

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Pedro Luís Invernici

AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PRATOS VALVULADOS DE
DOIS PASSES COM *DOWNCOMER* DE UMA COLUNA DE
DESTILAÇÃO INDUSTRIAL

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Porto Alegre

2009

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

Pedro Luís Invernici

AVALIAÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PRATOS VALVULADOS DE
DOIS PASSES COM *DOWNCOMER* DE UMA COLUNA DE
DESTILAÇÃO INDUSTRIAL

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia. Área de concentração: Modelagem e Simulação de Processos Químicos

Orientadores: Prof. Dr. Argemiro Resende Secchi

Profa. Dra. Talita Furlanetto Mendes

Porto Alegre
2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A comissão examinadora, abaixo assinada, aprova a dissertação **“Avaliação da eficiência de pratos valvulados de dois passes com *downcomer* de uma coluna de destilação industrial”**, elaborada por **Pedro Luís Invernici**, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Nilson Romeu Marcílio - UFRGS

Prof. Dr. Rafael de Pelegrini Soares - UFRGS

Prof. Dr. Paulo Ernani Bauer – PUC-RS

Agradecimentos

Aos meus professores orientadores Argimiro Resende Secchi e Talita Furlanetto Mendes pelo incentivo, paciência e disponibilidade;

Aos professores Ligia Damasceno, Nilson Romeu Marcilio e Dimitrios Samios pelo apoio e conhecimentos transmitidos;

Ao meu amigo e Mestre em Engenharia Tito Livio Domingues pelas discussões sobre destilação e apoio incondicional durante o mestrado;

Aos meus colegas de operação e manutenção da Braskem – UNIB-RS, em especial para Alberi Demetrios, João Carlos Winter e Pedro Ambrosi, pelos ensinamentos das práticas e equipamentos de destilação;

Ao meu colega, engenheiro Jaime Affonso Hoefel pelo incentivo e oportunidade de fazer o mestrado;

À Sílvia Catarina Rossi, funcionária da biblioteca da Escola de Engenharia da UFRGS, pelas incansáveis buscas por artigos e publicações;

Ao Patrício Jose da Silva Freitas, secretário do PPGEN, pelo bom humor e resolução das questões administrativa junto ao PPGEQ.

A minha querida esposa Carla e aos meus filhos
Enrico e Laura pelo amor, compreensão, incentivo e carinho

RESUMO

Este trabalho aborda a predição da eficiência de pratos valvulados de dois passes, de escoamento cruzado com *downcomers* de uma coluna de destilação industrial, através do uso de diferentes modelos com e sem o uso do método *Stagnant Regions Model* proposto por Lockett em 1986. Contrariando o esperado, poucos artigos foram publicados sobre as principais características de pratos valvulados e bem menos sobre eficiência de pratos valvulados de dois passes. Os resultados encontrados sugerem que a correlação de O'Connell, o modelo de Chan e Fair aplicado aos pratos valvulados de dois passes convertidos para um passe e o modelo de Chan e Fair com uso do método *SRM* são os que melhor predizem a eficiência de pratos valvulados de dois passes, de escoamento cruzado com *downcomers*, no caso estudado. Em consonância com os estudos prévios, a correlação de O'Connell subestima o valor da eficiência, mostrando-se levemente conservativa, enquanto as predições pelo uso do modelo de Chan e Fair e do modelo modificado de Chan e Fair com uso do comprimento equivalente proposto por Klemola e Ilme superestimam o valor da eficiência, mostrando-se levemente não-conservativas.

Palavras-chaves: Destilação Fracionada. Eficiência de Prato. Colunas de Destilação.

ABSTRACT

This work approaches the prediction of the efficiency of two passes, crossflow valve trays with downcomers of an industrial distillation column, through the use of different models with and without the use the *Stagnant Regions Model*, method proposed by Lockett in 1986. Contradicting what it could be expected, few papers were published about the main characteristics of valve trays and fewer about efficiency of two passes valve trays. The results suggest that the O'Connell's correlation, the model of Chan and Fair applied to the two passes valve trays converted for one pass valve tray and the model of Chan and Fair with *SRM* method are those that best predict the efficiency of two passes, crossflow valve trays with downcomers. In consonance with the previous published studies, the O'Connell's correlation underestimates the value of the efficiency, showing a slightly conservative value, while the predictions using Chan and Fair model and the modified Chan and Fair model with equivalent length proposed by Klemola and Ilme overestimates the value of the efficiency, showing a slightly non-conservative results.

Key-words: Fractionated Distillation. Tray Efficiency. Distillation Columns.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Maturidade tecnológica e de uso dos processos de separação.....	33
Figura 1.2: Pratos com escoamento cruzado	36
Figura 1.3: Desenho esquemático de prato com dois passes.	37
Figura 1.4: Fotografia de um prato valvulado, com quatro passes, <i>downcomers</i> laterais e fluxo cruzado	37
Figura 1.5: Prato de dois passes Superfrac	38
Figura 2.1: Balanço de um componente no elemento diferencial da dispersão.	45
Figura 3.1: Representação esquemática da localização das zonas de transferência de massa usada por Prado (1986) e Prado e Fair (1990).	64
Figura 3.2: Modelo de transferência de massa da dispersão acima de prato perfurado.....	78
Figura 3.3: Representação esquemática a dispersão acima de prato perfurado considerada por Syeda et al. (2007).	80
Figura 3.4: Modelo da estrutura da espuma em um prato perfurado	80
Figura 4.1: Parâmetros do prato	96
Figura 4.2: Perfil de concentração do componente mais volátil do vapor que sai do prato.....	97
Figura 4.3: Representação dos três casos de Lewis	99
Figura 4.4: Comparação entre os critérios hidráulicos e de eficiência para troca do número de passes dos pratos	109
Figura 4.5: Padrões de escoamento de líquido em pratos de dois passes	110
Figura 4.6: Mudanças nas regiões de estagnação com aumento da vazão de líquido (fluxo das laterais para o centro) em pratos de dois passes	110
Figura 4.7: Padrão de escoamento de líquido considerado por Lime et al., 1974	111
Figura 4.8: Padrão de escoamento de líquido considerado por Porter <i>et al.</i> (1974)	111
Figura 4.9: Razão das eficiências x número do prato de duplo passe.....	114
Figura 5.1: Diagrama de blocos do programa em Fortran 77 para predição de E_{OC}	129
Figura 5.2: Algoritmo para o cálculo da eficiência de prato aparente de Murphree (E_{MV}^a) e eficiência global da coluna (E_{OC}).	131
Figura 5.3: Algoritmo para o cálculo da eficiência global da coluna (E_{OC}) de O'Connell.	132
Figura 6.1: Fluxograma da coluna fracionadora de butadieno	135
Figura 6.2: Eficiências de Murphree de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) de cada prato	140
Figura 6.3: Eficiências de prato de Murphree usando o modelo de Chan e Fair e o de Garcia com uso de C_E de Klemola e Ilme de cada prato.....	141
Figura 6.4: Comparação das eficiências globais preditas (E_{OC}) em relação à eficiência global ajustada no simulador para a fracionadora de butadieno – sem o modelo SRM.....	145
Figura 6.5: Eficiências de prato de Murphree usando o modelo de Chan e Fair e o de Garcia com uso do modelo SRM.....	150
Figura 6.6: Eficiências de prato de Murphree usando o modelo de Chan e Fair e o de Garcia com uso de C_E de Klemola e Ilme e do modelo SRM.	150
Figura 6.7: Comparação das eficiências globais (E_{OC}) em relação à eficiência global ajustada no simulador para a coluna testada – uso do modelo SRM	153

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1:	Modelos empíricos de predição de eficiências.....	54
Tabela 3.2:	Modelos teóricos e semi-empíricos de uma única zona sobre o prato baseados na teoria dos dois filmes para a predição de eficiências	55
Tabela 3.3:	Modelos teóricos ou semi-empíricos de múltiplas zonas sobre o prato com modelo hidrodinâmico para a de predição de eficiências	57
Tabela 3.4:	Cálculo do fator Φ	72
Tabela 3.5:	Equações para determinação dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor e líquida.....	75
Tabela 3.6:	Distribuição do tamanho de bolhas para prato perfurado.....	85
Tabela 4.1:	Dados de projeto e teste da fracionadora de butadieno	95
Tabela 4.2:	Perfis de temperaturas da fracionadora de butadieno.....	118
Tabela 4.3:	Perfis de composições da fracionadora de butadieno.....	119
Tabela 4.4:	Momento dipolar dos hidrocarbonetos.....	120
Tabela 4.5:	Difusividades calculadas para o pseudo-binário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a fracionadora de butadieno.....	122
Tabela 4.6:	Desvios no balanço de massa por componente da coluna.....	123
Tabela 6.1	Dados de projeto da coluna.....	136
Tabela 6.2:	Eficiência de Murphree	138
Tabela 6.3:	E_{MV} usando modelo de Garcia e as composições de Chan e Fair e O'Connell	139
Tabela 6.4:	Composições de topo e fundo e eficiências globais (E_{OC}) da fracionadora de butadieno	143
Tabela 6.5:	Parâmetros geométricos dos pratos utilizados para os cálculos das eficiências da coluna....	146
Tabela 6.6:	E_{MV} com o modelo de Garcia utilizando as composições de Chan e Fair e O'Connell e uso do <i>SRM</i>	148
Tabela 6.7:	Eficiência de Murphree utilizando o modelo <i>SRM</i>	148
Tabela 6.8:	Composições de topo e fundo e eficiências globais (E_{OC}) da coluna testada	151
Tabela 6.9:	Comparação das eficiências calculadas pelo modelo de Garcia (1999) com as eficiências calculadas pelo modelo de Chan e Fair (1984) e Chan e Fair (1984) modificado	154
Tabela A-1:	Condições operacionais com balanço de massa ajustado da fracionadora de butadieno	169
Tabela A-2:	Composição ajustada das correntes da fracionadora de butadieno.....	170
Tabela B-1:	Programa em Fortran 77 para cálculo de eficiência de prato de dois passes, com fluxo cruzado e downcomer - pratos pares e ímpares.....	171
Tabela B-2:	Programa em Fortran 77 para calculo de eficiência de prato de dois passes, com fluxo cruzado e downcomer - pratos pares e ímpares com o modelo <i>SRM</i>	186
Tabela B-3:	Programa em Fortran 77 para cálculo de eficiência de prato de dois passes convertido para um passe utilizando C_E proposto por Klemola e Ilme (1997b)	202

LISTA DE SIGLAS

A_A	Área ativa do prato ou de borbulhamento ($A_T - 2.A_D$), m ²
A_D	Área do downcomer, m ²
A_H	Área perfurada do prato, m ²
A_N	Área <i>net</i> do prato ($A_T - A_D$), m ²
A_S	Área <i>slot</i> do prato (equações 5.1 e 5.2), m ²
A_T	Área total da seção transversal da coluna, m ²
A_J	Fração de bolhas pequenas presentes na espuma
a	Área interfacial por unidade de volume, m ² /m ³
a'	Área interfacial por unidade de volume de vapor, m ² /m ³
$\bar{a}$	Área interfacial por unidade de volume de líquido, m ² /m ³
b	Intersecção da curva de equilíbrio para um binário
C	Constante da Equação 3.9
C_{SB}	Fator de capacidade do prato, m/s
De	Difusividade turbulenta (<i>eddy</i>) para a mistura líquida, m ² /s
D_G	Coefficiente de difusão molecular de um componente na mistura de vapor ou difusividade na fase vapor, m ² /s
D_L	Coefficiente de difusão molecular de um componente na mistura de líquido ou difusividade na fase líquida, m ² /s
d_1	Diâmetro do <i>jet</i> , m
d_{32}	Diâmetro médio <i>Sauter</i> da bolha, m
d_B	Diâmetro de bolha, m
d_{BL}	Média aritmética do diâmetro das bolhas grandes nas zonas 2 e 4, m

d_{BLS}	Diâmetro médio <i>Sauter</i> das bolhas grandes na zona 3, m
d_{BS}	Média aritmética do diâmetro das bolhas pequenas nas zonas 2 e 4, m
d_{BSS}	Diâmetro médio <i>Sauter</i> das bolhas pequenas na zona 5, m
d_C	Diâmetro do prato ou interno da coluna, m
d_H	Diâmetro do furo, m
d_{HD}	Diâmetro hidráulico, m
d_{max}	Diâmetro máximo da bolha, m
E_{OC}	Eficiência global da coluna
E_{OG}	Eficiência de ponto
E_{MV}	Eficiência de prato de Murphree na fase vapor
E_{ML}	Eficiência de prato de Murphree na fase líquida
E_{MV}^a	Eficiência de Murphree aparente, leva em conta efeitos de arraste de líquido e gotejamento, para pratos valvulados.
FF	Fator de inundação
FJ	Fração dos furos ativos que estão em <i>jetting</i>
FLB	Fração dos furos ativos que estão produzindo bolhas grandes
FLC	Fração de furos que estão inativos (cobertos por líquido)
FP	Parâmetro de fluxo = $\frac{M_L}{M_G} \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5}$
FPL	Comprimento do caminho do líquido sobre o prato, m
F_S	Fator superficial = $u_A \cdot \rho_G^{0,5}$, $\text{kg}^{0,5} \cdot \text{m}^{-0,5} \cdot \text{s}^{-1}$
FSB	Fração dos furos ativos que estão produzindo bolhas pequenas
G', G_M	Vazão molar de vapor por área de borbulhamento, $\text{kmol} / (\text{m}^2 \cdot \text{s})$

g	Aceleração da gravidade = $9,81 \text{ m/s}^2$
h_I	Altura do <i>jet</i> , m
h_v	Altura da válvula 100% aberta , m
h_B	Altura do leito no regime <i>spray</i> na Equação 3.27, m
h_{CL}	Altura do líquido claro, m
h_{CLD}	Altura do líquido claro dinâmico, m
h_F	Altura da espuma, m
h_W	Altura do vertedouro dos pratos com <i>downcomer</i> , m
$K_{OG,k}$	Coefficiente global de transferência de massa na fase vapor, m/s
K_{OG}	Coefficiente global de transferência de massa na fase vapor, $\text{kmol} / (\text{m}^2.\text{s})$
$k_{G,k}$	Coefficiente de transferência de massa na fase vapor, m/s
k_G	Coefficiente de transferência de massa na fase vapor, $\text{kmol} / (\text{m}^2.\text{s})$
$k_{L,k}$	Coefficiente de transferência de massa na fase líquida, m/s
k_L	Coefficiente de transferência de massa na fase líquida, $\text{kmol} / (\text{m}^2.\text{s})$
k'_G	Coefficiente de transferência de massa na fase vapor, m/s
k'_L	Coefficiente de transferência de massa na fase líquida, m/s
(L'/L)	Fração de líquido arrastada em relação ao total de líquido descendo pela coluna
L', L_M	Vazão molar de líquido por área de borbulhamento, $\text{kmol} / (\text{m}^2.\text{s})$.
L_{WE}	Comprimento da corda de pratos com <i>downcomer</i>
M_G	Vazão mássica de vapor, kg/s
M_L	Vazão mássica de líquido, kg/s
MW_G	Massa molecular da mistura de líquido, kg/kmol
MW_L	Massa molecular da mistura de vapor, kg/kmol

m	Inclinação da curva de equilíbrio de um sistema binário, dy / dx
N_v	Número de válvulas do prato
N_k	Taxa molar, kmol/s
N	Fluxo molar, kmol/(s.m ²)
N_G	Número de unidades de transferência de massa na fase vapor
N_{G1}	Zona 1
N_{G2L}	Zona 2, bolhas grandes
N_{G2S}	Zona 2, bolhas pequenas
N_{G3}	Zona 3
N_{G4L}	Zona 4, bolhas grandes
N_{G4S}	Zona 4, bolhas pequenas
N_{G5}	Zona 5
N_{G6}	Zona 6
N_{GFJ}	Zonas 1, 2 e 6
N_{GFLB}	Zonas 3, 4 e 6
N_{GFSB}	Zonas 5 e 6
N'_L	Número de unidades de transferência de massa na fase líquida.
N_{L1}	Zona 1
N_{L2L}	Zona 2, bolhas grandes
N_{L2S}	Zona 2, bolhas pequenas
N_{L3}	Zona 3
N_{L4L}	Zona 4, bolhas grandes
N_{L4S}	Zona 4, bolhas pequenas

N_{L5}	Zona 5
N_{L6}	Zona 6
N_{LFI}	Zonas 1, 2 e 6
N_{LFLB}	Zonas 3, 4 e 6
N_{LFSB}	Zonas 5 e 6
N_L	Número de unidades de transferência de massa na fase líquida,
N_{OG}	Número global de unidades de transferência de massa na fase vapor
N_T	Número de estágios teóricos
N_R	Número de pratos reais da coluna
p	Distância entre furos (<i>pitch</i> triangular), m
Q_G	Vazão volumétrica de vapor, m ³ /s
Q_L	Vazão volumétrica de líquido, m ³ /s
T	Espessura do prato, m
T_s	Espaçamento entre pratos, m
t_G	Tempo de residência médio na fase vapor, s
t_{G1}	Tempo de residência do vapor no <i>jet</i> , s
t_{G2L}	Tempo de residência das bolhas grandes na dispersão da zona 2, s
t_{G2S}	Tempo de residência das bolhas pequenas na dispersão da zona 2, s
t_{G4L}	Tempo de residência das bolhas grandes na dispersão da zona 4, s
t_{G4S}	Tempo de residência das bolhas pequenas na dispersão da zona 4, s
t_{G3}	Tempo de residência das bolhas grandes na dispersão da zona 3, s
t_{G5}	Tempo de residência das bolhas pequenas na dispersão da zona 5, s
t	Tempo de residência médio na fase líquida, s

u_A	Velocidade superficial do gás baseado na área ativa (A_A) ou de borbulhamento (A_b), m/s
u_{AT}	Velocidade superficial do gás baseado na área ativa no ponto de transição do regime espuma para <i>spray</i> , m/s
$u_{A,0}$	Velocidade superficial do gás, baseado na área ativa, a 0 % de <i>jetting</i> , m/s
$u_{A,100}$	Velocidade superficial do gás, baseado na área ativa, a 100 % de <i>jetting</i> , m/s
u_{BSS}	Velocidade terminal de subida das bolhas d_{BSS} na zona 5, m/s
u_B	Velocidade de subida de uma simples bolha, m/s
u_F	Velocidade de inundação do prato, m/s
u_H	Velocidade do vapor através dos furos, m/s
u_J	Velocidade através dos <i>jets</i> , m/s
u_{SB}	Velocidade terminal de subida das bolhas pequenas (d_{BS}) nas zonas 2 e 4, m/s
u_{LB}	Velocidade terminal de subida das bolhas grandes (d_{BL}) nas zonas 2 e 4, m/s
u_{LB3}	Velocidade de subida das bolhas na zona 3, m/s
u_N	Velocidade superficial baseada na A_N , m/s
u_{HD}	Velocidade superficial do gás , baseada no diâmetro do furo, m/s
u_{CBP}	Velocidade superficial do gás, ponto de balanço da válvula fechado, m/s
u_{CBO}	Velocidade superficial do gás, ponto de balanço da válvula aberto m/s
V_o	Fração de válvulas abertas
W_F	Fluxo de gotejamento
X_{LK}	Fração molar do pseudo-binário chave leve no líquido
x_{hk}	Fração molar do chave pesado no líquido
x_{lk}	Fração molar do chave leve no líquido
x	Fração molar no líquido

x_i	Fração molar no líquido na interface
x_n	Valor de x no líquido deixando um ponto no prato n
$\overline{x_n}$	Valor médio de x no líquido deixando o prato n via <i>downcomer</i>
x^*	Fração molar no líquido que está em equilíbrio com o vapor
Y_{LK}	Fração molar do pseudo-binário chave leve no vapor
y_{hk}	Fração molar do chave pesado no vapor
y_{lk}	Fração molar do chave leve no vapor
y	Fração molar no vapor
y_i	Fração molar no vapor na interface
y_n	Valor de y no vapor deixando um ponto no prato n
$\overline{y_n}$	Valor médio de y no vapor deixando o prato n
y^*	Fração molar no vapor que está em equilíbrio com o líquido
y_n^0	Valor de y no vapor deixando um ponto no prato n na saída do vertedouro
y_n^*	Fração molar no vapor em equilíbrio com o líquido que deixa o prato n via <i>downcomer</i>

Letras gregas

α_E	Fração volumétrica de líquido efetiva na espuma, definida na Equação 2.34
α	Volatilidade relativa entre os componentes chaves
α	Fração volumétrica de líquido na espuma (<i>holdup</i> de líquido)
ε	Fração volumétrica de vapor na espuma (<i>holdup</i> de vapor)
θ	Tempo de contato de um elemento da interface gás-líquido, s
κ	Constante do modelo de Prado (1986)

λ	Razão entre a inclinação da curva de equilíbrio e da linha de operação $\lambda = m \cdot \left[\left(\frac{M_G}{MW_G} \right) \middle/ \left(\frac{M_L}{MW_L} \right) \right]$
μ_G	Viscosidade da fase vapor, Pa.s = kg/(m.s) = N.s/m ²
μ_L	Viscosidade da fase líquida, Pa.s = kg/(m.s) = N.s/m ²
ρ_G	Massa específica da fase vapor, kg/m ³
ρ_L	Massa específica da fase líquida, kg/m ³
ρ'_G	Massa específica da fase vapor, kmol/m ³
ρ'_L	Massa específica da fase líquida, kmol/m ³
ρ_{AR}	Massa específica do ar = 1,183 kg/m ³
σ	Tensão superficial, N/m
ϕ	Fração perfurada do prato (A_H/A_A)
Φ	Fator de correção, Equação 2.140

Números adimensionais

$$Eo \quad \text{Número de Eotvos} = Eo = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot d_{BS}}{\sigma}$$

$$Fr_h \quad \text{Número de Froude} = Fr_h = u_H \cdot \left(\frac{\rho_G}{g \cdot h_{CL} \cdot (\rho_L - \rho_G)} \right)^{0,5}$$

$$Mo \quad \text{Número de Morton} = Mo = \frac{g \cdot \mu_L^4 \cdot (\rho_L - \rho_G)}{\rho_L^2 \cdot \sigma^3}$$

$$Pe_G \quad \text{Número de Peclet} = Pe_G = \frac{d_B \cdot u_B}{D_G}$$

$$Re_I \quad \text{Número de Reynolds do } jet = Re_I = \frac{d_I \cdot u_J \cdot \rho_G}{\mu_G}$$

$$Re \quad \text{Número de Reynolds da bolha} = Re = \frac{d_B \cdot u_B \cdot \rho_L}{\mu_L}$$

$$Re_H \quad \text{Número de Reynolds do furo} = Re_H = \frac{d_H \cdot u_H \cdot \rho_G}{\mu_G}$$

$$Sc_G \quad \text{Número de Schmidt na fase gás} = Sc_G = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D_G}$$

$$Sh_\infty \quad \text{Número de Sherwood} = Sh_\infty = \frac{k'_G \cdot d_B}{D_G}$$

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	31
1.1 DESTILAÇÃO	31
1.2 EFICIÊNCIAS DE PRATO	33
1.3 FATORES QUE AFETAM A EFICIÊNCIA NA DESTILAÇÃO	34
1.4 GEOMETRIAS DOS PRATOS VALVULADOS	35
1.5 MÉTODOS PARA ESTIMATIVA DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO	38
1.6 OBJETIVOS DO TRABALHO.....	39
1.7 ESTRUTURAS DO TRABALHO	41
 2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS	 43
2.1 CONCEITOS DE EFICIÊNCIA	43
2.1.1 Eficiência Global da Coluna.....	43
2.1.2 Eficiência de Ponto	44
2.1.3 Eficiência de Prato de Murphree	48
2.1.4 Relação entre as Eficiências de Ponto, de Prato de Murphree e Global da Coluna.....	49
2.1.5 Eficiência de Prato em Separações Multicomponentes – Método Pseudo-binário.....	50
 3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	 53
3.1 MODELOS DE PREDIÇÃO DE EFICIÊNCIAS	53
3.2 MODELOS DE PREDIÇÃO DE EFICIÊNCIAS UTILIZADOS	59
3.2.1 Correlação de O’Connell (1946)	59
3.2.2 Modelo de Chan e Fair (1984).....	60
3.2.3 Modelo de Klemola e Ilme (1996)	61
3.2.4 Modelo de Klemola e Ilme (1996) Adaptado a Pratos Valvulados de Dois Passes	62
3.3.5 Modelo de Garcia (1999) e Garcia e Fair (2000)	63
3.3.6 Modelo de Syeda, Afacan e Chuang (2007).....	79
 4 HIDRÁULICA DOS PRATOS.....	 89
4.1 RETENÇÕES DE LÍQUIDO E VAPOR NO PRATO.....	89
4.2 MODIFICAÇÕES NO MODELO DE HIDRÁULICA DOS PRATOS	90
4.2.1 Fator de Inundação e de Capacidade Aplicados ao Modelo de Chan e Fair	91
4.2.2 Fração de Válvulas Abertas e Área <i>Slot</i> do Prato	92

