" STATIONARY HEAD
N	 CHANNEL INTEGRAL WITH TUBE- SHEET AND REMOVABLE COVER	H	 DOUBLE SPLIT FLOW	P	 OUTSIDE PACKED FLOATING HEAD
D	 SPECIAL HIGH PRESSURE CLOSURE	J	 DIVIDED FLOW	S	 FLOATING HEAD WITH BACKING DEVICE
		K	 KETTLE TYPE REBOILER	T	 PULL THROUGH FLOATING HEAD
		X	 CROSS FLOW	U	 U-TUBE BUNDLE
				W	 EXTERNALLY SEALED FLOATING TUBESHEET

Fonte: TEMA, 1978 sar PERRY, R.H.; GREEN, D.W., 2008