4.2.3 Área dos <i>Downcomers</i> , Área Ativa e Área Net para Pratos de Dois Passes	95
4.3 MODELOS DE MISTURA DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO	97
4.3.1 Difusividade Turbulenta	103
4.4 EFICIÊNCIAS DOS PRATOS VALVULADOS DE DOIS PASSES	104
4.4.1 Efeito da Geometria dos Pratos na Distribuição de Líquido e Vapor entre os Vários Passes.....	104
4.4.2 Modelo de Regiões Estagnadas – <i>SRM</i>	105
4.4.3 Critérios para Escolha de Pratos com um Passe ou Dois Passes no Projeto de Colunas de Destilação	107
4.5 MODELOS PARA ARRASTE E GOTEJAMENTO DE LÍQUIDO.....	115
4.6 MODELO TERMODINÂMICO	117
4.6.1 Seleção do Modelo para a Fracionadora de Butadieno.....	117
4.6.2 Estimativa das Propriedades Físicas.....	120
4.6.3 Ajuste dos Balanços de Massa	122
4.6.4 Desvios dos Resultados em Relação aos Valores do Testda Coluna.....	123
4.6.5 Seqüência do Trabalho.....	124
 5 METODOLOGIA PROPOSTA PARA O CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS	 127
5.1 DIAGRAMA DE BLOCO PARA PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA GLOBAL.....	127
5.2 ALGORITMO PARA CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE PRATO DE MURPHREE... ..	130
 6 ANÁLISE DOS RESULTADOS	 133
6.1 A COLUNA AVALIADA.....	133
6.1.1 Fluxograma Simplificado de Processo da Coluna Avaliada	134
6.2 EFICIÊNCIAS DE PRATO DE MURPHREE – MODELOS E MODIFICAÇÕES PROPOSTAS.....	136
6.2.1 Modelos de Mistura sobre o Prato e a Eficiência de Prato de Murphree.....	137
6.2.2 Eficiência de Murphree - Modelos de Chan e Fair e Garcia	138
6.2.3 Eficiência de Murphree – Modelos Modificados de Chan e Fair e Garcia Considerando o Comprimento Equivalente Proposto por Klemola e Ilme	140
6.3 EFICIÊNCIA GLOBAL DA COLUNA	142
6.3.1 Eficiência de Global – Resultados	142
6.3.2 Eficiência Global – Correlação de O’Connell	143
6.4 EFICIÊNCIAS DE PRATO DE MURPHREE – MODELOS PROPOSTOS AJUSTADOS PELO MÉTODO DAS REGIÕES ESTAGNADAS	146
6.4.1 Eficiência de Prato de Murphree - Modelos de Chan e Fair e de Garcia com Uso do Modelo SRM para os Pratos Pares.....	147

6.5 EFICIÊNCIAS GLOBAIS DA COLUNA – MODELOS PROPOSTOS COM USO DO MODELO <i>SRM</i>	151
6.6 MODELOS DE GARCIA – PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PONTO	154
7 CONCLUSÕES.....	157
REFERÊNCIAS.....	161
OBRAS CONSULTADAS.....	165
APÊNDICE A – CONDIÇÕES OPERACIONAIS DO TESTE DA COLUNA DE BUTADIENO	169
APÊNDICE B – PROGRAMAS FORTRAN 77.....	171

1 INTRODUÇÃO

1.1 DESTILAÇÃO

Processos de separação situam-se no centro da tecnologia da indústria química, de polímeros e de energia. Literalmente, milhares de produtos são concentrados, fracionados e purificados obtendo-se a pureza e recuperação requerida a preços razoáveis.

Não é um exagero afirmar que a moderna indústria química e de energia não poderia existir sem o apoio de numerosos e bem desenvolvidos processos de separação para realizar uma infinidade de tarefas requeridas para produzir seus produtos. Produtos, esses, vitais para nosso bem estar material e econômico.

Foram identificadas mais de 50 diferentes classes de processos de separação. Estes processos são utilizados em uma espantosa variedade de aplicações, desde técnicas analíticas, que utilizam microgramas de materiais, até separações de grandes quantidades de materiais (KING *apud* KELLER, 1987).

Há várias maneiras para caracterizar o campo das separações: por tipo da operação de separação (concentração, fracionamento e purificação); pela quantidade de produtos separados, por custos, etc.

Não é incomum na área de petróleo e petroquímica que os investimentos em equipamentos de separação sejam responsáveis por mais da metade dos investimentos nas plantas.

Outro aspecto importante dos custos totais de uma planta de petróleo e petroquímica são os custos operacionais onde, os custos dos processos de separação, por utilizarem grande quantidade de energia são, em geral, os componentes mais significativos dos custos.

Em 1984, foi estimado que o total de energia consumida pela indústria química e de petróleo dos Estados Unidos situava-se em torno de 2,9 milhões de barris de petróleo por dia. Deste total, ao redor de 30%, equivalente a 870 mil barris por dia, foi devido a processos de

separação de misturas, sendo que a maior parte era consumida por processos de destilação (BRAVO 1984 *et al. apud* KELLER, 1987).

A destilação é uma grande consumidora de energia, uma vez que envolve o fornecimento de calor latente para vaporização de toda, se não quase toda a carga a ser destilada. Do ponto de vista termodinâmico, a destilação é intrinsecamente ineficiente, uma vez que grande parte da energia fornecida é dissipada na condensação da corrente de vapor de topo, a menos que, o calor removido no condensador seja utilizado em algum outro ponto do processo.

Então, a pergunta óbvia é: porque a destilação, sendo um processo tão ineficiente do ponto de vista energético, parece ser a escolha mais econômica dentro da indústria de petróleo e de química orgânica para separar misturas?

A resposta a esta pergunta emerge do trabalho realizado por Keller (1987). O baixo custo do investimento da destilação, quando comparado aos outros processos de separação, a simplicidade mecânica, a demonstração de que a destilação está muito próxima de seu grau máximo de maturidade tecnológica, ou seja, quase tão boa quanto poderá ser, e seu amplo uso responde, em grande parte a pergunta formulada.

A maturidade tecnológica da destilação, Figura 1.1, deverá permitir somente a otimização do processo. Dificilmente surgirão inovações neste campo, que poderia levar a novos usos.

Por outro lado, empresas que competem no mesmo mercado, podem, através de otimizações do processo de destilação, criar um diferencial comparativo, permitindo um aumento de sua competitividade.

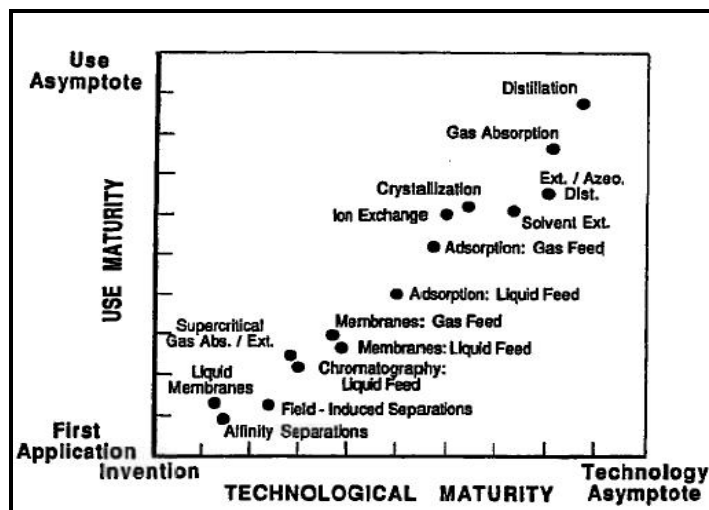


Figura 1.1: Maturidade tecnológica e de uso dos processos de separação

Fonte: KELLER, 1987.

1.2 EFICIÊNCIAS DE PRATO

O grande avanço no desenvolvimento de ferramentas computacionais (simuladores de processos químicos) e de modelos termodinâmicos, com ênfase nas equações de estado, vem permitindo a determinação do número de estágios teóricos de colunas de destilação com crescente precisão.

Entretanto, relativamente pouca atenção tem sido dada para a sua conversão para número de estágios ou pratos reais. Em parte, isto resulta do problema complexo de modelagem dos fenômenos de duas fases que existem na zona de contato, onde a transferência de massa ocorre. A predição da eficiência de ponto (E_{OG}) é um problema de transferência de massa líquido-vapor, enquanto a conversão para eficiência de prato (E_{MV}) é um problema de geometria e hidráulica do prato (GARCIA; FAIR, 2000a *apud* DOMINGUES, 2005).

Cada vez menos dados e métodos para estimativa da eficiência de prato são publicados pelos detentores de tecnologia de fabricação de bandejas. Além disso, os métodos publicados ainda são relativamente imprecisos (KLEMOLA; ILME, 1996 *apud* DOMINGUES, 2005).

A eficiência de prato é um fator crucial no projeto e na análise de colunas de destilação porque relaciona o número de estágios teóricos com o número de pratos reais.

O procedimento normal de projeto é calcular o número de estágios teóricos com ajuda de modelos rigorosos, disponíveis nos pacotes de simuladores comerciais. A conversão para pratos reais requer a predição da eficiência local (eficiência de ponto, E_{OG}), seguida pela transformação deste valor para o prato inteiro (eficiência de Murphree, E_{MV}). Deste último valor, o número requerido de pratos reais na coluna é calculado, através da eficiência global (E_{OC}).

A eficiência de ponto (E_{OG}) é relacionada com a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) através do uso de correlações que levam em conta o escoamento do fluido sobre o prato. Um importante parâmetro para o projeto do prato, que afeta sua eficiência, é o comprimento do caminho do líquido (KLEMOLA; ILME, 1997a).

É um desafio conseguir a melhor seqüência de métodos e correlações para a estimativa da eficiência global de uma coluna, sabendo que uma operação unitária tão bem estudada quanto à destilação sofre de uma quantidade grande de problemas de predição de eficiência não resolvidos (GARCIA; FAIR, 2000a). Este problema tem sido chamado de “a última fronteira” no desenvolvimento da tecnologia da destilação (GARCIA, 1999 *apud* DOMINGUES, 2005).

1.3 FATORES QUE AFETAM A EFICIÊNCIA NA DESTILAÇÃO

Na destilação, a maior separação possível com uso de pratos é atingida quando a fase vapor e a fase líquida, que saem do mesmo prato, estão em equilíbrio. A este estágio dá-se o nome de estágio ideal ou prato teórico.

Na prática, as condições de equilíbrio entre o vapor e o líquido são raramente atingidas. As eficiências são usadas para comparar a separação de um prato real da separação de um prato teórico inserindo as não-idealidades nos modelos de separação por estágios de equilíbrio.

Os fatores que afetam as eficiências podem ser divididos em três grupos: fatores estruturais, fatores de sistema e propriedades físicas e os fatores funcionais.

Os fatores funcionais são, por exemplo, regime de escoamento, arraste de líquido, gotejamento, fluxo canalizado e inundação.

Entre os fatores de sistema e propriedades físicas incluem-se, por exemplo, tensão superficial, densidades de líquido e vapor, coeficientes de difusão, viscosidades, concentrações, pressão e temperatura.

Os fatores estruturais que mais afetam a eficiência são: o padrão de escoamento, o tipo do prato, o espaçamento entre pratos, o número de passes, a altura dos vertedouros e *downcomers* (KLEMOLA; ILME, 1997a).

1.4 GEOMETRIAS DOS PRATOS VALVULADOS

Na análise da geometria de pratos valvulados dois tipos destacam-se:

- a) Pratos valvulados de escoamento cruzado com um passe;
- b) Pratos valvulados de escoamento cruzado com mais de um passe (*multipasse*).

Os pratos valvulados possuem uma relação entre a produção de vapor normal de operação ou de projeto pela mínima produção admitida de vapor na qual a eficiência é satisfatória (*turndown ratio*) maior quando comparada aos pratos perfurados, o que permite maior flexibilidade na operação da coluna de destilação dotada de pratos valvulados. Da mesma forma, a eficiência dos pratos valvulados é, em geral, maior quando comparada a eficiência dos pratos perfurados.

Neste prato, o líquido esco para o prato de baixo através do *downcomer* e, então, horizontalmente através da área de contato vapor-líquido do prato extravasando pelo vertedouro para o próximo *downcomer*.

O prato valvulado de fluxo cruzado de um passe para promover o contato entre o vapor e líquido com transferência de massa é o tipo mais simples usado na destilação e são os mais encontrados na indústria, Figura 1.2.

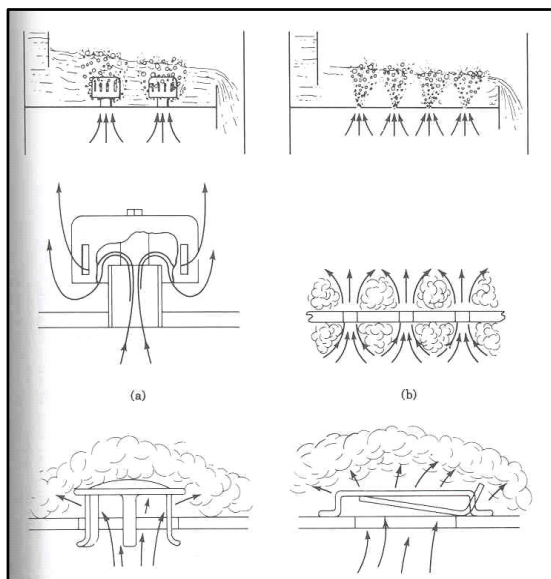


Figura 1.2: Pratos com escoamento cruzado

Fonte: KISTER (1992 *apud* DOMINGUES, 2005).

Entretanto, quando a vazão de líquido é proporcionalmente mais alta, comparada com a vazão de vapor, ou quando o diâmetro da coluna é grande, é necessário utilizar pratos de dois, três e, às vezes, até mais passes para melhorar as características hidráulicas do escoamento.

A geometria dos pratos valvulados de dois passes de fluxo cruzado difere significativamente da geometria de pratos de um passe. No prato de dois passes, o líquido escoar para o prato de baixo através de dois *downcomers* laterais e, então, horizontalmente através de duas áreas de contato vapor-líquido do prato inferior (dois painéis), extravasando pelo vertedouro para o *downcomer* central e assim sucessivamente, conforme Figura 1.3.

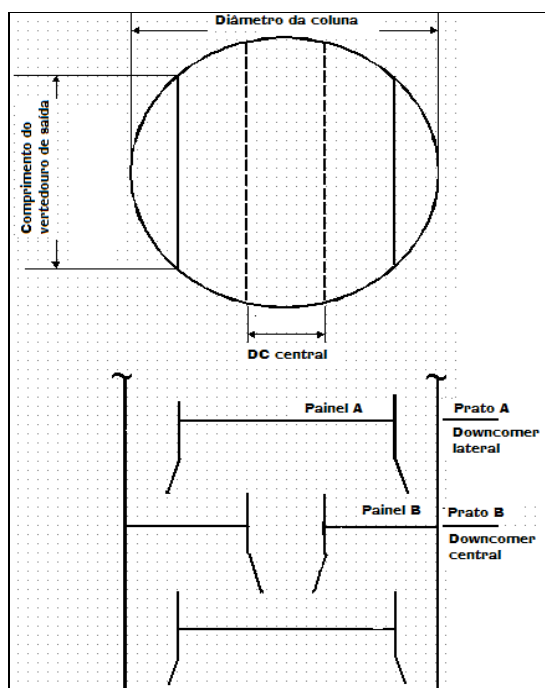


Figura 1.3: Desenho esquemático de prato com dois passes.

Fonte: AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS, 1958.

A Figura 1.4 mostra uma fotografia de um prato valvulado real de quatro passes com *downcomers* e fluxo cruzado.

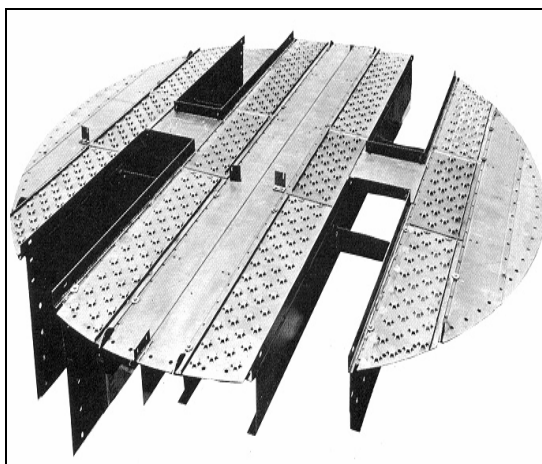


Figura 1.4: Fotografia de um prato valvulado, com quatro passes, *downcomers* laterais e fluxo cruzado

Fonte: NAVAES, 2007.

A Figura 1.5 apresenta pratos de última geração, que possuem alta capacidade, ou seja, admitem vazões internas de líquido e vapor maiores do que em pratos convencionais sem ocorrer inundação. São pratos de alta eficiência, proporcionada pelo aumento da área de borbulhamento, por promotores de escoamento na saída dos *dowcomers* e válvulas que possuem leve inclinação, melhorando o escoamento do líquido sobre o prato e, conseqüentemente, a transferência de massa entre as fases vapor e líquida.



Figura 1.5: Prato de dois passes Superfrac

Fonte: KOCH-GLITSCH, 2009.

Os mecanismos de transferência de massa sobre o prato de alta performance são similares aos utilizados para pratos valvulados, perfurados e de borbulhadores. No entanto, dadas as características geométricas peculiares destes pratos, é importante o bom entendimento dos modelos de mistura a serem aplicados para a correta determinação de sua eficiência.

1.5 MÉTODOS PARA ESTIMATIVA DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Vários métodos empíricos e semi-empíricos têm sido propostos para a determinação da eficiência de ponto e de prato.

Neste trabalho, especial atenção será dada aos modelos de O'Connell (1946), Chan e Fair (1984), Garcia (1999) e modificações nos últimos dois modelos pela introdução do conceito de comprimento equivalente (C_E) proposto por Klemola e Ilme (1997b).

A correlação de O'Connell (1946) vem sendo usada como padrão na indústria durante décadas. Baseia-se na volatilidade relativa (α) e na viscosidade do líquido (μ_L) da carga, ambas tomadas na média aritmética da temperatura no topo e no fundo da coluna.

O modelo de Chan e Fair (1984) é considerado um aperfeiçoamento do método do AIChE (LOCKETT, 1986), possui uma abordagem da hidrodinâmica do prato menos complexa quando comparada ao modelo de Garcia (1999). O modelo é recomendado para simuladores e é de fácil convergência. Foi desenvolvido para pratos perfurados, com borbulhadores e valvulados (KLEMOLA; ILME, 1997a *apud* DOMINGUES, 2005).

Klemola e Ilme (1997b) propuseram um método de cálculo da eficiência de Murphree (E_{MV}), onde a geometria dos pratos com dois passes é convertida para a geometria de prato de passe, mantendo-se a área ativa do prato e o diâmetro da coluna constantes. O comprimento do caminho do líquido para prato de um passe equivalente deve ser considerado como a soma dos comprimentos dos caminhos do líquido do prato de dois passes.

Garcia (1999) apresentou um modelo teórico para estimar a eficiência de pratos perfurados com *downcomer*. Foi um aperfeiçoamento do modelo proposto por Prado (1986), para sistemas não-aquosos, no qual foram consideradas três regiões: a região próxima aos furos, onde o gás pode estar em regime de escoamento de jato (*jet*) ou borbulhamento, a região de espuma, a qual é composta por bolhas de gás dispersas no líquido e a zona de spray.

1.6 OBJETIVOS DO TRABALHO

Nesse trabalho, propõe-se avaliar a eficiência de pratos valvulados de escoamento cruzado de dois passes com *downcomer*, utilizando vários métodos que permitem o cálculo dos pratos pares e ímpares, os quais possuem geometrias diferentes.

Tens-se a intenção de ampliar os estudos de Domingues (2005) que buscou estabelecer caminhos apropriados para a estimativa da eficiência de pratos valvulados de um passe com *downcomer* e pratos *dualflow*.

Os valores da eficiência global (E_{OC}) são estimados pelo modelo de Garcia (1999), de Chan e Fair (1984), de O'Connell (1946) e dos modelos modificados de Garcia (1999) e de Chan e Fair (1984) com a introdução do conceito de comprimento equivalente proposto por Klemola e Ilme (1997b), sendo após, relacionados à eficiência global (E_{OC}) real obtida em testes de campo de uma coluna industrial.

Os objetivos específicos deste trabalho foram:

- a) Identificar o modelo termodinâmico e os métodos para estimativa das propriedades físicas dos fluidos envolvidos na separação que mais reproduzem o perfil real de temperatura e composições de topo e de fundo de uma coluna fracionadora de butadieno obtidas nos testes de campo e modelar a coluna no simulador Aspen Plus 2006;
- b) Relacionar a eficiência global (E_{OC}), o perfil de temperatura e as composições de topo e de fundo obtidas em testes de campo de uma coluna de destilação industrial com a eficiência global (E_{OC}), os perfis de temperatura e as composições de topo e de fundo obtidas pelo modelo de Garcia (1999), de Chan e Fair (1984), de O'Connell (1946) e dos modelos modificados de Garcia (1999) e de Chan e Fair (1984);
- c) Modificar a rotina de cálculo implementada por Domingues (2005) no *software* Aspen Plus 2006 para o cálculo da eficiência de pratos valvulados de dois passes com *downcomer*, disponibilizando-a para uso;
- d) Estabelecer qual ou quais métodos são os mais apropriados para o cálculo da eficiência de pratos valvulados com dois passes.

1.7 ESTRUTURAS DO TRABALHO

Este trabalho está estruturado em 7 capítulos. No Capítulo 2 são apresentados os fundamentos teóricos utilizados na área de eficiências de colunas de destilação. O capítulo 3 apresenta a revisão bibliográfica dos diversos modelos para predição da eficiência, dando ênfase aos modelos utilizados no trabalho.

O Capítulo 4 trata dos principais parâmetros referentes à hidráulica de pratos, sua influência na eficiência, bem como o modelo termodinâmico escolhido que melhor se ajusta às condições de operação da coluna.

O diagrama de blocos e algoritmos que demonstram a seqüência de passos e equações para o cálculo de eficiências de pratos e eficiência global de uma coluna de destilação é tema do Capítulo 5.

No Capítulo 6, os resultados dos cálculos relativos aos diversos modelos de eficiência são comparados e analisados frente aos dados coletados em teste de campo de uma coluna fracionadora de butadieno. Por fim, no Capítulo 7, são apresentadas as principais conclusões, juntamente com sugestões para trabalhos futuros.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste Capítulo, são apresentados os fundamentos teóricos utilizados para o cálculo de eficiência de pratos e de colunas de destilação.

2.1 CONCEITOS DE EFICIÊNCIA

A clara compreensão dos conceitos básicos utilizados para o cálculo de eficiência de ponto, de pratos e global de colunas de destilação em muito auxilia no entendimento deste trabalho. A apresentação, na literatura, destes conceitos nem sempre é clara e, frequentemente, gera mal entendido e confusões.

2.1.1 Eficiência Global da Coluna

O primeiro passo para decidir qual a quantidade de pratos reais que devem ser instalados em uma coluna para atender uma determinada separação é usar um programa de simulação para calcular o número de pratos teóricos. A maioria dos programas permite fixar a pureza e a recuperação dos produtos de topo e fundo da coluna para os componentes chaves e, então, calcular o refluxo correspondente a um número assumido de pratos teóricos. Com isso, pode-se construir uma curva do número de pratos teóricos x taxa de refluxo, a qual é usada para decidir a apropriada combinação destas duas variáveis a ser utilizada no projeto.

A escolha deve levar em consideração, ainda, os custos de utilidades, o custo do investimento, a possibilidade de integração energética com o resto da planta, limitações de altura da coluna e um estudo de sensibilidade do desempenho da coluna pelas incertezas das relações de equilíbrio líquido-vapor e de eficiências dos pratos (LOCKETT, 1986).

A eficiência global da coluna (E_{OC}) é definida como a razão entre o número de estágios teóricos (N_T) requeridos para uma determinada separação, a uma razão de refluxo especificada, e o número de pratos reais da coluna (N_R), para o mesmo refluxo.

$$E_{OC} = \frac{N_T}{N_R} \quad (2.1)$$

2.1.2 Eficiência de Ponto

A eficiência de ponto (E_{OG}) é definida pela variação da fração molar de um componente em um ponto do prato pela variação na fração molar desse componente, no mesmo ponto, que deveria ocorrer considerando o estágio teórico. Na equação 2.2, tomou-se como referência a fase vapor.

$$E_{OG} = \left(\frac{y_n^0 - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}} \right) \quad (2.2)$$

Como a fração molar do componente em um dado ponto do prato não pode exceder a de equilíbrio, a eficiência de ponto (E_{OG}) é sempre menor que 1.

Os fundamentos teóricos da eficiência de ponto são apresentados por Kister (1992) e discutidos em termos da teoria de transferência de massa de *dois filmes*. A teoria baseia-se na resistência à transferência de massa entre os filmes de vapor e líquido na interface de vapor-líquido. A taxa de difusividade molar de um componente, N_k (kmol/s) é dada por:

$$N_k = k_{Gk} \cdot a \cdot \rho_{m^*G} (y_i - y) = k_{Lk} \cdot a \cdot \rho_{m^*L} (x - x_i) = K_{OGk} \cdot a \cdot \rho_{m^*G} (y^* - y) \quad (2.3)$$

A área de interface total, a_i , pode ser expressa em termos da área interfacial específica e do volume da espuma (*froth*):

$$a = a' \cdot A_B \cdot h_F \quad (2.4)$$

Combinando as Equações 2.3 e 2.4 e usando a forma diferencial sobre o elemento da espuma dh_f obtém-se:

$$dN_k = K_{OG,k} \cdot a' \cdot \rho_m' \cdot G \cdot (y^* - y) \cdot A_B \cdot dh_F \quad (2.5)$$

O balanço material para o elemento diferencial mostrado na Figura 2.1 resulta em:

$$dN_k = G_M \cdot A_B \cdot dy = L_M \cdot A_B \cdot dx \quad (2.6)$$

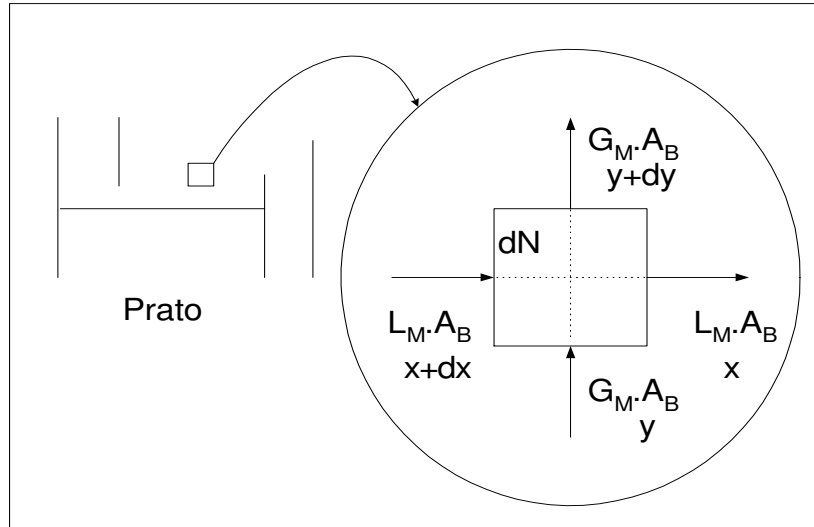


Figura 2.1: Balanço de um componente no elemento diferencial da dispersão.

Fonte: Figura adaptada de KISTER, 1992.

Combinando as Equações 2.5 e 2.6, integrando os números de unidades de transferência N_G , N_L e N_{OG} tem-se:

$$N_G = \int \frac{dy}{y_i - y} = \frac{K_{G,k} \cdot a_i \cdot h_f \cdot \rho_{M,G}}{G_M} \quad (2.7)$$

$$N_L = \int \frac{dx}{x - x_i} = \frac{K_{L,k} \cdot a_i \cdot h_f \cdot \rho_{M,L}}{L_M} \quad (2.8)$$

$$N_{OG} = \int \frac{dy}{y^* - y} = \frac{K_{OG,k} \cdot a_i \cdot h_f \cdot \rho_{M,G}}{G_M} \quad (2.9)$$

onde y^* é, nesta equação, a composição do vapor em equilíbrio com a composição do seio (*bulk*) da mistura líquida x , que para uma linearização local da curva de equilíbrio assume a forma:

$$y^* = m \cdot x + b \quad (2.10)$$

e o equilíbrio na interface é considerado como:

$$y_i = m \cdot x_i + b \quad (2.11)$$

Combinando as Equações 2.10 a e 2.11 com a Equação 2.3, tem-se:

$$\frac{1}{K_{OG,k}} = \frac{1}{k_{G,k}} + \frac{m}{k_{L,k}} \cdot \frac{\rho_{M,G}}{\rho_{M,L}} \quad (2.12)$$

Combinando as Equações 2.12 com 2.9 resulta em:

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{\lambda}{N_L} \quad (2.13)$$

onde,

$$\lambda = m \cdot \frac{G_M}{L_M} \quad (2.14)$$

A equação 2.13 é a relação fundamental usada para adicionar as resistências à transferência de massa do componente nos filmes líquido e do vapor.

Os fatores $h_f \cdot \rho_{M,G} / G_M$ e $h_f \cdot \rho_{M,L} / L_M$ são os tempos de resistência do vapor (t_G) e do líquido (t_L) na espuma. Reescrevendo as Equações 2.7 e 2.8, obtêm-se:

Para a fase vapor:

$$N_G = k_{G,k} \cdot a'_i \cdot t_G \quad (2.15)$$

e para a fase líquida:

$$N_L = k_{L,k} \cdot a_i \cdot t_L \quad (2.16)$$

A derivação das equações acima assume que o vapor escoar para cima em escoamento empistonado e que não há mistura horizontal de vapor e o líquido flui horizontalmente em escoamento empistonado e sem mistura vertical.

Lockett (1986) modificou a definição de N_L e derivou uma equação análoga à Equação 2.12, onde o número global de unidades de transferência de massa é obtido a partir

do número individual de unidades de transferência de massa na fase líquida e vapor, N'_L e N_G , respectivamente:

$$\frac{1}{N_{OG}} = \frac{1}{N_G} + \frac{\lambda}{N'_L} \quad (2.17)$$

onde,

$$N'_L = \frac{k_L \cdot a \cdot h_f}{L'} = N_L \cdot \lambda \quad (2.18)$$

e

$$\lambda = m \cdot \frac{G'}{L'} \quad (2.19)$$

Finalmente, a eficiência de ponto é obtida a partir do número global de unidades de transferência de massa (N_{OG}), referido à fase vapor, usando:

$$E_{OG} = 1 - \exp(-N_{OG}) \quad (2.20)$$

2.1.3 Eficiência de Prato de Murphree

A equação que define a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) é semelhante à que define a eficiência de ponto, exceto que se toma a concentração média da mistura de vapor que sai e que entra no prato n .

$$E_{MV} = \left(\frac{\bar{y}_n - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}} \right) \quad (2.21)$$

A eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) representa a variação da concentração de um componente no estágio real pela variação da concentração do mesmo componente que deveria ocorrer considerando o estágio teórico, onde a mistura de vapor que sai do prato n está em equilíbrio com o líquido que sai do mesmo prato.

Se o líquido e o vapor forem perfeitamente misturados, a eficiência de prato Murphree (E_{MV}) irá coincidir com a eficiência de ponto (E_{OG}), em qualquer ponto do prato. Esta condição é admitida para pratos *dualflow* (DOMINGUES, 2005).

A existência de um gradiente de concentração do componente no líquido que escoar sobre o prato, resulta em um aumento da eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), fazendo com que, em alguns casos, essa eficiência exceda a 100%.

2.1.4 Relação entre as Eficiências de Ponto, de Prato de Murphree e Global da Coluna

A relação entre a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) e a eficiência de ponto (E_{OG}), depende de modelo de mistura do líquido acima do prato, que são abordados na Seção 4.3.

A partir da eficiência de prato de Murphree pode-se estimar a eficiência da coluna utilizando a Equação 2.22, quando as inclinações das linhas de equilíbrio e de operação forem constantes:

$$E_{OC} = \frac{\ln[1 + E_{MV}(\lambda - 1)]}{\ln \lambda} \quad (2.22)$$

onde λ é a razão entre a inclinação da curva de equilíbrio (m) e a curva de operação:

$$\lambda = m \cdot \frac{\left[\frac{M_G}{MW_G} \right]}{\left[\frac{M_L}{MW_L} \right]} = m \cdot \frac{G'}{L'} \quad (2.23)$$

2.1.5 Eficiência de Prato em Separações Multicomponentes – Método Pseudo-binário

Em misturas binárias, a eficiência dos dois componentes é idêntica, mas em separações multicomponentes as eficiências dos componentes são diferentes.

Kister (1992) detalha as razões para estas diferenças, chamando a atenção para as diferentes difusividades dos componentes, tanto na fase vapor como na líquida, e para as diferentes inclinações da curva de equilíbrio (m) e curvas de operação (L'/G') de cada componente.

Segundo Lockett (1986 *apud* DOMINGUES, 2005) para misturas binárias e um componente qualquer, a inclinação da curva de equilíbrio entre os pratos $n + 1$ e n pode ser aproximada pela Equação 2.24.

$$m_i = \frac{(y_i)_{n+1} - (y_i)_n}{(x_i)_{n+1} - (x_i)_n} \quad (2.24)$$

Para sistemas multicomponentes, a determinação da inclinação da curva de equilíbrio é feita pelo uso do procedimento proposto por Chan e Fair (1984b). O procedimento, chamado de método pseudo-binário, é simples e de fácil aplicação. (KISTER, 1992). O único cuidado é ter algum conhecimento para a seleção dos componentes chave-leve e chave-pesado (LOCKETT, 1986 *apud* DOMINGUES, 2005).

A aplicação do método pseudo-binário dá-se, primeiramente, pelo cálculo do teor do pseudo-chave leve nas fases vapor e líquida.

$$Y_{LK} = \frac{y_{lk}}{y_{lk} + y_{hk}} \quad (2.25)$$

$$X_{LK} = \frac{x_{lk}}{x_{lk} + x_{hk}} \quad (2.26)$$

e, após, calcula-se a inclinação da curva de equilíbrio:

$$m = \frac{(Y_{LK})_{n+1} - (Y_{LK})_n}{(X_{LK})_{n+1} - (X_{LK})_n} \quad (2.27)$$

A simplicidade, boa aceitabilidade (KISTER, 1992) e a fácil implementação levaram-nos a adotar o método pseudo-binário neste trabalho.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo é apresentada uma revisão dos trabalhos publicados sobre os modelos para predição das eficiências, os quais podem ser classificados em empíricos, semi-empíricos e teóricos. São sumarizados os principais modelos para predição das eficiências de ponto (E_{OG}), de prato (E_{MV}) e global (E_{OC}) usados em destilação. Também são descritos com maiores detalhes os modelos de Garcia (1999), de Chan e Fair (1984), de O'Connell (1946) e os modelos modificados de Garcia (1999) e de Chan e Fair (1984) com a introdução do conceito de comprimento equivalente proposto por Klemola e Ilme (1997b).

3.1 MODELOS DE PREDIÇÃO DE EFICIÊNCIAS

De uma forma geral, podem-se classificar os modelos de predição de eficiência em empíricos, teóricos ou semi-empíricos associados a modelos hidrodinâmicos que consideram a dispersão do líquido e vapor sobre os pratos. Quase todos os modelos são oriundos do método do AIChE (KISTER, 1992 *apud* DOMINGUES, 2005).

Os modelos empíricos permitem uma rápida estimativa da eficiência global de uma coluna de destilação, são mais simples, porém, via de regra, menos precisos. Já os modelos teóricos ou semi-empíricos são utilizados para estimar a eficiência de ponto (E_{OG}) e são baseados na teoria da transferência de massa nos *dois filmes*.

Os modelos teóricos ou semi-empíricos associados a modelos hidráulicos (mecanicistas) consideram os efeitos da dinâmica dos fluídos sobre os pratos, que determinam a estrutura de dispersão, ou seja, a área de contato entre as fases vapor e líquida nos pratos. O regime de escoamento influencia diretamente a eficiência por afetar a área interfacial.

Em sua dissertação de mestrado, Domingues (2005) faz uma extensa revisão bibliográfica sobre os modelos de cálculo de eficiências, que está sumarizada nas Tabelas 3.1 a 3.3.

Tabela 3.1: Modelos empíricos de predição de eficiências

Modelo	Principais Características	Referências Bibliográficas
MÉTODOS EMPÍRICOS		
Predição através da eficiência global de colunas reais	É a rota preferida pelos projetistas Baseia-se em encontrar uma coluna real, onde o tipo de prato, vazões internas e os fluídos sejam parecidos com a coluna em projeto e verificar a viabilidade de uso dos valores de eficiência no projeto da nova coluna. A desvantagem do método é que poucos dados são publicados na literatura sobre torres existentes.	Dribka e Biddulph (1986) Klemola e Ilme (1996) Kister (1992)
Drickamer e Bradford (1943)	Coletânea de dados de eficiência de 54 colunas de refinarias. Concluíram que os valores das eficiências estavam relacionados com a média da viscosidade molar da carga líquida da coluna	Garcia (1999)
Scale-up de coluna piloto para uma coluna comercial	Considera que não há redução de eficiência entre uma coluna piloto e uma coluna industrial desde que ambas as colunas operem com o mesmo fator de inundação (FF) e no mesmo regime hidráulico. A coluna piloto deve operar em refluxo total e sejam tomados cuidados com as regiões estagnadas da coluna Colunas <i>Oldershaw</i> possuem resultados confiáveis de eficiência de ponto e estes dados podem ser usados no projeto de colunas comerciais. A eficiência de ponto deve ser corrigida para os efeitos de mistura de líquido e vapor para que a eficiência global seja obtida	Kister (1992) Chan e Fair (1984a)
O'Connell (1946)	Usada como padrão na indústria durante décadas É um complemento aos dados de 54 colunas de refinarias coletados por Drickamer e Bradford (1943) O'Connell acrescentou dados de 32 colunas comerciais e cinco colunas de laboratório a base de dados de Drickamer e Bradford (1943) incluindo na base de dados separação de hidrocarbonetos, compostos clorados e misturas de álcoois. Modificou a correlação de Drickames e Bredford (1943) correlacionando o valor da eficiência global da coluna com o produto da viscosidade média molar e a volatilidade relativa dos componentes chaves presentes na carga, ambos estimados na temperatura média do topo e fundo da coluna No caso de pratos perfurados e valvulados, as predições são superestimam levemente o valor da eficiência.	Lockett (1986) Kister (1992)
MacFarland, Sigmund e Van Winkle (1972)	Correlação usada para estimar a eficiência de prato de Murphree Expressa em termos de grupos adimensionais que incluem as propriedades do líquido e do vapor, baseada em dados binários para pratos com borbulhadores e perfurados. Autores relatam um desvio médio absoluto em relação aos valores experimentais de 10,6%	Macfarland <i>et al.</i> (1972) Kister (1992)

Tabela 3.2: Modelos teóricos e semi-empíricos de uma única zona sobre o prato baseados na teoria dos dois filmes para a predição de eficiências

Modelo	Principais Características	Referências Bibliográficas
MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS DE UMA ÚNICA ZONA SOBRE O PRATO Modelos para a predição da eficiência de ponto baseados na teoria de transferência de massa nos dois filmes. Usam uma sequência de passos para converter as resistências das fases líquida e gasosa na eficiência de prato		
AICHe (1958)	Patrocinado por companhias americanas em conjunto com o Comitê de Pesquisa do Instituto Americano dos Engenheiros Químicos (1952) Método para predição da eficiência limitada a pratos com borbulhadores Diversos autores reportam grandes erros quando do uso do método	AICHe (1958) Lockett (1986) Chan e Fair (1984) Bennett <i>apud</i> Domingues (2005)
Chan e Fair (1984)	Considerada um aperfeiçoamento do método do AICHe. Apresentou um melhor ajuste dos dados experimentais A correlação foi baseada em um extenso banco de dados de misturas de hidrocarbonetos, álcoois e ácidos orgânicos. Foi desenvolvido para pratos perfurados, podendo ser aplicada para pratos valvulados A falta de uma correlação aceitável para o parâmetro FF dificulta o uso do método quando é requerida precisão na estimativa da eficiência de ponto É recomendado para em simuladores por ser de fácil convergência.	Chan e Fair <i>apud</i> Domingues (2005) Lockett (1986) Kister (1992). Klemola e Ilme (1997a)
Zuiderweg (1982)	O modelo é baseado em dados do FRI (Fractionation Research Institute) e em expressões semi-teóricas para k'_G A resistência à transferência de massa na fase líquida predita por este modelo é maior que a do modelo do AICHe A influência da difusividade ou da viscosidade é muito baixa no valor de k'_L , deixando a escolha de qual correlação utilizar, à facilidade de encontrar a propriedade física. A inclusão da tensão superficial é uma questão em aberto. Quando são usados os dados do FRI é difícil decidir qual propriedade física é a mais importante	Zuiderweg (1982) Lockett (1986)

continua

Modelo	Principais Características	Referências Bibliográficas
MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS DE UMA ÚNICA ZONA SOBRE O PRATO Modelos para a predição da eficiência de ponto baseados na teoria de transferência de massa nos dois filmes. Usam uma sequência de passos para converter as resistências das fases líquida e gasosa na eficiência de prato		
Chen e Chuang (1994)	A área interfacial é estimada a partir da teoria da dispersão e os coeficientes de transferência de massa são determinados a partir da teoria da penetração de HIGBIE (1935). Baseado em seis misturas binárias, ciclohexano/n-heptano, metanol/n-propanol, etanol/n-propanol, ácido acético/água, benzeno/n-heptano e metanol/água.	Chen e Chuang <i>apud</i> Domingues (2005) Garcia (1999)
Stichlmair (1978)	As equações para o cálculo dos coeficientes de transferência de massa, k'_G e k'_L, são baseadas na teoria da penetração de Higbie (1935) A dificuldade de uso do modelo de Stichlmair está em prever F_S max. Como consequência, a eficiência para o regime de spray é incorretamente prevista em muitas situações, quando $F_S/F_{S\max} > 0,7$	Lockett <i>apud</i> Domigues (2005) Stichlmair (1978)
Klemola e Ilme (1996)	Cálculo do número de unidades de transferência de massa na fase vapor e líquida N_G e N'_L parte do método de Chen e Chuang (1994) modificado no modo do cálculo da área interfacial pelo modelo de Zuiderweg (1982) Modelo foi ajustado a uma coluna real de pratos valvulados com <i>downcomer</i>, com mistura multicomponente, onde os chaves leve e pesado eram o isobutano e n-butano. Foi testado para pratos de passe duplo em uma coluna industrial de purificação de MTBE Testado em sistemas de isobutano/n-butano, ciclohexano/n-heptano e etanol/água.	Klemola e Ilme (1996)
Xu <i>et al.</i> (1994)	Uma das primeiras tentativas para estimativa da eficiência de pratos do tipo <i>dualflow</i> Nesse tipo de prato, a altura da espuma, h_F, ou a altura de líquido claro, h_{CL}, possuem grande influência na eficiência de prato Xu <i>et al.</i> (1994) desenvolveram seu próprio modelo para h_{CL}, uma equação empírica para sistemas com baixa tendência à formação de espuma. Os autores não testaram a validade de sua correlação.	Xu <i>et al.</i> (1994)

Na Tabela 3.3 são apresentados os modelos teóricos ou semi-empíricos de múltiplas zonas sobre o prato com modelo hidrodinâmico para a dispersão acima do prato encontrados na literatura (DOMINGUES, 2005; SYEDA *et al.* 2007).

Tabela 3.3: Modelos teóricos ou semi-empíricos de múltiplas zonas sobre o prato com modelo hidrodinâmico para a de predição de eficiências

Modelo	Principais Características	Referências Bibliográficas
MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS COM MODELO HIDRODINÂMICO PARA DISPERSÃO MULTIPLAS ZONAS		
Bennett <i>et al.</i> (1997)	Modelo desenvolvido para o cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}) para pratos com escoamento cruzado e contracorrente - <i>dualflow</i> Os autores dividiram o prato em duas regiões, uma localizada próxima ao prato (<i>liquid continuous region</i>) e outra acima (<i>vapor-continuous region</i>) Utiliza um banco de dados dos seguintes sistemas binários: ácido acético/água; amônia/água; ciclohexano/n-heptano; isobutano/n-butano A correlação final estima diretamente a eficiência de ponto (E_{OG}), sem necessidade de se calcular o número global de unidades de transferência de massa.	Bennett <i>apud</i> Domingues (2005)
Prado (1986) / Prado e Fair (1990)	Predição de eficiência baseada nos mecanismos de contato entre as fases Foi desenvolvido usando sistema água/ar Limitado a pratos perfurados de escoamento cruzado. Pode ser estendido para pratos valvulados e com borbulhadores A região de atividade dos furos (formação de <i>jets</i> e bolhas), os tamanhos de bolhas e suas velocidades de subida e a média da porosidade (fração volumétrica de vapor na espuma) foram os fatores hidráulicos considerados no modelo. A dispersão acima do prato é dividida verticalmente em três zonas. A zona do fundo, mais próxima do prato (zona de atividade dos furos) corresponde à atividade dos furos (<i>jetting</i> ou borbulhamento); a seção do meio (zona da espuma bulk) é composta de bolhas de gás dispersas no líquido, enquanto a zona de topo (zona de <i>spray</i>) é uma fase gasosa contínua, com gotas dispersas. O modelo exigiu a determinação de três parâmetros baseados nos dados experimentais: AJ (fração de bolhas pequenas na espuma), ϕ (ajuste do tempo de contato turbulento do líquido) e k (parâmetro que leva em conta o colapso e coalescência das bolhas)	Prado (1986) Prado e Fair (1990)

continua

Modelo	Principais Características	Referências Bibliográficas
MODELOS TEÓRICOS OU SEMI-EMPÍRICOS COM MODELO HIDRODIÂMICO PARA DISPERSÃO MULTIPLAS ZONAS		
Garcia (1999), Garcia e Fair (2000)	Modificação do modelo de Prado (1986) e Prado e Fair (1990), limitado a sistemas ar/água para permitir a predição da eficiência de ponto de sistemas orgânicos operando em regime de espuma. As correlações para os tamanhos de bolhas e para a fração de bolhas pequenas na espuma foram obtidas através da teoria do escoamento turbulento isotrópico Para estender o modelo para sistemas orgânicos, foram modificados alguns parâmetros para levar em conta as variações das propriedades físicas em relação às condições hidrodinâmicas do prato. Estes parâmetros foram os fatores ϕ e k de correção da difusividade efetiva do líquido e do gás; a altura do jet, h_1; o diâmetro médio Sauter das bolhas, d_{BLS} e d_{BSS}; a velocidade de subida das bolhas pequenas, u_{SB}; a distribuição do tamanho das bolhas, d_{BS} e d_{BL}; a fração de bolhas pequenas na espuma, AJ e $FLC = 0$, ou seja, considerando que todos os furos do prato têm passagem de vapor	Garcia (1999) Garcia e Fair (2000 a/b)
Garcia e Fair (2002)	Modelo para predição de eficiência de pratos sem downcomer – <i>dualflow</i> O modelo para o cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}), desenvolvido por Garcia (1999) e Garcia e Fair (2000), foi selecionado por ser extensivamente testado para pratos perfurados. Modificações no modelo de Garcia (1999) permitiram adaptar o método para pratos dualflow: área ativa igual à área total do prato ($A_A = A_T$); nova correlação para a fração de furos com passagem de vapor (não cobertas de líquido); a eficiência na zona de spray é $1,2 \times E_{OG}$; ; nova correlação para altura de líquido claro, h_{CL}, arraste de líquido e gotejamento e fator de inundação para pratos dualflow.	Garcia e Fair (2002) Syeda <i>et al.</i> (2007)
Syeda <i>et al.</i> (2007)	O modelo leva em consideração a hidrodinâmica do prato e inclui as contribuições dos regimes de espuma e spray no cálculo da eficiência de ponto Para estimar a contribuição da zona de jetting na eficiência global da espuma foi adotado o modelo de Zuiderweg (1982) Utilizando a teoria de rompimento turbulento das gotas (HESKRTH <i>et al.</i> 1991) o modelo permite estimar a fração de bolhas pequenas (F_{SB}) na espuma e prever a eficiência de ponto (E_{OG}) de pratos perfurados de fluxo cruzado. A região acima do prato foi dividida em duas, uma localizada próxima ao prato (<i>região contínua de líquido</i>), onde situam-se as regiões de <i>jets</i> e bolhas e uma outra região acima desta (<i>região contínua de vapor</i>) onde se encontram as regiões de esguichos e gotas. A fração volumétrica de vapor que forma <i>jets</i> é estimada pela equação de Raper <i>et al.</i> (1982)	Syeda <i>et al.</i> (2007)

3.2 MODELOS DE PREDIÇÃO DE EFICIÊNCIAS UTILIZADOS

Nesta seção são abordados, com mais detalhes, os modelos utilizados e suas modificações para os cálculos de eficiência da coluna industrial testada, bem como uma descrição do modelo de Syeda *et al.* (2007).

3.2.1 Correlação de O'Connell (1946)

Conforme já citado, a correlação de O'Connell (1946) para o cálculo da eficiência global da coluna (E_{OC}) vem sendo usada como padrão na indústria durante décadas. A correlação é baseada em dados de 31 colunas de plantas, incluindo separação de hidrocarbonetos, compostos clorados e álcoois. É um complemento aos dados de 54 colunas de refinarias coletados por Drickamer e Bradford (1943 *apud* KISTER, 1992).

Lockett (1986) expressou a curva de O'Connell para pratos com borbulhadores na seguinte forma:

$$E_{OC} = 9,05.(\mu_L.\alpha)^{-0,245} \quad (3.1)$$

onde a volatilidade relativa (α) e a viscosidade do líquido (μ_L) da carga são tomadas na média aritmética da temperatura no topo e no fundo da coluna. O método prediz 90 % dos dados de eficiência com 10 % de erro, para pratos com borbulhadores.

Segundo Kister (1992), no caso de pratos perfurados e valvulados, as predições são levemente conservativas, recomendando-se este método, pois possui razoável precisão, boa confiabilidade e simplicidade.

3.2.2 Modelo de Chan e Fair (1984)

O modelo de Chan e Fair (1984) foi desenvolvido para a predição da eficiência da transferência de massa em pratos perfurados de escoamento cruzado. Baseado na teoria de transferência de massa de *dois filmes*, leva em conta a dispersão axial da região de espuma e da região de *spray*. Foi baseado em um extensivo banco de dados para pratos perfurados operando, em colunas com escala industrial, com misturas binárias de ciclohexano/n-heptano, isobutano/n-butano, etilbenzeno/estireno, metanol/água, etanol/água, ácido acético/água.

Pode ser considerado um aperfeiçoamento do modelo do AIChE, único modelo até então disponível. Em comparação com o modelo do AIChE apresentou melhor ajuste aos dados experimentais, com um desvio médio absoluto de 6,27%, contra 22,9% do AIChE. Pode ser também aplicado para pratos valvulados (CHAN; FAIR, 1984).

A correlação final obtida para o cálculo do número de unidades de transferência de massa na fase vapor é:

$$N_G = (10300 - 8670.FF).FF \cdot \frac{D_G^{0,5}}{h_{CL}^{0,5}} t_G \quad (3.2)$$

onde o tempo médio de residência na fase vapor é dado por

$$t_G = \frac{(1 - \alpha_E) h_{CL}}{\alpha_E u_A} \quad (3.3)$$

e h_{CL} e α_E são obtidos a partir das correlações de Bennett *et al.* (1983 *apud* LOCKETT, 1986):

$$h_{CL} = \alpha_E \left[h_W + C \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W \cdot \alpha_E} \right)^{0,67} \right] \quad (3.4)$$

$$\alpha_E = \exp \left[-12,55 \cdot \left(u_A \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right)^{0,5} \right)^{0,91} \right] \quad (3.5)$$

onde,

$$C = 0,50 + 0,438 \cdot \exp(-137,8 \cdot h_w) \quad (3.6)$$

Para o cálculo do número de unidades de transferência de massa na fase líquida, N_L' , utiliza-se a equação do modelo do AIChE.

$$N_L' = 19700 \cdot D_L^{0,5} \cdot (0,40 \cdot F_s + 0,17) \cdot t_L \quad (3.7)$$

onde o tempo médio de residência do líquido na dispersão é dado por:

$$t_L = \frac{h_{CL} \cdot FPL \cdot L_w}{Q_L} \quad (3.8)$$

Segundo Bennett *et al.* (1997 *apud* DOMINGUES, 2005), a correlação de Chan e Fair (1984) apesar de ter sido comparada com um extensivo banco de dados e de ser largamente recomendada, a falta de uma correlação aceitável para o parâmetro FF (fator de inundação) dificulta seu uso quando é requerida precisão na estimativa da eficiência de ponto.

O modelo de Chan e Fair (1984) é recomendado para simuladores e é de fácil convergência. Pode ser utilizada para pratos perfurados, com borbulhadores e valvulados (KLEMOLA; ILME, 1997a).

3.2.3 Modelo de Klemola e Ilme (1996)

Conforme descrito por Domingues (2005), as correlações utilizadas para o cálculo do número de unidades de transferência de massa, na fase vapor e líquida, N_G e N_L' , partem do

método de Chen e Chuang (1994), modificado no modo de cálculo da área interfacial, que foi usado por Zuyderweg (1982). A correlação final é mostrada na Equação 3.8:

$$N_{OG} = C_1 \cdot \left(\frac{D_G \cdot Q_L \cdot \rho_G^{0,5} \cdot \rho_L^{0,5}}{h_{CL} \cdot L_W \cdot \sigma} \right)^{0,5} \cdot \left(1 + \frac{m \cdot C_1 \cdot MW_L \cdot (D_G \cdot \rho_G)^{0,5}}{C_2 \cdot MW_G \cdot (D_L \cdot \rho_L)^{0,5}} \right). \quad (3.9)$$

As constantes C_1 e C_2 foram obtidas pelo ajuste da Equação 3.9 aos dados experimentais de Sakata e Yanagi (1979 *apud* KLEMOLA e ILME, 1996) para o sistema isobutano / n-butano, obtendo-se os valores de 49,22 e 80, 85, respectivamente.

Esses autores ajustaram o modelo a uma coluna real com pratos valvulados, com *downcomer* e com uma mistura multicomponente, onde o chave leve e pesado eram o isobutano e n-butano, respectivamente. Consideraram que obtiveram valores bem realistas, apesar de N_G estar mais alto (3,0) e N'_L estar muito baixo (3,0), quando comparados aos valores de 2,1 e 7,0, observados na coluna industrial utilizada para ajustar o modelo. A eficiência global ajustada foi de 81,6%, a eficiência de Murphree foi de 119,1% e N_{OG} de 1,71 para esta coluna real.

3.2.4 Modelo de Klemola e Ilme (1996) Adaptado a Pratos Valvulados de Dois Passes

Klemola e Ilme (1997b) propuseram um método de cálculo da eficiência de Murphree (E_{MV}) onde a geometria dos pratos com dois passes é convertida para a geometria de prato com um passe, mantendo-se a área ativa do prato e o diâmetro da coluna constantes. O comprimento do caminho do líquido para prato de um passe equivalente deve ser considerado como a soma dos comprimentos dos caminhos do líquido do prato de dois passes.

O modelo foi testado para pratos de passe duplo em uma coluna industrial de purificação de MTBE (KLEMOLA; ILME, 1997b). A coluna possuía 14 pratos de passe duplo na seção de esgotamento e 14 pratos de passe simples na seção de retificação. Os perfis de composição simulados com o modelo de eficiência de Klemola e Ilme (1997a) tiveram boa

concordância com os perfis de composição medidos na coluna, indicando que a eficiência de Murphree calculada estava correta. Testou-se também o modelo em sistemas de isobutano/n-butano, ciclohexano/n-heptano e etanol/água. Foram testados também outros métodos e comparados com este conjunto de dados experimentais. Os resultados desse estudo mostraram que o modelo de Chan e Fair (1984) foi o mais recomendado para diferentes sistemas.

Neste trabalho, não foi utilizado o modelo de Klemola e Ilme (1996), mas sim adotou-se o conceito de comprimento equivalente do caminho do líquido para prato de um passe (KLEMOLA; ILME, 1997b). O conceito foi utilizado nos métodos de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999), sendo os resultados comparados aos dados do teste de planta da coluna fracionadora de butadieno.

3.3.5 Modelo de Garcia (1999) e Garcia e Fair (2000)

Garcia (1999), Garcia e Fair (2000) modificaram o modelo de Prado (1986), Prado e Fair (1990), que é limitado a sistemas ar/água, para permitir a predição da eficiência de ponto de sistemas orgânicos operando em regime de espuma.

Para estender o modelo para sistemas orgânicos, foi necessário modificar alguns parâmetros para levar em conta as variações das propriedades físicas em relação às condições hidrodinâmicas do prato. Os parâmetros modificados foram: fatores ϕ e k de correção da difusividade efetiva do líquido e do gás; altura do jet, h_I ; diâmetro médio *Sauter* das bolhas, d_{BLS} e d_{BSS} ; velocidade de subida das bolhas pequenas, u_{SB} ; fração de bolhas pequenas na espuma, AJ e $FLC = 0$, ou seja, considerando que todos os furos do prato têm passagem de vapor.

O modelo é limitado a pratos perfurados de escoamento cruzado, mas pode ser estendido para pratos valvulados e pratos com borbulhadores.

Os fatores hidráulicos considerados nesse modelo foram os mesmos utilizados por Prado (1986) / Prado e Fair (1990), sendo eles, a região de atividade dos furos (formação do *jet* e das bolhas), os tamanhos de bolhas e suas velocidades de subida e a média da porosidade (fração volumétrica de gás na espuma).

A dispersão acima do prato foi dividida verticalmente em três zonas. A zona do fundo, mais próxima do prato (zona de atividade dos furos) corresponde à atividade dos furos (*jetting* ou borbulhamento); a seção do meio (zona da espuma *bulk*) é composta de bolhas de gás dispersas no líquido, enquanto a zona de topo (zona de *spray*) é uma fase gasosa contínua, com gotas dispersas como proposto por Prado (1986), Prado e Fair (1990) e mostrado na Figura 3.1.

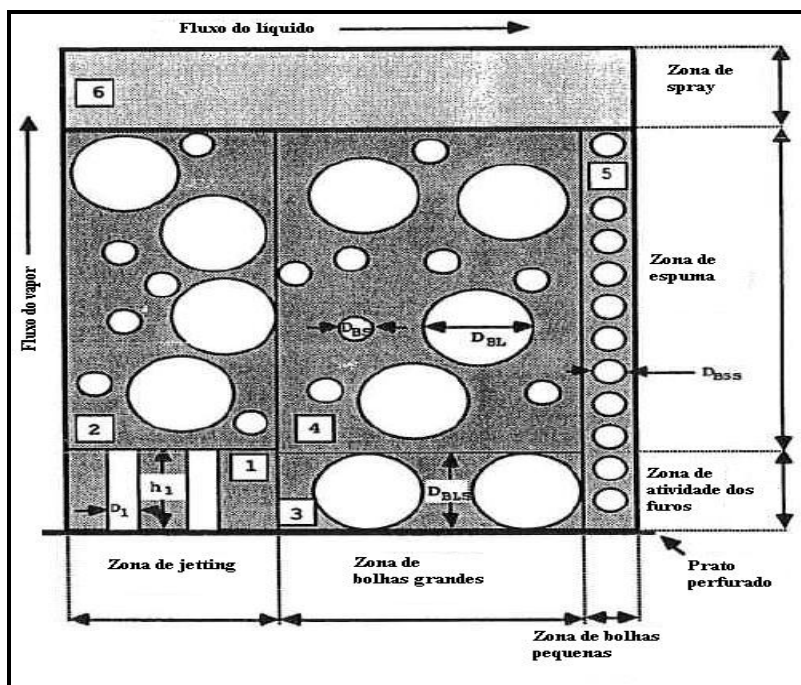


Figura 3.1: Representação esquemática da localização das zonas de transferência de massa usada por Prado (1986) e Prado e Fair (1990).

Fonte: PRADO, 1986; PRADO e FAIR, 1990

Os números de unidades de transferência de massa para a fase líquida e vapor são calculados para cada uma das seis zonas como segue:

a) Zona 1 (*jetting* no orifício)

Essa zona fica na região de atividade dos furos, onde o vapor está em regime de *jetting*.

$$N_{L1} = \frac{8 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_1} \cdot t_G^{0,5} \quad (3.10)$$

e

$$N_{G1} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k_{G1}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k_{L1}} \cdot N_{L1} \quad (3.11)$$

onde o tempo de residência do vapor no *jetting*, t_{G1} , é obtido na divisão da altura do *jet* (h_1) pela velocidade *jet* do gás (u_j):

$$t_{G1} = \frac{h_1}{u_j} \quad (3.12)$$

A altura do *jet* (h_1) foi calculada pela correlação proposta por Lockett *et al.* (1986):

$$h_1 = 1,1 \cdot 10^{-3} \cdot d_H^{0,20} \cdot Re_H^{0,46} \quad (3.13)$$

onde Re_H é o número de Reynolds do escoamento do vapor através de um furo com velocidade u_H em um diâmetro d_H .

$$Re_H = \frac{d_H \cdot u_H \cdot \rho_G}{\mu_G} \quad (3.14)$$

A velocidade do *jet* (u_J) é dada por:

$$u_J = \frac{u_H \cdot d_H^2}{(1 - FLC) \cdot d_1^2} \quad (3.15)$$

onde FLC é a fração de furos coberta por líquido = 0

O diâmetro médio do *jet* (d_J) foi calculado pela equação proposta por Hai (1980, *apud* PRADO e FAIR, 1990):

$$d_1 = 1,1 \cdot d_H + 0,25 \cdot h_{CL} \quad (3.16)$$

Para o cálculo de h_{CL} nos pratos valvulados utilizou-se, neste trabalho, as correlações de Dhulesia (1984) e Todd e Van Winkle (1972 *apud* LOCKETT, 1986), apresentadas no próximo capítulo pelas Equações 4.3, 4.4 e 4.5.

O coeficiente de transferência de massa na fase líquida (k'_L) é modelado usando a teoria da penetração de Higbie (1935 *apud* PRADO, 1986):

$$k'_{L1} = 1,13 \cdot \left(\frac{\varphi \cdot D_L}{t_{G1}} \right)^{0,5} \quad (3.17)$$

O coeficiente de transferência de massa na fase vapor (k'_G) é calculado pela equação modificada por Gilliland e Sherwood (1934 *apud* PRADO; FAIR, 1990):

$$k'_{G1} = 0,046 \cdot \left(\frac{D_G}{D_1} \right) \cdot \text{Re}_1^{0,96} \cdot \text{Sc}_G^{0,44} \quad (3.18)$$

onde

$$\text{Re}_1 = \frac{d_1 \cdot u_j \cdot \rho_G}{\mu_G} \quad (3.19)$$

e

$$\text{Sc}_G = \frac{\mu_G}{\rho_G \cdot D_G} \quad (3.20)$$

b) Zona 2 (região de dispersão)

Da mesma forma que Prado (1986) e Prado e Fair (1990), Garcia (1999) considerou que a região é povoada por uma distribuição bimodal de bolhas, d_{BS} e d_{BL} . A contribuição para a transferência de massa de cada um destes dois tamanhos foi determinada pelas seguintes equações:

$$d_{BS} = \frac{3,34}{(u_A \cdot g)^{0,4}} \cdot \left(\frac{\sigma}{\rho_L} \right)^{0,6} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_G} \right)^{0,1} \quad (3.21)$$

e

$$d_{BL} = d_{BS} \cdot \left[0,83 + 41,5 \cdot \left(\sigma^{0,6} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\rho_G} \right)^{0,1} \right) \right] \quad (3.22)$$

A contribuição para a transferência de massa de cada um destes dois tamanhos de bolhas foi determinada pelas seguintes equações:

- Número de unidades de transferência de massa na fase líquida para bolhas pequenas e grandes, respectivamente:

$$N_{L2S} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\phi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BS}} \cdot t_{G2S}^{0,5} \quad (3.23)$$

e

$$N_{L2L} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\phi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BL}} \cdot t_{G2L}^{0,5} \quad (3.24)$$

- Número de unidades de transferência de massa na fase vapor para bolhas pequenas e grandes:

$$N_{G2S} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G2S}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L2S}} \cdot N_{L2S} \quad (3.25)$$

e

$$N_{G2L} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G2L}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L2L}} \cdot N_{L2L} \quad (3.26)$$

Os tempos de residência das bolhas pequenas (t_{G2S}) e das bolhas grandes (t_{G2L}) são:

$$t_{G2S} = \frac{(h_F - h_1)}{u_{SB}} \quad (3.27)$$

e

$$t_{G2L} = \frac{(h_F - h_1)}{u_{LB}} \quad (3.28)$$

A velocidade de subida das bolhas grandes, u_{LB} , foi obtida do balanço de massa no entorno de uma população de bolhas (HOFER, 1983 *apud* PRADO, 1986):

$$u_{LB} = \frac{u_A}{(1 - AJ) \cdot \varepsilon} - \frac{u_{SB} \cdot AJ}{(1 - AJ)} \quad (3.29)$$

onde a fração volumétrica de vapor na espuma (ε) é obtida a partir da Equação 4.2 no caso de pratos valvulados.

Segundo Garcia (1999), a fração de bolhas pequenas na espuma presentes nas zonas 2 e 4 (AJ) depende das propriedades físicas das duas fases e em altas pressões esta fração é maior que para sistemas em pressão atmosférica, propondo então a seguinte correlação:

$$AJ = 1 - 0,463 \cdot \left(\frac{\sigma}{\sigma_{\text{água}}} \right)^{0,6} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_{\text{água}}} \frac{\mu_{AR}}{\mu_G} \right)^{0,1} \cdot \left(\frac{\rho_{\text{água}}}{\rho_L} \right)^{0,6} \cdot \left(\frac{\rho_{AR}}{\rho_G} \right)^{0,1} \quad (3.30)$$

As propriedades do ar e da água foram tomadas a 1 atm abs. e 25 °C:

$$\sigma_{\text{água}} = 0,07282 \text{ N/m}$$

$$\mu_{\text{água}} = 9,12 \cdot 10^{-4} \text{ kg/(m.s)}$$

$$\mu_{\text{ar}} = 1,845 \cdot 10^{-5} \text{ kg/(m.s)}$$

$$\rho_{\text{água}} = 994,7 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho_{\text{ar}} = 1,183 \text{ kg/m}^3$$

Garcia (1999) e Garcia e Fair (2000b) usaram a correlação proposta por Grace *et al.* (1976) para o cálculo da velocidade das bolhas pequenas:

$$u_{SB} = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot d_{BS}} \cdot Mo^{-0,149} \cdot (J - 0,857) \quad (3.31)$$

onde:

$$J = 0,94 \cdot H^{0,757} \quad (2 < H \leq 59,3) \quad (3.32)$$

$$J = 3,42 \cdot H^{0,441} \quad (H > 59,3) \quad (3.33)$$

e

$$H = \frac{4}{3} \cdot Eo \cdot Mo^{-0,149} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\mu_{\text{água}}} \right)^{-0,14} \quad (3.34)$$

onde $\mu_{\text{água}} = 9,12 \cdot 10^{-4} \text{ kg/(m.s)}$ à 1 atm abs. e 25 °C. Para a média aritmética do diâmetro das bolhas pequenas nas zonas 2 e 4 (d_{BS}):

$$Eo = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot d_{BS}}{\sigma} \quad (3.35)$$

c) Zona 3

Essa zona fica na região de atividade dos furos junto ao prato sendo constituída de bolhas grandes ($AJ = 0$, fração de bolhas pequenas), com os números de unidades de transferência de massa nas fases líquida e vapor dados por:

$$N_{L3} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BLS}} t_{G3}^{0,5} \quad (3.36)$$

e

$$N_{G3} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G3}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L3}} \cdot N_{L3} \quad (3.37)$$

onde

$$t_{G3} = \frac{d_{BLS}}{u_{LB3}} \quad (3.38)$$

$$u_{LB3} = \frac{u_A}{\varepsilon} \quad (AJ = 0) \quad (3.39)$$

e

$$d_{BLS} = \Phi \cdot 0,605 \cdot \frac{d_H^{0,84} u_H^{0,18}}{\left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,07}} \quad (3.40)$$

onde Φ é um fator de correção dado por:

$$\Phi = h_{W,CSB} \cdot \mu_{L,CSB} \cdot \sigma_{CSB} \quad (3.41)$$

A Tabela 3.4 mostra os limites de validade dos parâmetros que compõem o cálculo de Φ :

Tabela 3.4: Cálculo do fator Φ

h_W	$h_W \geq 0,0254$	
	$h_{W,CSB} = 1$	(3.42)
	$0 < h_W < 0,0254$	
	$h_{W,CSB} = 8,3 \cdot h_W^{0,7}$	(3.43)
μ_L	$h_W = 0$	
	$h_{W,CSB} = 8,3 \cdot h_{CL}^{0,7}$	(3.44)
	Sistema ar/água	
	$\mu_{L,CSB} = 1$	(3.45)
σ	Sistemas com $\mu_L > 0,6 \times 10^{-3}$	
	$\mu_{L,CSB} = 4,13 \cdot \mu_L^{1,5}$	(3.46)
	$\sigma \gg 5 \times 10^{-3}$	
	$\sigma_{CSB} = 1$	(3.47)
	$\sigma \leq 5 \times 10^{-3}$	
	$\sigma_{CSB} = 3 \cdot \sigma^{0,6}$	(3.48)

Fonte: GARCIA e FAIR, 2000, p. 1820.

d) Zona 4

Essa zona fica na região de espuma e considera-se o vapor escoando em bolhas grandes e pequenas.

- Número de unidades de transferência de massa na fase líquida para bolhas pequenas e grandes:

$$N_{L4S} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\phi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BS}} \cdot x_{G4S}^{0,5} \quad (3.49)$$

e

$$N_{L4L} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BL}} \cdot t_{G4L}^{0,5} \quad (3.50)$$

- Número de unidades de transferência de massa na fase vapor para bolhas pequenas e grandes:

$$N_{G4S} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G4S}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L4S}} \cdot N_{L4S} \quad (3.51)$$

e

$$N_{G4L} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G4L}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L4L}} \cdot N_{L4L} \quad (3.52)$$

Os tempos de residência das bolhas pequenas (t_{G4S}) e das bolhas grandes (t_{G4L}) são:

$$t_{G4S} = \frac{(h_F - d_{BLS})}{u_{SB}} \quad (3.53)$$

e

$$t_{G4L} = \frac{(h_F - d_{BLS})}{u_{LB}} \quad (3.54)$$

e) Zona 5

Nessa zona o vapor se encontra na forma de bolhas pequenas e se estende da zona de atividade dos furos até a zona de espuma.

$$N_{L5} = \frac{12 \cdot \rho_L \cdot M_G \cdot (\varphi \cdot D_L)^{0,5}}{\pi^{0,5} \cdot \rho_G \cdot M_L \cdot d_{BSS}} \cdot t_{G5}^{0,5} \quad (3.55)$$

e

$$N_{G5} = \frac{M_L \cdot \rho_G \cdot k'_{G5}}{M_G \cdot \rho_L \cdot k'_{L5}} \cdot N_{L5} \quad (3.56)$$

O tempo de residência das bolhas (t_{G5}) é calculado por:

$$t_{G5} = \frac{h_F}{u_{LB3}} \quad (3.57)$$

onde

$$u_{BSS} = \frac{\mu_L}{\rho_L \cdot d_{BSS}} \cdot Mo^{-0,149} \cdot (J - 0,857) \quad (3.58)$$

e

$$d_{BSS} = \Phi \cdot 0,660 \cdot \frac{d_H^{0,84} \cdot u_H^{0,085}}{\left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,08}} \quad (3.59)$$

onde J e H são calculados pelas Equações 3.31 a 3.34, respectivamente:

$$Eo = \frac{g \cdot (\rho_L - \rho_G) \cdot d_{BSS}}{\sigma} \quad (3.60)$$

e

$$Mo = \frac{g \cdot \mu_L^4 \cdot (\rho_L - \rho_G)}{\rho_L^2 \cdot \sigma^3} \quad (3.61)$$

Os valores dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor (k'_G) e líquida (k'_L) para as zonas 2, 3, 4 e 5 são determinados a partir das equações da Tabela 3.5.

Tabela 3.5: Equações para determinação dos coeficientes de transferência de massa das fases vapor e líquida.

Tipo de bolha	Zona 2	Zona 3	Zona 4	Zona 5
Bolhas pequenas	$Sh_\infty = \frac{k'_{G2S} \cdot d_{BS}}{(k \cdot D_G)} \quad (3.62)$		$Sh_\infty = \frac{k'_{G4S} \cdot d_{BS}}{(k \cdot D_G)} \quad (3.63)$	$Sh_\infty = \frac{k'_{G5} \cdot d_{BSS}}{(k \cdot D_G)} \quad (3.64)$
	$Pe_G = \frac{d_{BS} \cdot u_{SB}}{k \cdot D_G} \quad (3.65)$		$Pe_G = \frac{d_{BS} \cdot u_{SB}}{k \cdot D_G} \quad (3.66)$	$Pe_G = \frac{d_{BSS} \cdot u_{BSS}}{k \cdot D_G} \quad (3.67)$
	$k'_{L2S} = 1,13 \cdot \left(\frac{\phi \cdot D_L}{t_{G2S}} \right)^{0,6} \quad (3.68)$		$k'_{L4S} = 1,13 \cdot \left(\frac{\phi \cdot D_L}{t_{G4S}} \right)^{0,6} \quad (3.69)$	$k'_{L5} = 1,13 \cdot \left(\frac{\phi \cdot D_L}{t_{G5}} \right)^{0,6} \quad (3.70)$
Bolhas grandes	$Sh_\infty = \frac{k'_{G2L} \cdot d_{LB}}{(k \cdot D_G)} \quad (3.71)$	$Sh_\infty = \frac{k'_{G3} \cdot d_{BLS}}{(k \cdot D_G)} \quad (3.72)$	$Sh_\infty = \frac{k'_{G4L} \cdot d_{BL}}{(k \cdot D_G)} \quad (3.73)$	
	$Pe_G = \frac{d_{BL} \cdot u_{LB}}{k \cdot D_G} \quad (3.74)$	$Pe_G = \frac{d_{BLS} \cdot u_{LB3}}{k \cdot D_G} \quad (3.75)$	$Pe_G = \frac{d_{BL} \cdot u_{LB}}{k \cdot D_G} \quad (3.76)$	
	$k'_{L2L} = 1,13 \cdot \left(\frac{\phi \cdot D_L}{t_{G2L}} \right)^{0,6} \quad (3.77)$	$k'_{L3} = 1,13 \cdot \left(\frac{\phi \cdot D_L}{t_{G3}} \right)^{0,6} \quad (3.78)$	$k'_{L4L} = 1,13 \cdot \left(\frac{\phi \cdot D_L}{t_{G4L}} \right)^{0,6} \quad (3.79)$	

As constantes ϕ e k são determinadas mais adiante.

Para $40 < Pe_G < 200$:

$$Sh_\infty = -11,878 + 25,879 \cdot (\log Pe_G) - 5,640 \cdot (\log Pe_G)^2 \quad (3.80)$$

Para $Pe_G > 200$:

$$Sh_\infty = 17,9 \quad (3.81)$$

f) Zona 6 (zona de *spray*)

A transferência de massa nessa zona não foi levada em conta, baseado no fato de que em baixos inventários no prato ela tem pouca participação na transferência de massa e em altos inventários, tal efeito é mascarado pelo arraste de líquido.

As contribuições de cada zona são agrupadas conforme descrito a seguir. As zonas 1 e 2 são agrupadas em:

$$N_{GFJ} = N_{G1} - \ln\{1 - [AJ.(1 - e^{-N_{G2S}}) + (1 - AJ).(1 - e^{-N_{G2L}})]\} \quad (3.82)$$

As zonas 3 e 4 são agrupadas em:

$$N_{GFLB} = N_{G3} - \ln\{1 - [AJ.(1 - e^{-N_{G4S}}) + (1 - AJ).(1 - e^{-N_{G4L}})]\} \quad (3.83)$$

Finalmente, a eficiência de ponto é calculada por:

$$E_{OG} = FJ.(1 - e^{-N_{GFJ}}) + FLB.(1 - e^{-N_{GFLB}}) + FSB.(1 - e^{-N_{G5}}) \quad (3.84)$$

onde FJ é a fração de furos em *jetting*:

$$FJ = \frac{u_A - u_{A,0}}{u_{A,100} - u_{A,0}} \quad 0 < FJ < 1 \quad (3.85)$$

em que as velocidades superficiais baseadas na área ativa para 0% ($u_{A,0}$) e 100% ($u_{A,100}$) de *jetting* nos furos são dadas por:

$$u_{A,0} = 0,1 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot h_W^{0,132} \cdot d_H^{-0,26} \cdot \phi^{0,992} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,27} \quad (3.86)$$

e

$$u_{A,100} = 1,1 \cdot \rho_G^{-0,5} \cdot \rho_L^{0,692} \cdot h_W^{0,132} \cdot d_H^{-0,26} \cdot \phi^{0,992} \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W} \right)^{0,27} \quad (3.87)$$

FSB é a fração de furos produzindo bolhas pequenas, dada por:

$$FSB = 165,65 \cdot d_H^{1,32} \cdot \phi^{1,33} \quad (3.88)$$

e FLB é a fração de furos produzindo bolhas grandes, obtida pela diferença:

$$FLB = 1 - FJ - FSB \quad (3.89)$$

Figura 3.2 mostra um resumo das correlações para cálculo do número de unidades de transferência de massa por zonas descritas até agora, mostrando como foram agrupadas para cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}).

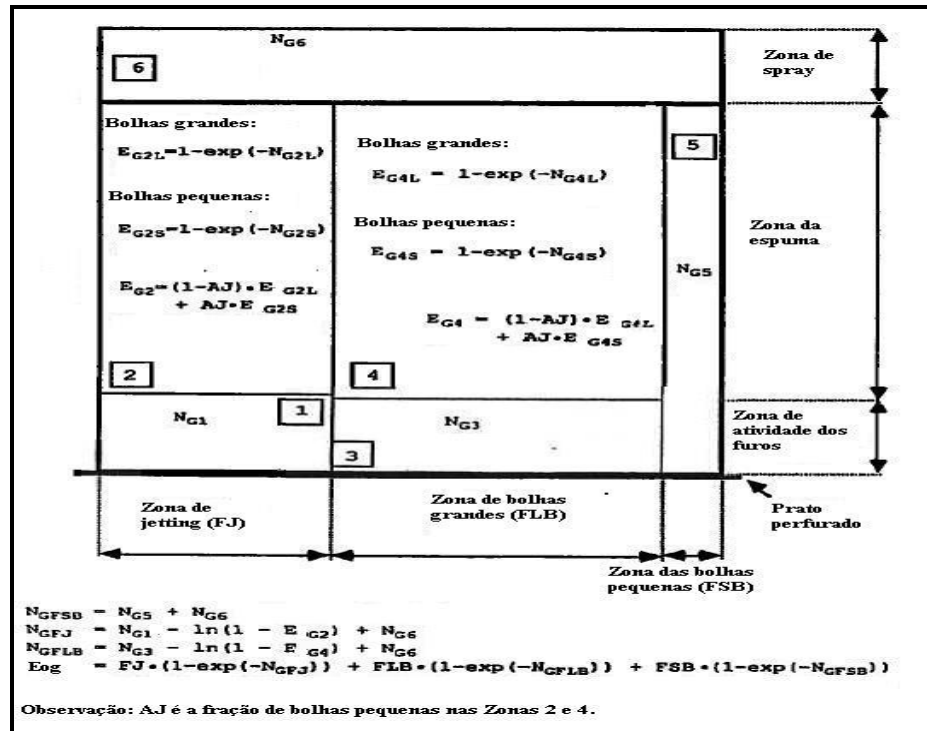


Figura 3.2: Modelo de transferência de massa da dispersão acima de prato perfurado

Fonte: Adaptado de PRADO, 1986; PRADO e FAIR, 1990.

A análise de sensibilidade feita por Garcia (1999) e Garcia e Fair (2000) mostrou que o impacto no desvio médio absoluto para a correção dos coeficientes de difusão molecular do líquido e do gás causados pelos fatores ϕ (ajuste do tempo de contato turbulento do líquido) e k (parâmetro que leva em conta o colapso e coalescência das bolhas) era pequeno. Para preservar a conveniência de estimar diretamente os coeficientes de difusão molecular das fases líquida e gasosa, foi considerado o valor de 1,00 para ϕ e k .

Garcia e Fair (200b) admitem que o modelo é mais complexo que o modelo de Chan e Fair (1984) e mais difícil de aplicar, no entanto, o desvio absoluto foi de 13,28 % contra 18,22 % do modelo de Chan e Fair (1984).

3.3.6 Modelo de Syeda, Afacan e Chuang (2007)

Diferentemente do modelo de Zuiderweg (1982) e do modelo de Stichlmair (1978), que sugerem uma mudança brusca na zona de transição de líquido para vapor e determinam duas expressões separadas para prever a eficiência de ponto (E_{OG}) para os regimes de espuma e *spray*, e dos modelos da AIChE (1958), Chan e Fair (1984) e Chen e Chuang (1993) que consideram um único modelo de eficiência para as regiões de espuma e *spray*, o modelo de Syeda *et al* (2007) considera a hidrodinâmica do prato e as contribuições dos regimes de espuma e *spray* para o cálculo da eficiência de ponto (E_{OG}).

Estes autores, utilizando a teoria de rompimento turbulento das gotas (HESKETH *et al.*, 1991), desenvolveram um modelo para estimar a fração de bolhas pequenas (FSB) na espuma e prever a eficiência de ponto (E_{OG}) de pratos perfurados de fluxo cruzado.

A estrutura da espuma é definida como a combinação de bolhas e *jets* contínuos que rompem a superfície e projetam esguichos de líquido e gotas acima da superfície.

A exemplo de Bennett *et al.* (1997), os autores dividiram a região acima do prato em duas, uma localizada próxima ao prato (região contínua de líquido), onde situam-se as regiões de *jets* e bolhas e uma outra região acima desta (região contínua de vapor) onde se encontram as regiões de esguichos e gotas.

O modelo foi comparado com banco de dados de eficiências para misturas binárias de ciclohexano/n-heptano e isobutano/n-butano.

A Figura 3.3 representa esquematicamente a dispersão acima de um prato perfurado em operação.

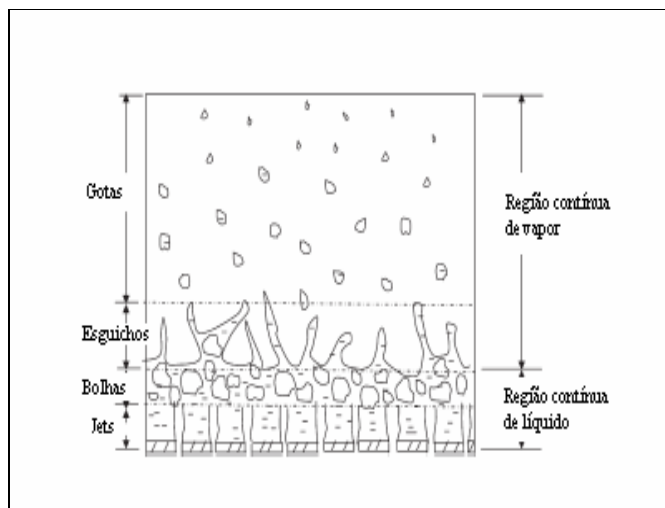


Figura 3.3: Representação esquemática a dispersão acima de prato perfurado considerada por Syeda et al. (2007)

Fonte: SYEDA *et al.* (2007)

A Figura 3.4 é uma representação mais detalhada da região de espuma, mostrando as zonas de *jetting* e de borbulhamento. Na representação da zona de *jetting* é mostrado como alguns dos *jets* gasosos formados nos orifícios do prato perfurado atravessam a espuma, rompem a superfície e projetam esguichos de líquido para cima. Na região de borbulhamento é representado o processo de formação de bolhas grandes e pequenas na espuma. Ambas as zonas estão presentes e intimamente misturadas na espuma.

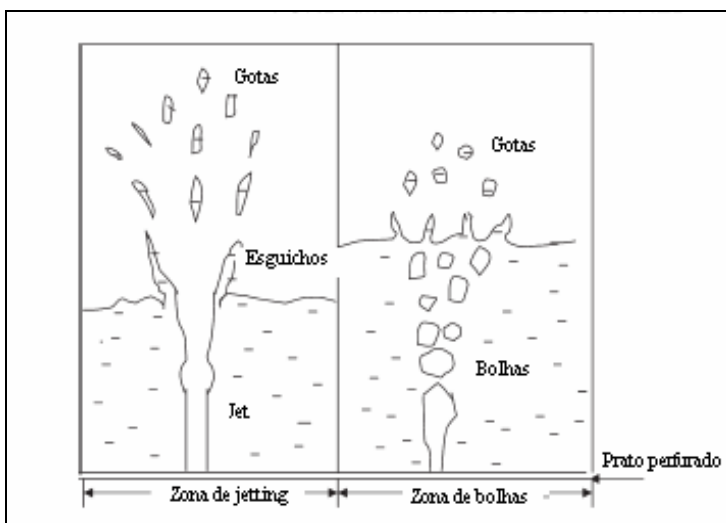


Figura 3.4: Modelo da estrutura da espuma em um prato perfurado

Fonte: SYEDA *et al.*, 2007.

A eficiência de ponto (E_{OG}) é estimada combinando a contribuição das regiões de borbulhamento e de *jetting* existentes no prato.

$$E_{OG} = (1 - f_j) \cdot E_B + f_j \cdot E_j \quad (3.90)$$

onde f_j é a fração volumétrica de gás que desvia das bolhas como *jets* contínuos, E_B e E_j são as contribuições para a eficiência de ponto (E_{OG}) da zona de bolhas e de *jets*, respectivamente.

Para a zona de borbulhamento, Syeda *et al.* (2007) consideraram uma distribuição bimodal do tamanho das bolhas. A contribuição das bolhas grandes (E_{LB}) e das bolhas pequenas (E_{SB}) para a E_B é dada por:

$$E_B = (1 - FSB) \cdot E_{LB} + FSB \cdot E_{SB} \quad (3.91)$$

onde FSB é a fração de bolhas pequenas.

A área interfacial específica das bolhas grandes, a' , é dada por:

$$a' = \frac{6}{d_{32L}} \quad (3.92)$$

onde d_{32L} é o diâmetro médio *Sauter* das bolhas grandes calculado pela equação abaixo.

$$d_{32L} = 0,887 \cdot d_H^{0.846} \cdot u_H^{0.21} \quad (3.93)$$

O tempo de residência para as bolhas grandes, t_{GLB} é calculado por:

$$t_{GLB} = \frac{h_F}{u_{LB}} \quad (3.94)$$

Para o cálculo da velocidade de subida das bolhas grandes, u_{LB} , foi utilizada a equação de Prado *et al.* (1987).

$$u_{LB} = 2,5 \cdot (V_{LB})^{1/6} + u_a \quad (3.95)$$

O volume das bolhas grandes, v_{LB} , é calculado pela equação proposta por Wraith (*apud* PRADO, 1987):

$$v_{LB} = 1,090 \cdot q_{GO}^{1.2} \cdot g^{-11.6} \quad (3.96)$$

onde q_{GO} é a vazão de vapor por orifício, em m^3/s , e $g = 9,8 \, m/s^2$.

Segundo Syeda *et al.* (2007), das várias correlações disponíveis para estimar a altura da espuma em pratos perfurados, h_F , a equação de Bennet *et al.* (1983) é a que apresenta o melhor resultado.

$$h_f = h_w + C \cdot \left(\frac{Q_L}{W \cdot \alpha_e} \right)^{0,67} \quad (3.97)$$

onde,

$$\alpha_e = \exp \left[-12,55 \cdot \left(u_s \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G} \right)^{0,5} \right)^{0,91} \right] \quad (3.98)$$

e

$$C = 0,5 + 0,438 \exp(-137,8 \cdot h_w) \quad (3.99)$$

Os autores chamam a atenção para o fato de que as outras equações disponíveis na literatura somam as alturas das regiões contínuas de líquido e vapor, superestimando o tempo de residência das bolhas.

O coeficiente de transferência de massa na fase líquida para bolhas grandes, K_{LLB} , é calculado por:

$$k_{LLB} = 1,13 \cdot \left(\frac{D_L}{t_{GLB}} \right)^{0,5} \quad (3.100)$$

Para o cálculo do coeficiente de transferência de massa na fase vapor para bolhas grandes, K_{GLB} , foram utilizadas as equações do modelo de Prado e Fair (1990) e Garcia e Fair (2000b) dadas pelas equações 3.77, 3.78 e 3.79, com as necessárias adaptações nos índices.

Uma vez determinados os coeficientes de transferência de massa para o líquido e vapor para as bolhas grandes, podem ser calculados N_{GLB} e N_{LLB} , utilizando as equações 2.15 e 2.16, que derivam da teoria de transferência de massa nos dois filmes.

O número global de unidades de transferência de massa referido à fase vapor, N_{OG} , pode ser correlacionado com a eficiência de ponto (E_{OG}) através da equação:

$$E_{OG} = 1 - \exp(-N_{OG}) \quad (3.101)$$

Considerando que na fração de bolhas pequenas haja equilíbrio entre fase líquida e vapor, a eficiência das bolhas pequenas pode ser considerada 1, isto é:

$$E_{SB} = 1 \quad (3.102)$$

Para estimar a contribuição das bolhas pequenas no total da eficiência é necessário determinar a fração de bolhas pequenas formadas, FSB .

$$FSB = \frac{2 \cdot (1 - e^{-k \cdot \bar{\Delta}t})}{2 \cdot (1 - e^{-k \cdot \bar{\Delta}t}) + \left(\frac{d_{32L}}{d_{32S}} \right)^3 e^{-k \cdot \bar{\Delta}t}} \quad (3.103)$$

onde,

$$k \cdot \bar{\Delta}t = C^m \cdot \left(\frac{3,8 \cdot \rho_L^{0,1} \cdot \rho_G^{0,3}}{\sigma^{0,4}} \right) (u_s \cdot g)^{0,6} \quad (3.104)$$

Syeda *et al.* (2007) obtiveram a relação entre o diâmetro das bolhas grandes e pequenas, d_{32L} / d_{32S} a partir da literatura mostrada na Tabela 3.6, adotando o valor mais provável igual a 5.

Pode-se observar na tabela que o diâmetro das bolhas pequenas varia entre 5 e 10 mm e o tamanho das bolhas grandes de 20 a 80 mm, dependendo do autor.

Tabela 3.6: Distribuição do tamanho de bolhas para prato perfurado.

Fonte	Bolhas pequenas	Bolhas grandes	Razão
Hofer (1983)	5 mm	25 mm	5
Ashley e Hanselden (1972)	5 -10 mm	40 - 80 mm	8
Katenbacher (1982)	4 mm	25 mm	6
Porter et al. (1987)	5 mm	20 mm	4
Lockett et al. (1979)	5 mm	25 mm	5

Fonte: Figura adaptada de SYEDA *et al.*, 2007.

A constante “C” foi determinada pela comparação do modelo de Syeda *et al.* (2007) com o banco de dados do FRI (*Fractionation Research, Inc.*) para misturas binárias de ciclohexano / n-heptano e isobutano / n-butano. Considerando a faixa de 1 a 4,7 para o número de Weber crítico, We_{cr} , o $\bar{\Delta}t$ varia de $0,16 t_{GLB}$ a $0,644 t_{GLB}$, quando o valor da constante $C'' = 0,16$.

O modelo de Zuiderweg (1982) foi adotado para estimar a contribuição da zona de *jetting* na eficiência global de transferência de massa na espuma. Os coeficientes de transferência de massa são calculados pelas seguintes equações:

Para fase vapor:

$$k_{Gj} = \frac{0,13}{\rho_G} - \frac{0,065}{(\rho_G)^2} \quad (1 < \rho_G < 80 \text{ kg/m}^3) \quad (3.105)$$

Para fase líquida:

$$k_{Lj} = \frac{2,6 \cdot 10^{-5}}{\mu_L^{0,25}} \quad (3.106)$$

A eficiência de ponto (E_{OG}) para a zona de *jetting* é calculada por:

$$E_j = 1 - \exp\left(-\frac{a \cdot h_F \cdot K_{OGj}}{u_s}\right) \quad (3.107)$$

e

$$a \cdot h_F = \frac{40}{F^{0,3}} \left(\frac{F_{bba}^2 \cdot h_L \cdot FP}{\sigma} \right)^{0,37} \quad (3.108)$$

A altura de líquido claro, h_{CL} , é expressa por:

$$h_L = 0,6 \cdot h_w \cdot \left(\frac{p}{b} \cdot P \right)^{0,25} \quad (3.109)$$

onde p é o passe dos orifícios para prato perfurado, em m , e b é o comprimento do vertedouro por unidade de área de borbulhamento, A_A , em m^{-1} .

A fração volumétrica de vapor que forma *jets* é estimada pela equação de Raper *et al.* (1982).

$$f_j = -0,1786 + 0,9857 \cdot \left(1 - e^{-1,43 \cdot F_{bba}} \right) \quad (3.110)$$

Segundo os autores, o mais completo estudo para estimar a fração de bolhas pequenas foi feito por Garcia e Fair (2000b). Apesar do modelo ajustar-se favoravelmente a base de dados do FRI, mesma base utilizada por Syeda *et al.* (2007), o modelo falha na identificação da distribuição bimodal do tamanho de bolhas na região de espuma, o que mostra o caráter arbitrário da expressão utilizada no modelo para a fração de bolhas pequenas (AJ).

O modelo de Garcia e Fair (2000b) prediz de forma adequada a eficiência de ponto (E_{OG}) em colunas operando a baixas pressões, entretanto, prediz uma eficiência significativamente baixa em colunas operando em pressões altas. Estas discrepâncias são resultados da natureza altamente empírica do modelo de Garcia e Fair (2000b), pois envolve um grande número de equações e, pelo menos, quatro parâmetros de ajustes.

A inclusão das propriedades físicas da fase vapor e líquida na estimativa da fração de bolhas pequenas, *FSB*, torna o modelo de Syeda *et al.* (2007) aplicável a sistemas com grande variação das propriedades físicas e diferentes níveis de pressão.

As eficiências de ponto (E_{OG}) calculadas pelo modelo de Syeda *et al.* (2007) apresentaram um desvio de +/- 10% em relação as eficiências de ponto (E_{OG}) contidas na base de dados do FRI e, quando comparadas aos resultados obtidos pelos modelos de Chen e Chuang (1993) e Garcia e Fair (2000b), mostraram um melhor ajuste das eficiências para a mesma base de dados.

Uma vez que se tomou conhecimento do modelo de Syeda *et al.* (2007) já na fase final da elaboração da dissertação, este modelo não foi testado neste trabalho.

4 HIDRÁULICA DOS PRATOS

Neste capítulo são mostradas as correlações referentes à hidráulica dos pratos que complementam os modelos de predição de eficiência de pratos, apresentados no Capítulo 3.

4.1 RETENÇÕES DE LÍQUIDO E VAPOR NO PRATO

O uso de correlação que represente o mais próximo possível a altura real de líquido em um prato é fundamental para a correta determinação da eficiência do prato, pois é nessa camada que ocorrem todos os fenômenos de transferência de massa entre as fases líquida e vapor. Alturas maiores de espuma no prato levam a um aumento da eficiência do prato.

A fração volumétrica de líquido na espuma (*holdup*) é:

$$\alpha = \frac{h_{CL}}{h_F} = (1 - \varepsilon) \quad (4.1)$$

A fração volumétrica de vapor na espuma é:

$$\varepsilon = 1 - \alpha = 1 - \frac{h_{CL}}{h_F} \quad (4.2)$$

A correlação utilizada para estimar a altura de líquido claro (h_{CL}) sobre o prato foi a de Dhulesia (1984 *apud* LOCKETT, 1986). Esta correlação tem razoável concordância com dados experimentais e é recomendada para pratos valvulados (LOCKETT, 1986). A correlação foi escolhida para ser utilizada no modelo de Garcia (1999) para pratos valvulados, obtida a partir de pratos valvulados *Glitsch-VI* em sistema ar/água.

$$h_{CL} = 0,42 \cdot \left(\frac{Q_L}{L_W \cdot u_A} \cdot \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0,5} \right)^{0,33} \cdot h_W^{0,67} \quad (4.3)$$

A altura da espuma, h_F , foi obtida a partir da correlação de Todd e Van Winkle (1972 *apud* LOCKETT, 1986):

$$h_F = 0,076 + \frac{32,6 \cdot F_s^2}{(\rho_L - \rho_G)} + 0,83 \cdot h_{CLD} \quad (4.4)$$

onde

$$h_{CLD} = h_{CL} - \frac{u_A \cdot \rho_G \cdot (u_H - u_A)}{\rho_L \cdot g} \quad (4.5)$$

4.2 MODIFICAÇÕES NO MODELO DE HIDRÁULICA DOS PRATOS

Algumas modificações foram introduzidas com o intuito de melhor ajustar os modelos para pratos valvulados de dois passes com *downcomer*. Estas modificações são citadas abaixo.

4.2.1 Fator de Inundação e de Capacidade Aplicados ao Modelo de Chan e Fair

Segundo Fair (1961 *apud* LOCKETT, 1986), a velocidade de inundação do prato (u_F) é calculada por:

$$u_F = C_{SB} \cdot \left(\frac{\sigma}{0,02} \right)^{0,2} \cdot \left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G} \right)^{0,5} \cdot \left(\frac{\phi}{0,1} \right)^{0,44} \quad (4.6)$$

O fator de inundação do prato valvulado, FF, é dado por:

$$FF = \frac{u_N}{u_F} \quad (4.7)$$

onde a velocidade superficial do vapor (u_N) baseada na área *net* do prato (A_N = área total descontada da área de um *downcomer*) é dada por:

$$u_N = \frac{Q_G}{A_S} \quad (4.8)$$

Em seu trabalho, Domingues (2005) utilizou a correlação de Fair e Treybal (1961 *apud* LOCKETT, 1986), para o cálculo do fator de capacidade (C_{SB}) do prato dada por:

$$C_{SB} = (0,00744 \cdot T_S + 0,0117) \cdot (\log FP^{-1}) + 0,0304 \cdot T_S + 0,0153 \quad (4.9)$$

onde FP é um parâmetro de fluxo dado por:

$$FP = \frac{M_L}{M_G} \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,5} \quad (4.10)$$

O cálculo do fator de capacidade utilizando a correlação de Fair (1961) e Treybal (1968) apresentou valores muito maiores que 1, gerando fortes inconsistências no programa.

Adotou-se, então, para o cálculo do fator de capacidade a correlação proposta por Kister e Hass (1990), obtendo-se um melhor ajuste do fator de inundação da coluna. A equação considerada é dada abaixo:

$$CSB = 0,3694 \cdot \left[\left(\frac{d_H \cdot \sigma}{\rho_L} \right)^{0,125} \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0,1} \cdot \left(\frac{T_s}{h_{CL}} \right)^{0,5} \right] \quad (4.11)$$

4.2.2 Fração de Válvulas Abertas e Área *Slot* do Prato

Pratos valvulados são dispositivos de contato líquido-vapor utilizados para destilação e absorção como uma alternativa aos pratos perfurados, com uma vantagem específica: melhor *turndown ratio*.

O ponto de gotejamento, *weeping point* ou *turndown*, é definido como o ponto em que abaixo de uma dada vazão de líquido a eficiência de transferência de massa começa a cair significativamente. Este ponto corresponde ao ponto onde uma quantidade significativa de líquido começa a gotejar para o prato inferior.

Bolles (1976) considera que os pratos valvulados, com certas exceções, se comportam da mesma maneira que os pratos perfurados.

O modelo que descreve as características físicas do prato valvulado é o mesmo que descreve as características dos pratos perfurados, exceto pela área de *slot* (A_S) que é variável nos pratos valvulados e depende da vazão de vapor e da posição das válvulas.

A área de *slot* (A_S) é o parâmetro característico de operação de um prato valvulado, sendo definido como a área da cortina vertical através da qual o vapor passa na direção horizontal ao sair da válvula.

Para o cálculo da área de *slot* (A_S) é utilizado o diâmetro hidráulico, através da correlação proposta por Perry e Green (1997), conforme as Equações 4.13 e 4.14:

$$d_{HD} = \frac{4 \left[\text{Área lateral de uma válvula completamente aberta} \right]}{\text{Perímetro molhado de uma válvula completamente aberta}} \quad (4.12)$$

$$A_S = N_V \left[\text{Área lateral da válvula toda aberta usando diâmetro hidráulico} \right] \quad (4.13)$$

onde A_S é a área *slot* do prato, em m^2 , d_{HD} é o diâmetro hidráulico, em m , e N_V é o número de válvulas do prato.

No caso de válvulas redondas, o diâmetro hidráulico é igual ao próprio diâmetro da válvula e a área de *slot* é a superfície do cilindro cujo eixo é vertical à base do prato. Esta área é utilizada para a determinação da velocidade superficial do vapor (u_N), baseada na área *net* do prato (A_N).

Com vazões de vapor altas, todas as válvulas se encontram completamente abertas. Nesta situação a área de *slot* é constante e os pratos valvulados se comportam como pratos perfurados com grande área perfurada.

Com vazões de vapor baixas todas as válvulas estão repousadas sobre seus *stops* os quais são usualmente projetados para manter uma pequena abertura entre a bandeja e as

válvulas, fazendo com que os pratos valvulados se comportem como pratos com pequena área perfurada.

Com vazões de vapor intermediárias, algumas válvulas operam abertas e outras fechadas. Nenhuma válvula opera estável em posição de aberturas intermediárias. Entretanto, cada válvula alterna sua posição entre totalmente aberta ou totalmente fechada de maneira cíclica. Desta maneira, a fração de válvulas abertas é constante para uma dada vazão de vapor.

O modelo proposto por Bolles (1976) para estimar a fração de válvulas abertas (V_o) para pratos valvulados, é apresentado na Equação 4.12.

$$V_o = \frac{u_{HD} - u_{CBP}}{u_{CBO} - u_{CBP}} \quad 0 < V_o < 1 \quad (4.14)$$

onde u_{HD} é a velocidade superficial do gás baseada no diâmetro do furo, em m/s , u_{CBP} é a velocidade superficial do gás, ponto de balanço da válvula fechada, em m/s , e u_{CBO} é a velocidade superficial do gás, ponto de balanço da válvula aberta, em m/s .

Durante este trabalho, os resultados das eficiências do prato mostraram-se significativamente sensíveis às suas dimensões físicas. A identificação destes parâmetros nem sempre é uma tarefa fácil, uma vez que os pratos valvulados são desenvolvidos e fabricados por empresas que mantêm sigilo sobre as dimensões exatas.

Para aumentar a confiabilidade dos parâmetros físicos utilizados para os cálculos foram necessárias medições físicas dos pratos em questão.

Como as vazões internas de vapor e líquido de operação da coluna estudada são superiores aos valores de projeto (Tabela 4.1), as válvulas operam 100% abertas, o que é confirmado por resultados intermediários do programa.

Atenção especial deve ser dada a esta questão quando do cálculo de eficiência dos pratos valvulados em testes de colunas com variação das vazões de alimentação.

A Tabela 4.1 descreve as condições das vazões de projeto e teste da coluna fracionadora de butadieno.

Tabela 4.1: Dados de projeto e teste da fracionadora de butadieno

	Dados de projeto Fracionadora de Butadieno	Dados do teste Fracionadora Butadieno
Vazão de carga (kg/h)	11.526,5	13.001,2
Vazão de topo (kg/h)	71.354,6	*
Produção de butadieno (kg/h)	10.977,7	12.445,8
Vazão de Refluxo (kg/h)	60.376,9	78.947,9
Vazão de fundo (kg/h)	548,8	555,3

4.2.3 Área dos *Downcomers*, Área Ativa e Área Net para Pratos de Dois Passes

Dado que as geometrias dos pratos são diferentes, é necessário que as áreas dos *downcomers*, área ativa e a área *net* sejam calculadas atendendo aos parâmetros geométricos dos pratos pares e ímpares.

Para o cálculo das relações entre as dimensões do prato utilizadas para conversão do prato de dois passes para prato de um passe (KLEMOLA, 1997b), foram utilizadas as equações sugeridas por Navaes (2007).

Para o cálculo da área dos *downcomers* (A_D) foi utilizada a Equação 4.15:

$$A_D = (D_T / 2)^2 \arccos\left(\frac{D_T / 2 - H}{D_T / 2}\right) - (D_T / 2 - H) * \sqrt{D_T \cdot H - H^2} \quad (4.15)$$

onde H é o comprimento da corda do *downcomer*, em m , e D_T é o diâmetro da coluna, em m .

Para o comprimento do vertedouro (L_W) foi utilizada a equação abaixo:

$$L_W = 2 \cdot \sqrt{(D_T / 2)^2 - (D_T / 2 - H)^2} \quad (4.16)$$

A Figura 4.1 ilustra os parâmetros das relações dadas pelas equações 4.15 e 4.16.

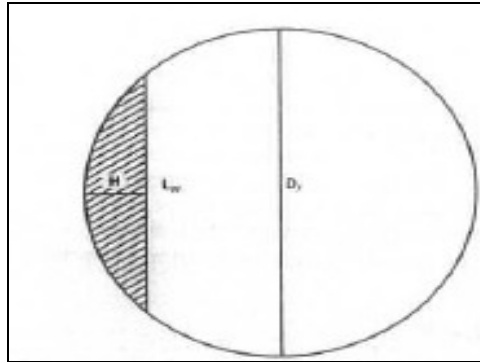


Figura 4.1: Parâmetros do prato

Fonte: NAVAES, 2007.

As relações utilizadas para o cálculo da área ativa (A_A) e para área *net* (A_N) foram:

$$A_{Ai} = A_T - (2 \cdot A_{DLi} + A_{DCi}) \quad (4.17)$$

onde A_A é a área ativa do prato ou de borbulhamento, em m^2 , A_T é a área total da seção transversal da coluna, em m^2 , A_{DC} é a área do *downcomer* central, em m^2 , e A_{DL} é a área do *downcomer* lateral, em m^2 .

e

$$A_{Ni} = A_T - A_{DCi} \quad 4.18)$$

onde i é o índice do prato.

4.3 MODELOS DE MISTURA DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO

Em geral, nos pratos com escoamento cruzado, o valor da eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) é maior do que o da eficiência de ponto (E_{OG}). O líquido acima dos pratos nunca é perfeitamente misturado na direção horizontal do prato e um gradiente de concentração é estabelecido no líquido que se move ao longo do prato. Por sua vez, isto causa um gradiente de concentração no vapor que deixa o prato. A Figura 4.2 ilustra este efeito:

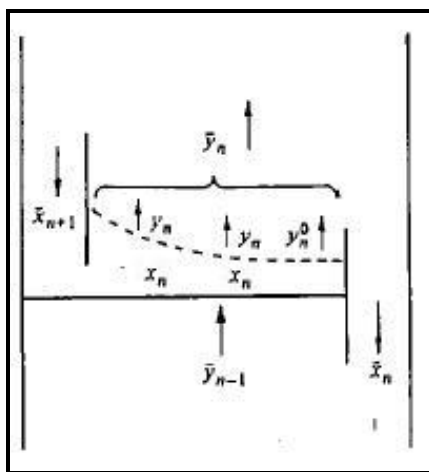


Figura 4.2: Perfil de concentração do componente mais volátil do vapor que sai do prato

Fonte: LOCKETT, 1986.

A equação abaixo define a eficiência de prato de Murphree, baseada na composição do vapor:

$$E_{MV} = \frac{\bar{y}_n - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}}, \quad y_n^* = m \cdot \bar{x}_n + b \quad (4.19)$$

e, localmente, na saída do líquido do prato, considerando que o vapor que entra é perfeitamente misturado, a eficiência de ponto (E_{OG}) é dada por:

$$E_{OG} = \frac{y_n^0 - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}} \quad (4.20)$$

Sabendo que $\bar{y}_n > y_n^0$, então $E_{MV} > E_{OG}$.

Em circunstâncias favoráveis, E_{MV} pode exceder a 1 (LOCKETT, 1986; KISTER 1992 *apud* DOMINGUES, 2005). Há um gradiente de concentração no líquido e $\bar{x}_n$ na saída do prato é menor do que x_n no prato. Isto reduz y_n^* abaixo de $\bar{y}_n$, neste caso, E_{MV} excede a 1.

Lewis (1936 *apud* LOCKETT, 1986), baseado no trabalho de Krischbaum, que encontrou consideráveis variações de concentração de líquido através dos pratos, foi o primeiro a desenvolver relações quantitativas entre E_{MV} e E_{OG} para situações nas quais não ocorre mistura de líquido na direção horizontal do prato (*plug flow*), introduzindo modificações no método de McCabe-Thiele para retificação de misturas binárias.

Os três casos considerados por Lewis são:

- a) Caso 1: O vapor está completamente misturado entre os pratos e a direção do líquido não é levada em conta.

- b) Caso 2: O vapor não está misturado entre os pratos e o líquido flui na mesma direção em todos os pratos.
- c) Caso 3: Vapor não está misturado entre os pratos e o líquido flui em direções alternadas nos sucessivos pratos.

A Figura 4.3 representa de forma esquemática os três casos considerados por Lewis (1934).

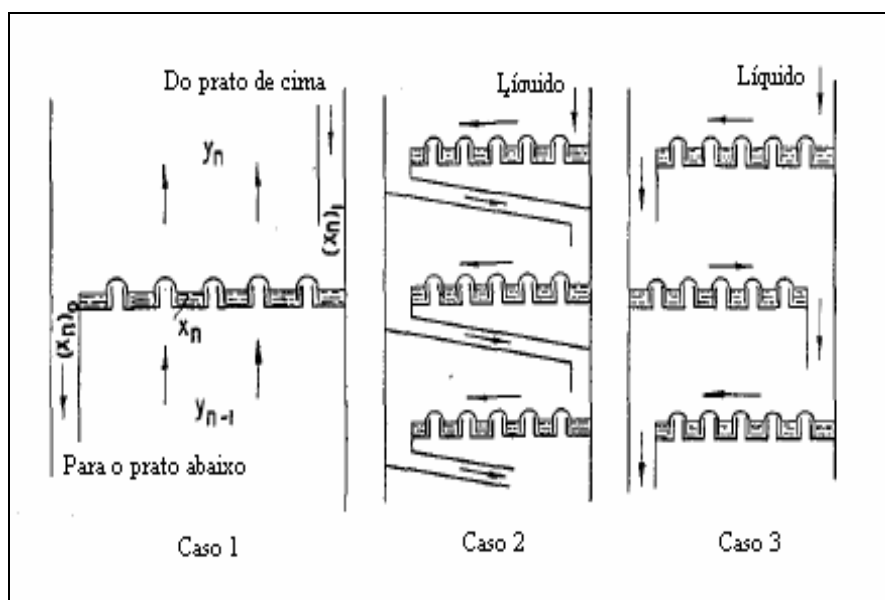


Figura 4.3: Representação dos três casos de Lewis

Fonte: LEWIS, 1934.

As correlações propostas por Lewis para o Caso 1 são mostradas pelas Equações 4.21 a 4.24, as quais estimam a eficiência de prato máxima que pode ser alcançada. Na realidade, a eficiência de prato de Murphree é menor devido às deficiências na mistura do líquido sobre o prato, ao escoamento não-uniforme de líquido e vapor através do prato e aos efeitos do arraste e gotejamento do líquido.

Lewis propôs um modelo matemático que leva em conta estes efeitos, mas considerou que não há arraste ou gotejamento de líquido que reduzem a eficiência do prato.

As Equações 4.21 e 4.22 representam, respectivamente, os casos extremos da mistura completa e ausência de mistura na fase líquida. De acordo com Lockett (1986), derivou as equações abaixo para o Caso 1:

a) $Pe = 0$ mistura completa do líquido sobre o prato (prato tipo *dualflow*)

$$E_{MV} = E_{OG} \quad (4.21)$$

b) $Pe > 20$ escoamento empistonado (*plug flow*)

$$E_{MV} = \frac{(e^{\lambda \cdot E_{OG}} - 1)}{\lambda} \quad (4.22)$$

onde

$$\lambda = m \cdot \left[\frac{\left(\frac{M_G}{MW_G} \right)}{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right)} \right] \quad (4.23)$$

e

$$Pe = \frac{\left(\frac{M_L}{MW_L} \right) \cdot d_c}{L_w \cdot h_{CL} \cdot \left(\frac{\rho_L}{MW_L} \right) \cdot De} \quad (4.24)$$

Gerster *et al.* (1958 *apud* NAVAES, 2007) desenvolveram equações para determinar situações intermediárias de mistura de líquido sobre o prato para o Caso 1 de Lewis. Estas equações são função do número de Pe , que mede o grau de turbulência no prato e λE_{OG} , que mede a facilidade da separação dos componentes envolvidos.

c) $0 < Pe < 20$ mistura parcial

$$\frac{E_{MV}}{E_{OG}} = \frac{1 - [e^{-(\eta + Pe)}]}{(\eta + Pe) \left[1 + \frac{(\eta + Pe)}{\eta} \right]} + \frac{e^\eta - 1}{\eta \left[1 + \frac{\eta}{(\eta + Pe)} \right]} \quad (4.25)$$

onde

$$\eta = \frac{Pe}{2} \cdot \left[\sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda \cdot E_{OG}}{Pe}} - 1 \right] \quad (4.26)$$

Para o Caso 3, Lewis (1936 *apud* LOCKET, 1986) adotou o parâmetro razão de similaridade de concentração (φ), onde:

a) Se $\varphi < 1$

$$\lambda = \sqrt{\frac{\varphi^2 - (1 - E_{OG})^2}{E_{OG}^2 \cdot (1 - \varphi^2)}} \arccos \left[1 - \frac{(1 - \varphi) \cdot (\varphi - 1 + E_{OG})}{\varphi \cdot (2 - E_{OG})} \right] \quad (4.27)$$

b) Se $\varphi > 1$

$$\lambda = \sqrt{\frac{\varphi^2 - (1 - E_{OG})^2}{E_{OG}^2 \cdot (1 - \varphi^2)}} \arccos h \left[1 + \frac{(\varphi - 1) \cdot (\varphi - 1 + E_{OG})}{\varphi \cdot (2 - E_{OG})} \right] \quad (4.28)$$

onde λ = razão entre a inclinação da curva de equilíbrio e a curva de operação, para cada prato.

c) Se $\varphi=1$

$$E_{MV} = \frac{(2 - E_{OG}) \cdot E_{OG}}{2 \cdot (E_{OG}^2 / 3 - E_{OG} + 1)} \quad (4.29)$$

e , finalmente

$$E_{MV} = \frac{\varphi - 1}{\lambda - 1} \quad (4.30)$$

Devido às dificuldades de se obterem soluções analíticas para o Caso 3, Lockett (1986) sugere o uso de uma aproximação para o cálculo da eficiência de Murphree (E_{MV}) para qualquer valor de Pe , λ e eficiência de ponto (E_{OG}), baseado na similaridade da variação da eficiência de Murphree (E_{MV}) com o Pe para os 3 casos.

Para o Caso 3, Lewis (1936 *apud* LOCKET, 1986) propôs as seguintes equações:

$$E_{MV} = E_{OG} + \left[(E_{MV})_{\left| \begin{smallmatrix} Pe=\infty \\ \text{Caso 3} \end{smallmatrix} \right|} - E_{OG} \right] \cdot A \quad (4.31)$$

sendo:

$$A = \frac{(E_{MV})_{\left| \begin{smallmatrix} Pe \\ \text{Caso 1} \end{smallmatrix} \right|} - E_{OG}}{(E_{MV})_{\left| \begin{smallmatrix} Pe=\infty \\ \text{Caso 1} \end{smallmatrix} \right|} - E_{OG}} \quad (4.32)$$

Onde $(E_{MV})_{\left| \begin{smallmatrix} Pe=\infty \\ \text{Caso 1} \end{smallmatrix} \right|}$: valor de E_{MV} para $Pe=\infty$ (Caso 1)

$(E_{MV})_{\left| \begin{smallmatrix} Pe \\ \text{Caso 1} \end{smallmatrix} \right|}$: valor de E_{MV} para um valor qualquer de $0 < Pe < \infty$ (Caso 1)

$(E_{MV})_{\left| \begin{smallmatrix} Pe=\infty \\ \text{Caso 3} \end{smallmatrix} \right|}$: valor de E_{MV} para $Pe=\infty$ (Caso 3)

$(E_{MV})_{Pe}$ e $(E_{MV})_{Pe=\infty}$ são avaliados com os mesmos valores de λ e E_{OG} .

Lockett (1986) observa que o vapor, que entra no prato de fundo da coluna vindo do refeedor, está completamente misturado e, por isso, a mistura do prato pode ser considerada como Lewis Caso 1. Nos pratos subsequentes, o vapor não está misturado entre os pratos e, após quatro pratos, a eficiência do prato (E_{MV}) torna-se constante e corresponde ao Caso 3 de Lewis.

No caso de pratos valvulados com dois passes, a vazão de líquido total do prato é dividida entre os dois vertedouros fazendo-se necessário ajustar a vazão de líquido por vertedouro. Para tanto, basta dividir a vazão de líquido de cada prato pela metade.

Apesar de o Caso 3 de Lewis representar melhor o comportamento de colunas comerciais de grande diâmetro, uma vez que o líquido flui em direções alternadas nos sucessivos pratos, não se conseguiu, neste trabalho, resultados consistentes para este caso, visto que não foi possível obter convergência no programa em Fortran 77. Por esta razão, o modelo de mistura simples para o Caso 1 de Lewis foi escolhido como modelo de mistura de líquido sobre o prato.

4.3.1 Difusividade Turbulenta

Existem diversos modelos mencionados na literatura para o cálculo da difusividade turbulenta (*eddy*) (De).

Lockett (1986) recomenda a correlação de Molnar (1974) como sendo a mais apropriada para pratos valvulados.

$$De = \left[0,0005 + 0,001285.u_A + 6,32 \cdot \left(\frac{Q_L}{L_w} \right) + 0,312.h_w \right]^2 \quad (4.33)$$

4.4 EFICIÊNCIAS DOS PRATOS VALVULADOS DE DOIS PASSES

Uma vez que a geometria dos pratos de duplo passe difere da geometria dos pratos de um passe é necessário se fazerem considerações específicas para este tipo de prato. Nesta seção são abordados os principais aspectos que diferenciam os pratos de dois passes.

4.4.1 Efeito da Geometria dos Pratos na Distribuição de Líquido e Vapor entre os Vários Passes

Bolles (1976) propôs um método para prever o efeito da geometria dos pratos na distribuição de líquido e vapor entre os vários passes e seus reflexos na eficiência média do prato, bem como projetar pratos multipasses perfurados, valvulados ou com borbulhadores de fluxo cruzado com *downcomers* de dois, três e quatro passes com ótima eficiência e distribuição de fluxo.

Os resultados apresentados indicam que os pratos de dois passes não apresentam problemas especiais na distribuição. Os fluxos de líquido e o vapor distribuem-se igualmente entre os passes e a eficiência média do prato de Murphree (E_{MV}) é essencialmente igual a média aritmética das eficiências dos passes individuais.

No caso de pratos com três e quatro passes, certas geometrias de pratos podem levar à distribuição deficiente dos fluxos de vapor e líquido, gerando, muitas vezes, fluxos em alguns dos passes muito maiores do que em outros. Esta distribuição deficiente resulta em atolamento prematuro da coluna e uma considerável redução da eficiência média do prato de Murphree (E_{MV}) do prato em relação à eficiência ótima possível.

Para uma distribuição de fluxo uniforme e uma eficiência ótima do prato, Bolles (1976) recomenda adotar áreas de passes e de borbulhamento iguais, assim como adotar vertedouros na entrada dos pratos. Estas recomendações tornam desnecessária a utilização de túneis de equalização de vapor ligando os vertedouros intermediários e a eficiência média de

prato de Murphree (E_{MV}) do prato será essencialmente igual à média aritmética da eficiência de Murphree prevista para o passe.

No entanto, o estudo de Bolles (1976) não aborda a redução da eficiência causada pela existência de regiões estagnadas de líquido sobre o prato multipasse.

4.4.2 Modelo de Regiões Estagnadas – SRM

O estudo do Modelo de Regiões Estagnadas (SRM) tem uma grande importância no desenvolvimento das características geométricas dos pratos modernos, tais como, do prato SUPERFRAC® da KOCH-GLITSCH e do prato VGPlus® da SULZER CHEMTECH. O uso das observações das zonas de estagnação do líquido sobre o prato, produzidas em testes laboratoriais, deram origem a uma nova geração de pratos, onde procura-se minimizar e até eliminar as regiões de estagnação.

O modelo mais popular para avaliação dos efeitos da má distribuição do líquido sobre os pratos para o cálculo da eficiência dos pratos foi o proposto por Lockett (1986) e recebeu o nome de modelo de regiões estagnadas (SRM) (KISTER, 1992).

O modelo postula que o escoamento de líquido sobre o prato ocorre por mecanismo de escoamento empistonado no centro do prato com zonas de estagnação perto das paredes das colunas. As zonas estagnadas são definidas de forma simplificada pelas áreas compreendidas entre a paredes das colunas e as cordas que ligam o final do *downcomer* de entrada e o *downcomer* de saída.

O tratamento teórico mais aceita para avaliar os efeitos de escoamento em pratos de fluxo cruzado foi proposto por Anderson (PORTER *et al.*, 1972), o qual é recomendado pela *AIChE Bubble Tray Design Manual*. O modelo assume que o caminho do líquido tem largura uniforme, sendo baseado no modelo *plug flow*, sobre o qual é aplicado o mecanismo de mistura *backmixing*. Este modelo prevê que, quando do *scale up* de uma coluna de destilação, a eficiência do prato (E_{MV}) deveria aumentar, uma vez que o comprimento do caminho do líquido e a velocidade do escoamento cruzado aumentam (PORTER *et al.*, 1972).

Da mesma forma, Klemola e Ilme (1997b) concluíram em seu trabalho que o caminho mais longo de pratos de um passe relativamente a pratos de dois passes corresponde a uma maior eficiência de prato de Murphree (E_{MV}). Entretanto, os poucos trabalhos experimentais apresentados sobre colunas de destilação de grandes diâmetros indicam que esta expectativa não é alcançada. A razão para esta diferença está na natureza do padrão de escoamento do líquido nos pratos.

Nos pratos de fluxo cruzado, o líquido emerge do *downcomer* lateral em uma seção divergente onde ocorrem severas canalizações. No modelo de mistura *backmixing*, o efeito das canalizações não é levado em conta, uma vez que o perfil de velocidade do líquido é considerado uniforme e o líquido escoar pelo prato como se estivesse em um prato retangular não considerando os efeitos causados pela parede da coluna.

Canalizações de líquido são usualmente associadas aos escoamentos em canais divergentes e somente quando o líquido escoar do *downcomer* lateral para o central. Neste caso, o líquido entra em uma região divergente e tem pouca tendência de se mover para os lados para seguir a curva da parede da coluna.

O líquido tende a escoar por um canal preferencial que é a menor distância entre os dois *downcomers*, havendo regiões de baixa velocidade e de estagnação nas laterais dos pratos. Conforme descrito em Lockett (1986), como não há escoamento de líquido nas regiões de estagnação, o líquido entra rapidamente em equilíbrio com o vapor, fazendo com que o vapor que passa por essas regiões não altere mais sua composição. Como o objetivo do prato é mudar a composição do vapor, ocorre uma redução da eficiência do prato.

Este autor observa que as considerações acima são simplificações e que Porter *et al.* (1972 *apud* LOCKETT, 1986), demonstraram que, para pratos com pequenos diâmetros, há uma reposição dos componentes leves removidos pelo vapor nas regiões estagnadas, devido a mistura transversal com o líquido da região ativa. Entretanto, este efeito ocorre em uma distância limitada, onde a máxima largura das regiões de estagnação é menor do que 0,5 m, sendo independente do diâmetro do prato. Assim, quanto maior o diâmetro do prato, mais significativo tende a ser o efeito de estagnação de líquido na eficiência dos pratos.

No caso de pratos de um passe, é esperado que as zonas de líquido estagnado causem uma redução significativa da eficiência, especialmente em colunas com grande diâmetro, contendo um grande número de pratos. Isto é causado porque as regiões de estagnação são alinhadas – uma no topo da outra, e assim, o vapor pode percorrer vários pratos sem alterar sua composição.

Colunas com pratos de dois passes têm a vantagem de diminuir os efeitos das zonas de líquido estagnado. A composição do vapor modifica-se com a alternância da geometria dos pratos o que produz um aumento na eficiência, compensando parte da eficiência perdida pelo prato ter um menor comprimento do caminho do líquido.

Lim *et al.* (1974) mostraram que a máxima eficiência para pratos de um passe com escoamento cruzado é atingida com um diâmetro de coluna de aproximadamente 2,1 m e para pratos de dois passes em torno de 2,7 m.

A coluna fracionadora de butadieno estudada possui um diâmetro de 2,3 m e uma distância máxima entre as paredes das colunas e as cordas que ligam o final do *downcomer* de entrada e o *downcomer* de saída de 0,48 m. Mesmo considerando que a distância máxima entre as paredes da coluna e as cordas que ligam o final do *downcomer* de entrada e de saída da coluna fracionadora de butadieno está abaixo do limite recomendado por Porter *et al.* (1972 *apud* LOCKETT, 1986) de 0,5 m, optou-se por incluir o método das regiões estagnadas (*SRM*) nas avaliações das eficiências de pratos realizadas neste trabalho e compará-las com os outros modelos de eficiência considerados.

4.4.3 Critérios para Escolha de Pratos com um Passe ou Dois Passes no Projeto de Colunas de Destilação

Em colunas pequenas, a mistura transversal é suficiente para compensar os efeitos das zonas de líquido estagnadas, portanto, neste caso é preferível utilizar pratos de um passe. Entretanto, à medida que os diâmetros das colunas aumentam, as canalizações do líquido passam a ter um papel importante na determinação da eficiência e pratos de dois passes são preferidos.

Do ponto de vista de eficiência, pratos de um passe são instalados, preferencialmente, em colunas com menos que 2 m de diâmetro e pratos de dois passes acima deste diâmetro.

À medida que o diâmetro das colunas aumenta, os projetistas tomam a decisão de trocar os pratos de um passe para pratos de passe duplo quando a quantidade de líquido recebida pelo *downcomer* torna-se excessiva. Segundo Lim *et al.* (1974), se o escoamento sobre o vertedouro for maior que $104 \text{ m}^3/\text{h} \times m \text{ do vertedouro}$ tende a ocorrer distribuição deficiente de vapor sobre o prato.

A Figura 4.4 apresenta a comparação entre o critério hidráulico e de eficiência para troca de prato de um passe para prato de dois passes à medida que o diâmetro da coluna aumenta, onde W_S é o comprimento do vertedor lateral em *ft*, e D_T é o diâmetro da coluna em *ft*. Fica evidente que a troca de prato de passe simples para passe duplo com base no critério de eficiência deve ser considerada somente se o escoamento de líquido sobre o vertedouro for considerável.

O critério de troca de prato de um passe para de dois passes baseado na eficiência dos pratos é mais rigoroso quando comparado ao critério hidráulico. O investimento em pratos de dois passes é mais elevado, no entanto, o ganho de eficiência pode diminuir esta diferença.

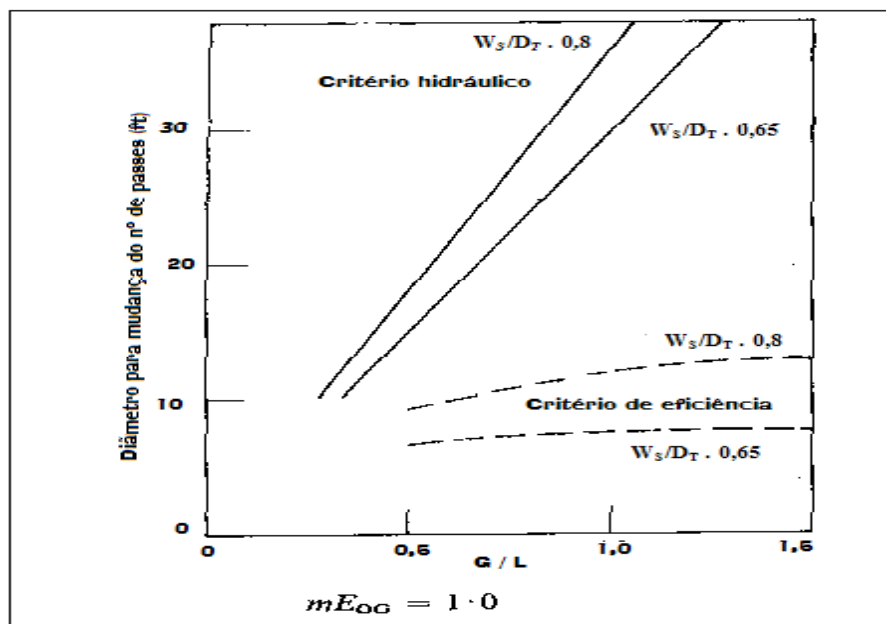


Figura 4.4: Comparação entre os critérios hidráulicos e de eficiência para troca do número de passes dos pratos

Fonte: LIM *et al.*, 1974.

Os artigos de Porter *et al.* (1972), Weiler *et al.* (1973), Lim *et al.* (1974) e Weiler *et al.* (1981) tratam da redução da eficiência causada pela distribuição inadequada do escoamento sobre o prato de duplo passe quando o líquido escoar do *downcomer* lateral para o *downcomer* central.

Segundo Lim *et al.* (1974), em colunas contendo pratos de duplo passe com projeto convencional, dois padrões de escoamento de líquido são possíveis, dependendo se o escoamento do líquido se dá do centro para os lados ou vice-versa. As Figuras 4.5 e 4.6 mostram estes padrões de escoamento, onde se podem identificar as regiões de estagnação.

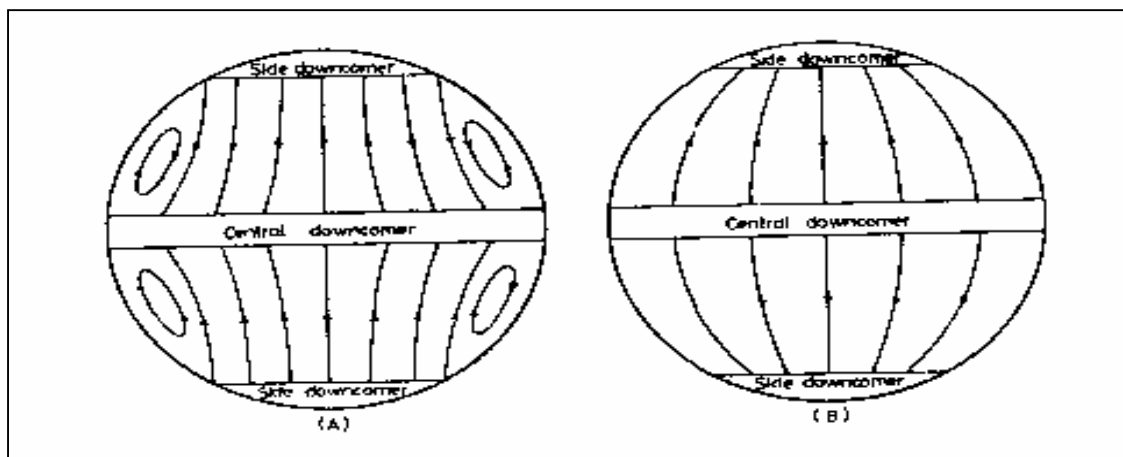


Figura 4.5: Padrões de escoamento de líquido em pratos de dois passes

Fonte: LIM *et al.*, 1974

- (A) Fluxo dos lados para o centro
- (B) Fluxo do centro para os lados

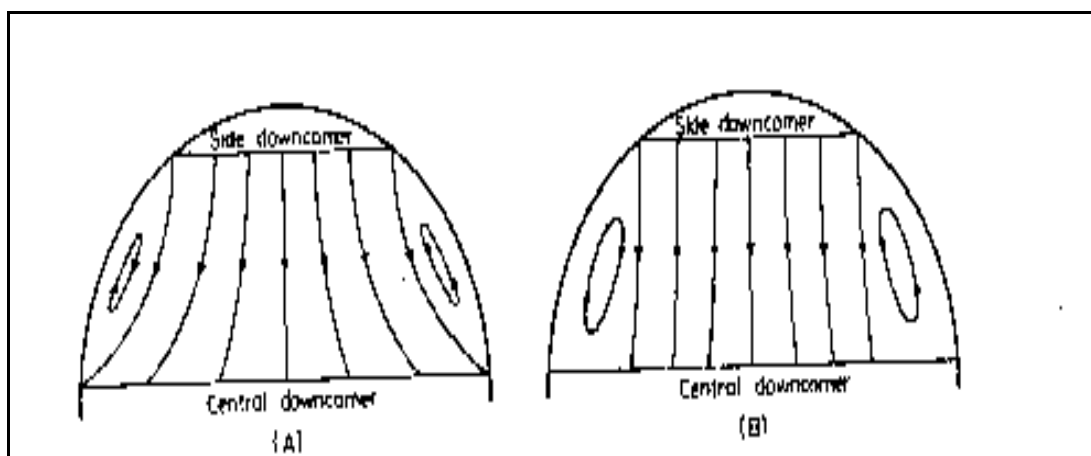


Figura 4.6: Mudanças nas regiões de estagnação com aumento da vazão de líquido (fluxo das laterais para o centro) em pratos de dois passes

Fonte: LIM *et al.*, 1974.

- (A) Com baixa vazão de líquido
- (B) Com alta vazão de líquido

Para simplificar as deduções matemáticas do modelo, Lim *et al.* (1974) consideraram o padrão de escoamento mostrado na Figura 4.7. Do ponto de vista de eficiência dos pratos, este é o pior caso considerado, pois resulta na eficiência mais baixa possível.

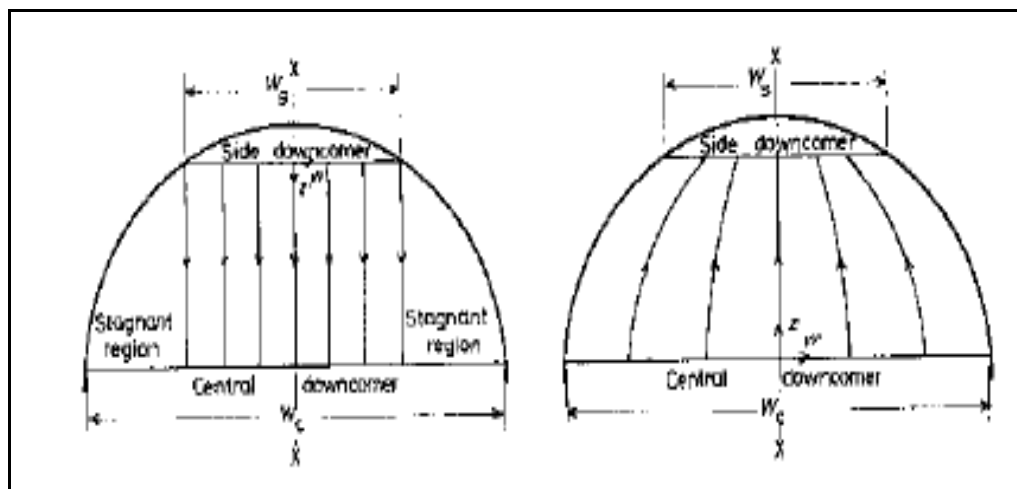


Figura 4.7: Padrão de escoamento de líquido considerado por Lime et al., 1974

Fonte: LIM *et al.*, 1974.

(A) Fluxo dos lados para o centro

(B) Fluxo do centro para os lados

Porter *et al.* (1972) apresentaram um modelo de escoamento para prato valvulado de fluxo cruzado de um passe no qual foi assumido que o líquido que emerge do *downcomer* de entrada escoava através do prato diretamente para o *downcomer* de saída sem se espalhar para os lados. O padrão de escoamento, similar ao adotado por Lim *et al.* (1974), é mostrado, esquematicamente, na Figura 4.8. Na Região I, o líquido escoava através do prato com velocidade uniforme. Já o líquido da Região II fica estagnado e não é renovado pelo líquido que cruza o prato.

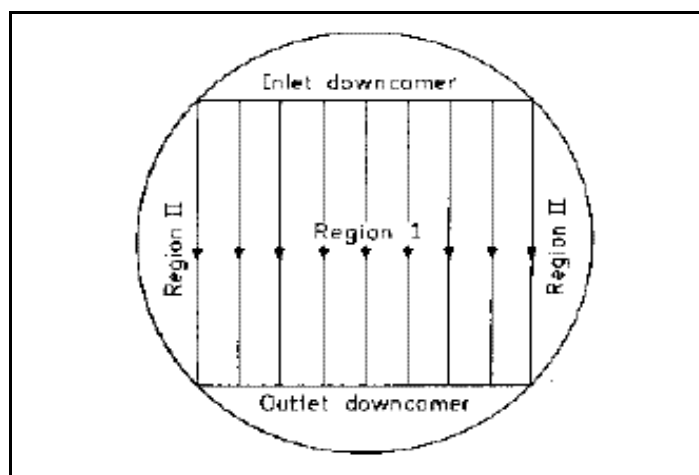


Figura 4.8: Padrão de escoamento de líquido considerado por Porter *et al.* (1974)

Fonte: PORTER *et al.*, 1974

Superposto ao padrão de escoamento, tem-se o movimento aleatório das partículas de líquido causado pelo borbulhamento do vapor que causa *back mixing* na região I e troca de líquido entre a Região I e II.

De acordo com Porter *et al.* (1972), para prato de grande diâmetro, a eficiência de Murphree pode ser calculada pela Equação 4.34.

$$\left[\frac{E_{MV}}{E_{OG}} \right]_L = \frac{A_I}{A_A} \cdot \left[\frac{E_{MVI}}{E_{OG}} \right] \quad (4.34)$$

onde A_I é a área da Região I do prato e A_A é a área de borbulhamento do prato

Para o calculo da eficiência de prato de Murphree modificada (E_{MVI}), Porter *et al.* (1972) sugerem o uso dos modelos de mistura de líquido sobre o prato de Lewis (1936) com correções para o cálculo do número de *Peclet* e do λ que expressa a razão entre a inclinação da curva de equilíbrio (m) e a curva de operação.

Para o Caso 1:

a) $Pe = 0$ mistura completa do líquido sobre o prato (prato tipo *dualflow*)

$$E_{MVI} = E_{OG} \quad (4.35)$$

b) $0 < Pe < 20$ mistura parcial

$$\frac{E_{MV1}}{E_{OG}} = \frac{1 - [e^{-(\eta + Pe')}] }{(\eta + Pe') \cdot \left[1 + \frac{(\eta + Pe')}{\eta} \right]} + \frac{e^{\eta} - 1}{\eta \cdot \left[1 + \frac{\eta}{(\eta + Pe')} \right]} \quad (4.36)$$

onde,

$$\eta = \frac{Pe'}{2} \cdot \left[\sqrt{1 + \frac{4 \cdot \lambda' \cdot E_{OG}}{Pe'}} - 1 \right] \quad (4.37)$$

$$Pe' = Pe \cdot \left[1 - \left(\frac{L_w}{D} \right)^2 \right]^{0,5} \quad (4.38)$$

e

$$\lambda' = \frac{m \cdot Q_G \cdot A_I}{Q_L \cdot A_A} \quad (4.39)$$

c) $Pe > 20$ escoamento empistonado (*plug flow*)

$$E_{MV} = \left[e \left(\frac{\lambda \cdot E_{OG} \cdot A_I}{A_A} \right) - 1 \right] / \lambda \quad (4.40)$$

No cálculo da área da região de estagnação de líquido, adotou-se a área do trapézio, tendo como a base menor a largura do *downcomer* lateral e base maior o resultado da correlação que permite o cálculo da largura efetiva do *downcomer* dos pratos com escoamento da lateral para o centro, proposta por Lockett e Banik (1981 *apud* LOCKETT, 1986, p. 196).

$$\frac{L_{WE}}{D_T} = 0,5 \cdot \frac{L_w}{D_T} + \frac{\left(\frac{0,5 \cdot \pi}{180} \right) \arcseno \left\{ \left[1 - \left(\frac{L_w}{D_T} \right)^2 \right]^{0,5} \right\}}{\left[1 - \left(\frac{L_w}{D_T} \right)^2 \right]^{0,5}} \quad (4.41)$$

onde, L_{WE} é o comprimento da corda equivalente de pratos com *downcomer* - *SRM*, em *m*, L_W é o comprimento da corda de pratos com *downcomer*, em *m*, e D_T é o diâmetro da coluna em *m*.

A Figura 4.9 ilustra a razão entre a eficiência de Murphree (E_{MV}) e de ponto (E_{OG}) em função do número do prato de duplo passe para uma coluna de 4,5 m de diâmetro. O efeito “dente de serra” é causado pela diferença do padrão de escoamento de pratos alternados.

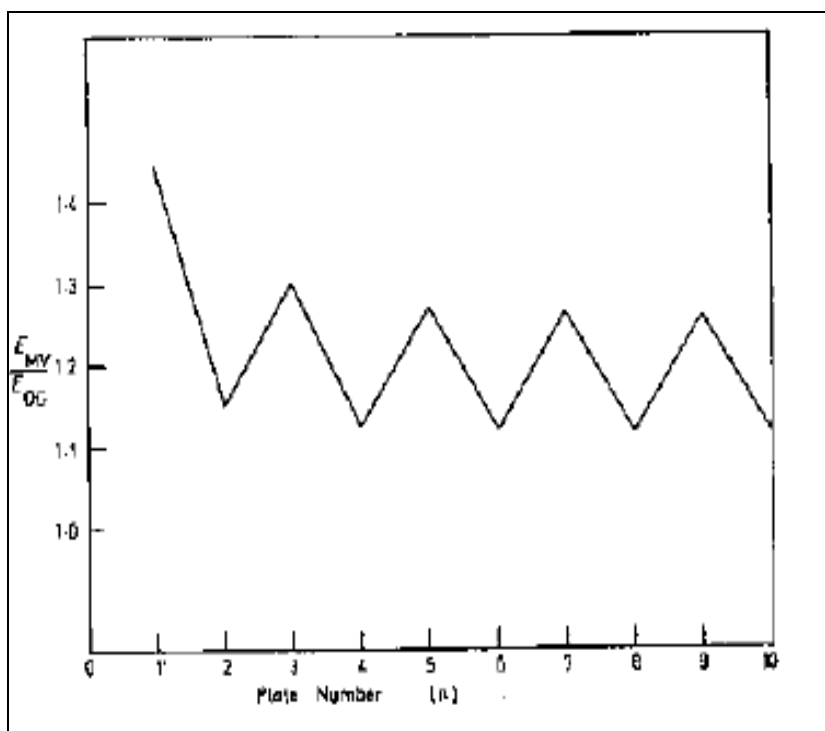


Figura 4.9: Razão das eficiências x número do prato de duplo passe

Fonte: LIM *et al.*, 1974.

4.5 MODELOS PARA ARRASTE E GOTEJAMENTO DE LÍQUIDO

O arraste de líquido para o prato superior pelo vapor que está subindo através dos pratos provoca um reciclo interno de líquido, ocasionando redução da eficiência de prato.

Lockett (1986) chamou a eficiência de prato corrigida pelos efeitos de arraste de líquido e gotejamento, de eficiência aparente, E_{MV}^a . O modelo clássico que leva em conta o efeito do arraste de líquido foi desenvolvido por Colburn (1936 *apud* LOCKETT, 1986):

$$E_{MV}^a = \frac{E_{OG}}{1 + \left(\frac{L'}{L}\right) \cdot E_{OG}} \quad (4.42)$$

Uma conveniente aproximação é substituir E_{OG} por E_{MV} na Equação 4.42 e estimar E_{MV} sem levar em conta o arraste de líquido e gotejamento. Tal aproximação não tem qualquer fundamento teórico, contudo é um artifício adequado e superestima levemente E_{MV}^a comparado com métodos rigorosos (LOCKETT, 1986 *apud* DOMINGUES, 2005). Sendo assim, a Equação 4.42 é reescrita para:

$$E_{MV}^a = \frac{E_{MV}}{1 + \left(\frac{L'}{L}\right) \cdot E_{MV}} \quad (4.43)$$

Zuiderweg (1982 *apud* DOMINGUES, 2005) desenvolveu uma correlação para estimar a fração de líquido arrastado em relação ao total de líquido descendo pela coluna, (L'/L) :

$$\frac{L'}{L} = 1.10^{-8} \cdot \left(\frac{h_B}{T_S}\right)^3 \cdot \left(\frac{u_H}{(Q_L / A_A)}\right)^2 \quad (4.44)$$

onde h_B é a altura do leito para regime *spray* dada por:

$$h_B = h_{CL} \cdot \left\{ 265 \cdot \left[\frac{u_A}{(g \cdot h_{CL})^{0.5}} \cdot \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{0.5} \right]^{1.7} + 1 \right\} \quad (4.45)$$

O fluxo de gotejamento (*weeping*) foi definido por Lockett e Banik (1984 *apud* LOCKETT, 1986) como:

Fluxo de gotejamento = vazão de gotejamento (m^3/s) / A_H (m^2)

$$W_F = 0,020 \cdot Fr_h^{-1} - 0,030 \quad (4.46)$$

O número de *Froude* (Fr_h) é definido por:

$$Fr_h = u_H \cdot \left(\frac{\rho_G}{g \cdot h_{CL} \cdot \rho_L} \right)^{0.5} \quad (4.47)$$

Nos modelos de cálculo de eficiência desenvolvidos neste trabalho não se incluiu o impacto do gotejamento em pratos valvulados na eficiência de prato, pois, segundo Lockett (1986), não há uma equação convenientemente simples análoga à de Colburn (1936), mostrada na Equação 4.42, para determinar a eficiência aparente (E_{MV}^a) sob condições de gotejamento.

Neste trabalho, apenas foi estimado o fluxo de gotejamento, que espera-se ser muito baixo ou nulo no caso de pratos valvulados.

4.6 MODELO TERMODINÂMICO

A escolha do modelo termodinâmico é o primeiro e importante passo para a obtenção de resultados acurados em uma simulação de coluna de destilação.

No manual do simulador Aspen Plus 2006 (2007), podem ser encontradas recomendações para auxiliar na escolha da equação de estado e modelo para coeficiente de atividades para várias aplicações petroquímicas.

A fracionadora de butadieno se enquadra no item “*light hydrocarbons separation train*”, para o qual é sugerido o uso das equações de estado de *Soave-Redlich-Kwong* e *Peng-Robinson*.

Em aplicações petroquímicas, com compostos de até 4 carbonos, o manual da AspenTech (2007) recomenda o uso de equação de estado *SRK* com banco de dados para os parâmetros de interação binária *Ethylene* ao invés de *Pure 12*.

4.6.1 Seleção do Modelo para a Fracionadora de Butadieno

Apesar da AspenTech recomendar o uso da equação de estado *SRK* com banco de dados *Ethylene* para simulação de colunas que separam hidrocarbonetos leves, no decorrer do trabalho, verificou-se que o método do coeficiente de atividade do líquido *NRTL* (*Non-Random Two-Liquid*) associado à equação de estado Redlich-Kwong (*RK*) para a fase vapor – modelo *NRTL-RK*, apresentou um melhor ajuste do modelo aos dados do teste da coluna.

O modelo de coeficiente de atividade *NRTL* descreve o equilíbrio líquido-líquido de soluções fortemente não-ideais. O modelo requer parâmetros binários, geralmente obtidos da literatura e/ou de regressão linear de dados experimentais, tais como o banco de dados de Dortmund, já incluídos no banco de dados do simulador Aspen Plus 2006. O método *NRTL* pode lidar com combinações de compostos polares e apolares com alta não-idealidade.

Segundo Lopes Filho (1986 *apud* DOMINGUES, 2005), o modelo *NRTL* com coeficiente de atividade do líquido é de fácil generalização para misturas multicomponentes,

oferecendo boa previsão de imiscibilidades e bons resultados para misturas fortemente não-ideais.

Com o objetivo de identificar qual o modelo que melhor representa os dados do teste da coluna, foram escolhidos os modelos de equação de estado *SRK*, *Peng-Robinson*, *RK-Soave* e o modelo de coeficiente de atividade *NRTL* com equação de estado *RK* (*NRTL-RK*) utilizando os bancos de dados *Ethylene* e *Pure 12*.

Nas Tabelas 4.2 e 4.3 são comparados os perfis de temperaturas e de concentrações obtidos a partir das simulações com os dados de teste da coluna

Tabela 4.2: Perfis de temperaturas da fracionadora de butadieno

Temperaturas (°C)	Dados da coluna - teste	<i>SRK – Ethylene</i>	<i>NRTL-RK Ethylene</i>	<i>PENG- ROBINSON Pure 12</i>	<i>RK-SOAVE - Pure 12</i>	<i>NRTL-RK Pure 12</i>
Topo (prato 1)	44,8	45,2	45,5	45,5	45,2	45,5
Prato 43	51,1	50,1	50,0	50,4	50,1	50,0
Prato 57	53,7	54,8	53,4	55,0	54,7	53,4
Fundo (prato 85)	63,2	63,5	63,5	63,7	63,4	63,5

Os valores das temperaturas, mostra na Tabela 4.2, não permite que se conclua qual ou quais modelos melhor ajusta o perfil de temperatura, uma vez que as temperaturas calculadas estão dentro da margem de erro das medições da coluna testada .

No entanto, a análise das composições, expressas na Tabela 4.3, mostra que o modelo *NRTL-RK* com banco de dados *Pure 12* é o que melhor representa o perfil de composições levantado nos testes, com destaque para a composição do fundo.

Tabela 4.3: Perfis de composições da fracionadora de butadieno

Composição - 1,3 Butadieno -fase líquida - molar	Dados da coluna - teste	<i>SRK – Ethylene</i>	<i>NRTL-RK Ethylene</i>	<i>PENG- ROBINSON Pure 12</i>	<i>RK-SOAVE - Pure 12</i>	<i>NRTL-RK Pure 12</i>
Topo (prato 1)	0,9962	0,9964	0,9964	0,9964	0,9964	0,9964
Prato 43		0,8697	0,9214	0,8753	0,8731	0,9215
Prato 57		0,4903	0,6510	0,5015	0,4969	0,6521
Fundo (prato 85)	0,0093	0,0090	0,0092	0,0091	0,0091	0,0093

Considerando o perfil de composição, o modelo *NRTL-RK* é o que melhor concorda com os dados levantados no teste da coluna, sendo, portanto, adotado nas simulações deste trabalho.

A questão que emerge desta conclusão é: porque um método que melhor descreve o equilíbrio líquido-vapor e líquido-líquido de soluções fortemente não-ideais ajusta melhor os dados do teste de separação de hidrocarbonetos leves?

A explicação para este fato pode estar na existência de polaridade (momento dipolar) nas moléculas de 1,2 butadieno, cis-2-buteno e no 1-butino, presentes na carga da coluna.

A distribuição dos elétrons é um fator importante e influencia nas propriedades físicas e químicas das moléculas. O momento dipolar de um composto é função da distribuição das cargas das moléculas e pode ser utilizado para calcular as propriedades químicas e físicas.

Toropov *et al.* (2003), Tasi *et al.* (1998) e Jug *et al.* (2000) fornecem valores de momentos dipolares para hidrocarbonetos, os quais são reportados na Tabela 4.4 abaixo.

Tabela 4.4: Momento dipolar dos hidrocarbonetos

Componente		Momento dipolar		Composição carga
		(1)	(2)	% mol
Propano	C3H8	0,083		
Butano	C4H10	0,000		
1,2 butadieno	C4H6-3	0,401	0,401	0,69
1,3 butadieno	C4H6-4	0,000		95,4
cis-2-buteno	C4H8-2	0,330		3,53
Trans-2-buteno	C4H8-3	0,000		0,14
n-pentano	C5H12-1	0,000		0,13
1-butino	C4H6-1	0,810	0,800	0,1
Penteno-1	C5H10-2	0,340		
Hexano	C6H14-1	0,000		
Hexeno-1	C6H12-3	0,340		

(1) A. L. McClellan (1963)

(2) Journal of Theoretical and Computational Chemistry, Vol. 2, No. 2 (2003) 139{146

4.6.2 Estimativa das Propriedades Físicas

Os métodos para estimar as principais propriedades físicas do sistema utilizado para simular a coluna são apresentados nessa seção, tendo sido retirados do manual Aspen 2006 (2007).

- Volume molar da mistura de vapor: equação de estado de *Redlich-Kwong* (RK). A equação calcula as propriedades termodinâmicas da fase vapor, podendo ser utilizada nos métodos NRTL-RK, UNIFAC, UNIQU-RK, UNIF-LL, VANL-RK e WILS-RK. É aplicada a sistemas com pressões baixas e moderadas (máximo 10 bars) nas quais a fase vapor possui baixa idealidade (REDLICH *et al.*, 1979, p. 223-244)
- Volume molar da mistura de líquido: modelo de *Rackett* (1970, p.154).
- Viscosidade do vapor (μ_G): modelo de *Chapman-Enskog-Brokaw* com regra de mistura de Vilke.

- d) Viscosidade do líquido (μ_L): modelo de *Andrade*. (REID *et al.*, 1987, p. 439)
- e) Coeficiente de difusão molecular na fase vapor (D_G): modelo de *Dawson-Khoury-Kobayashi* (REID *et al.*, 1987, p. 597) para difusividade de um componente na mistura, dado por:

$$D_G = \sum_{j \neq i} y_i \left[\sum_{j \neq i} \frac{D_{ij}^v}{y_j} \right] \quad (4.48)$$

onde o coeficiente de difusão binária D_{ij}^v é calculado pelo modelo de Dawson-Khoury-Kobayashi (REID *et al.*, 1977, p. 560), y_i e y_j são as frações molares dos componentes na mistura de vapor.

- f) Coeficiente de difusão molecular na fase líquida (D_L): modelo de *Wilke-Chang* (REID *et al.*, 1987, p. 618) para difusividade de um componente na mistura.
- g) Tensão superficial (σ): calculado pelo método empírico de *Hakim-Steinberg-Stiel*.
- h) Para a estimativa do coeficiente de difusão molecular nas fases vapor e líquida, no caso de misturas multicomponentes, Kister (1992) sugere o uso do método pseudo-binário, ou seja, predizer os coeficientes de difusão binária dos chaves em cada fase da mistura na pressão e temperatura do sistema.

Neste trabalho, utilizou-se a média das difusividades nos pratos do chave leve na mistura de hidrocarbonetos, nas fases líquida e vapor. O simulador Aspen Plus 2006 não permite estimar a difusividade de um binário em uma determinada mistura para cada prato da coluna (BEAUDOIN, 2005 *apud* DOMINGUES, 2005). Separadamente, estimou-se a difusividade do pseudo-binário chave leve no pseudo-binário chave pesado para o topo e fundo das colunas, nas fases líquida e vapor, conforme recomendado por Kister (1992).

Domingues (2005) mostra que o desvio da eficiência global das colunas, comparando ambos os métodos, é baixo, sugerindo a utilização do modelo já existente no simulador Aspen Plus 2006, que estima a difusividade do chave leve na mistura.

Os resultados, expressos na Tabela 4.5, corroboram a observação de Domingues (2005) e mostra os valores obtidos para as difusividades utilizando-se os dois métodos citados anteriormente, assim como os valores das eficiências calculadas.

Tabela 4.5: Difusividades calculadas para o pseudo-binário chave leve / chave pesado e para o chave leve na mistura, para a fracionadora de butadieno

	Topo (Prato 2)	Fundo (Prato 85)	Média	E_{oc} Garcia* (1999)	E_{oc} Chan e Fair* (1984)	E_{oc} Chan e Fair * CE Klemola (1997b)	E_{oc} O'Connell (1946)
Temperatura (°C)	45,51	63,50					
Pressão (kPa man.)	403,37	512,28					
Y_{LK}	0,9973	0,0176					
X_{LK}	0,9968	0,0147					
Y_{HK}	0,0027	0,9824					
X_{HK}	0,0032	0,9853					
D_L 1,3 butadieno-cis-2-butenos (m2/s)	8,06E-09	9,30E-09	8,68E-09	100,7%	68,1%	101,8%	82,2%
D_G 1,3 butadieno-cis-2-butenos (m2/s)	1,36E-06	1,18E-06	1,27E-06				
D_L 1,3 butadieno-na mistura (m2/s)	8,07E-09	9,39E-09	8,73E-09	100,6%	68,0%	101,6%	82,1%
D_G 1,3 butadieno-na mistura (m2/s)	1,36E-06	1,17E-06	1,26E-06				

* Modelo SRM

4.6.3 Ajuste dos Balanços de Massa

A coluna de butadieno tem operado a mais de 25 anos. Durante este período, a coluna foi submetida a um grande número de testes de capacidade, os quais demonstram que a coluna apresenta uma performance estável de fracionamento em uma larga faixa de operação.

Navaes (2007) apresenta curvas comparativas das eficiências relativas entre pratos valvulados e recheios em função do parâmetro de fluxo (FP), onde é possível verificar o bom desempenho dos pratos valvulados em uma larga faixa de operação.

Estes resultados mostram-se compatíveis com o desempenho de campo da coluna de butadieno. O fato da coluna apresentar um desempenho de fracionamento estável em uma larga faixa de operação permite que se reporte, neste trabalho, uma condição de operação obtida através de repetidos testes de campo, consolidados nas Tabelas do Apêndice A.

Para a realização do teste de campo da coluna de butadieno, os principais instrumentos de medição de vazões, temperaturas e pressões foram calibrados. O erro no

balanço de massa por componente estava $< 5\%$, conforme recomendado por Kister *et al.* (1998 *apud* DOMINGUES, 2005).

Foi possível reduzir os erros do balanço de massa da coluna ajustando-se a vazão de retirada de topo do butadieno produto. Para isto, foi utilizada a medição de nível da esfera de estocagem final do butadieno. O erro estimado entre a medição da produção de butadieno da coluna e da variação de nível da esfera de estocagem final foi de $+ 3,5\%$.

$\% \text{ desvio} = \text{erro relativo no balanço de massa do componente}$

$= \text{vazão mássica do componente } ((\text{carga} - \text{topo} - \text{fundo}) / \text{carga}) \times 100$

$\text{Desvio} = \text{desvio absoluto no balanço de massa do componente}$

$= \text{vazão mássica do componente } (\text{carga} - \text{topo} - \text{fundo}), \text{ em kg/h}$

A Tabela 4.6 mostra o erro no balanço de massa para os chaves leve e pesado conforme critérios adotados acima.

Tabela 4.6: Desvios no balanço de massa por componente da coluna

Componente	Desvios no balanço de massa da coluna	
	desvio %	desvio - kg/h
1,3 butadieno	0,011	1,374
Cis-2-butenos	-0,172	-0,79

De 23/08/2005 às 08:00 hs a 23/08/2005 às 20 hs

4.6.4 Desvios dos Resultados em Relação aos Valores do Testda Coluna

Durante todo trabalho são utilizadas as definições dadas abaixo, apresentadas por Garcia e Fair (2000a *apud* DOMINGUES, 2005), quando se comenta a respeito dos desvios dos resultados dos modelos em relação aos valores experimentais ou de planta:

- a) $\% \text{ desvio} = 100 \cdot (E_{OG} \text{ calculado} - E_{OG} \text{ experimental}) / E_{OG} \text{ calculado}$
- b) $\text{desvio médio} = (\sum \% \text{ desvios}) / \text{número de pontos}$
- c) $\text{desvio médio absoluto} = (\sum \text{ABS} (\% \text{ desvios})) / \text{número de pontos}$

4.6.5 Seqüência do Trabalho

No Capítulo 3, foram apresentadas as correlações de predição da eficiência de ponto (E_{OG}) utilizadas. Não foi intenção esgotar todos os modelos existentes. Uma revisão mais abrangente pode ser encontrada no trabalho de Domingues (2005).

O método empírico de O'Connell (1946) é de fácil e rápida utilização, não necessitando de uma rotina de cálculo complexa e apresenta uma razoável precisão, e pode ser utilizado para avaliar a eficiência da coluna.

Em 1958, o Instituto Americano de Engenharia Química (AIChE) desenvolveu o primeiro método que levou em conta os dados geométricos do prato, vazões internas de líquido e vapor e propriedades físicas dos componentes. Desde então, diversos modelos têm sido propostos, como o modelo clássico de Chan e Fair (1984), de uma nova geração de modelos que levam em conta a hidráulica da dispersão acima do prato de Prado (1986). Prado e Fair (1990) e Garcia (1999) e Garcia e Fair (2000) e Syeda, Afacan e Chuang (2007), até modelos recentes para os pratos *dualflow*, como as modificações propostas por Xu *et al.* (1994) e Garcia e Fair (2002).

No Capítulo 4, mostraram-se as correlações para cálculo de alguns parâmetros importantes que estão inseridos nos modelos de eficiência, como a altura de líquido claro sobre o prato (h_{CL}), fator de inundação do prato (FF), difusividade turbulenta (De), a transformação de eficiência de ponto (E_{OG}) para eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) e desta para eficiência global, sendo antes corrigidas levando em conta os efeitos de arraste de líquido e gotejamento (E_{MV}^a , E_{WI}). Para o caso de pratos valvulados, para h_{CL} , cada autor propõe seu modelo ou indica o melhor modelo a ser utilizado. Para os demais parâmetros, foram

escolhidas aquelas correlações mais utilizadas pelos autores ou que foram desenvolvidas especificamente para pratos valvulados.

Também são abordadas, neste mesmo capítulo, as correlações para estimativa das propriedades físicas, bem como, a avaliação e escolha do modelo termodinâmico que mais representa as condições levantadas no teste da coluna.

No Capítulo 5, é mostrado um resumo, na forma de diagrama de blocos ou de algoritmos, dos modelos de predição da eficiência de ponto apresentados no Capítulo 3 e também dos demais parâmetros apresentados no Capítulo 4, explicando a escolha dos que são utilizados neste trabalho.

5 METODOLOGIA PROPOSTA PARA O CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE COLUNAS

Neste capítulo são apresentados, em forma de diagrama, os métodos e correlações para o cálculo de eficiência abordada no Capítulo 2 e 3 na mesma seqüência em que foram utilizados no programa em Fortran 77, inserido no simulador Aspen Plus 2006 mostrado no Apêndice C. O diagrama tem por objetivo auxiliar o leitor a ter uma visão global da metodologia aplicada.

5.1 DIAGRAMA DE BLOCO PARA PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA GLOBAL

Neste trabalho, comparam-se os resultados das eficiências obtidas pelos modelos propostos por O'Connell (1946), Chan e Fair (1984), Garcia (1999) e pelos métodos modificados de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) pelo uso do comprimento equivalente proposto por Klemola e Ilme (1997b).

Dos modelos acima descritos, o modelo de Chan e Fair destaca-se, pois é largamente utilizado em publicações para efeitos de comparação com outros modelos. O modelo de Chan e Fair é recomendado por vários autores, tais como Bennett *et al.* (1997), Garcia e Fair (2000) e Lockett (1986).

No modelo de Garcia (1999), para o cálculo da altura do líquido claro (h_{CL}), utilizou-se a correlação de Dhulesia (1984) recomendada por Lockett (1986), desenvolvida especificamente para pratos valvulados. Já no caso do modelo de Chan e Fair (1984), utilizou-se a correlação indicada pelos próprios autores, correlação de Bennett *et al.* (1983).

Para o cálculo do fator de inundação, utilizou-se a correlação clássica de Fair (1961 *apud* LOCKETT, 1986), adotando para o cálculo do fator de capacidade a correlação proposta por Kister e Hass (1990 *apud* KISTER, 1999), que permitiu um melhor ajuste do fator de inundação da coluna, quando comparado aos resultados obtidos pelo uso da equação por Treybal (1968 *apud* LOCKETT, 1986).

Para transformar a eficiência de ponto (E_{OG}) em eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), utilizou-se o modelo de mistura do líquido sobre o prato de Lewis – caso 1 (1936).

Para o cálculo da difusividade turbulenta (De), utilizou-se a correlação de Molnar (1974), desenvolvida especificamente para pratos valvulados e recomendada por Lockett (1986).

O arraste de líquido foi estimado com as correlações de Zuiderweg (1982 *apud* DOMINGUES, 2005) e Colburn (1936 *apud* LOCKETT, 1986).

Para a vazão de gotejamento, foi utilizada a correlação de Lockett e Banik (1984 *apud* LOCKETT, 1986). Conforme Lockett (1986), no caso de pratos valvulados, o impacto do gotejamento na eficiência é baixo ou nulo e, portanto, seus efeitos não foram considerados nos resultados deste trabalho.

Por fim, chega-se na estimativa da eficiência global da coluna, utilizando a Equação 2.22.

A Figura 5.1 apresenta os modelos e as correlações, pelo nome do autor, utilizados neste trabalho.

5 Metodologia proposta para o cálculo da eficiência de colunas

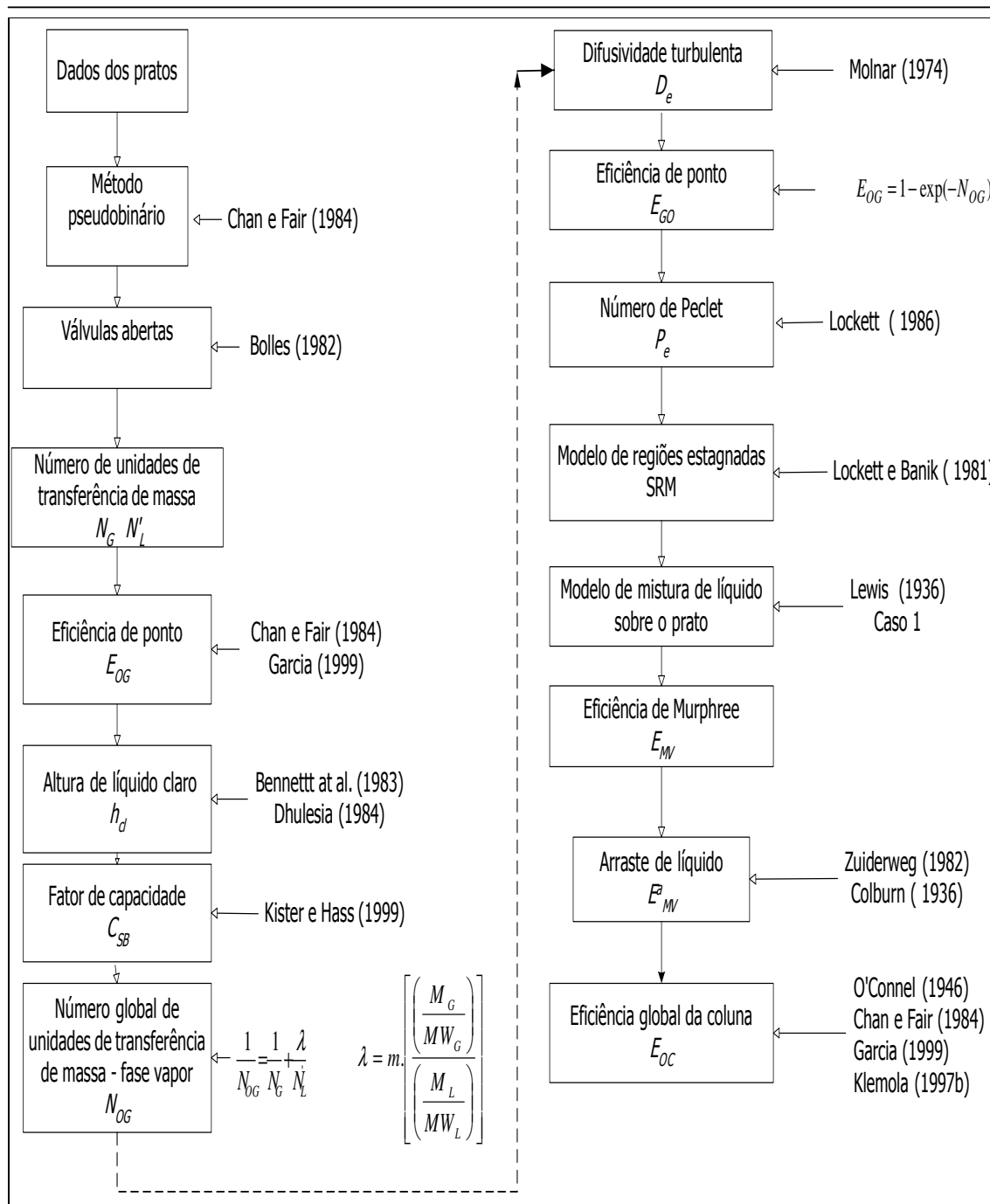


Figura 5.1: Diagrama de blocos do programa em Fortran 77 para predição de E_{OC} .

5.2 ALGORITMO PARA CÁLCULO DA EFICIÊNCIA DE PRATO DE MURPHREE

Os modelos e correlações mostrados nos Capítulos 3 e 4 foram sistematizados no simulador Aspen Plus 2006 para a simulação da coluna industrial de fracionamento de butadieno. Desenvolveu-se um algoritmo iterativo de cálculo da eficiência de prato de Murphree e eficiência global, reunindo todos os modelos e correlações escolhidas, em conjunto com a geometria dos pratos, propriedades físicas e condições operacionais da coluna. O algoritmo foi inserido no simulador Aspen Plus 2006, em programação em Fortran 77, dentro do bloco *flowsheeting options - calculator*, na mesma seqüência e estrutura mostrada no diagrama de blocos da Figura 5.1, permitindo o cálculo da eficiência global da coluna e as composições de topo e fundo para os diversos modelos e correlações.

A Figura 5.2 mostra, de forma simplificada, o algoritmo de cálculo da eficiência de prato de Murphree utilizada no simulador para os modelos propostos por Chan e Fair (1984), Garcia (1999), e para os métodos de Chan e Fair (1984), Garcia (1999) com uso da área equivalente proposto por Klemola e Ilme (1997b).

O simulador calcula prato a prato a eficiência de Murphree e compara a tolerância da vazão molar por componente das correntes entre cada iteração até um valor pré-estabelecido, no caso 0,0001. Segundo a Aspen Technology Inc. (2000), a tolerância, para uma iteração k , é definida como:

$$-Tol \leq \frac{X_{k+1} - X_k}{X_{k+1}} \leq Tol \quad (5.1)$$

Após convergir, a simulação é finalizada e podem-se visualizar os resultados para as composições de topo e fundo da coluna, perfis de temperatura e de eficiência de Murphree e resultados parciais das variáveis dos modelos e correlações.

5 Metodologia proposta para o cálculo da eficiência de colunas

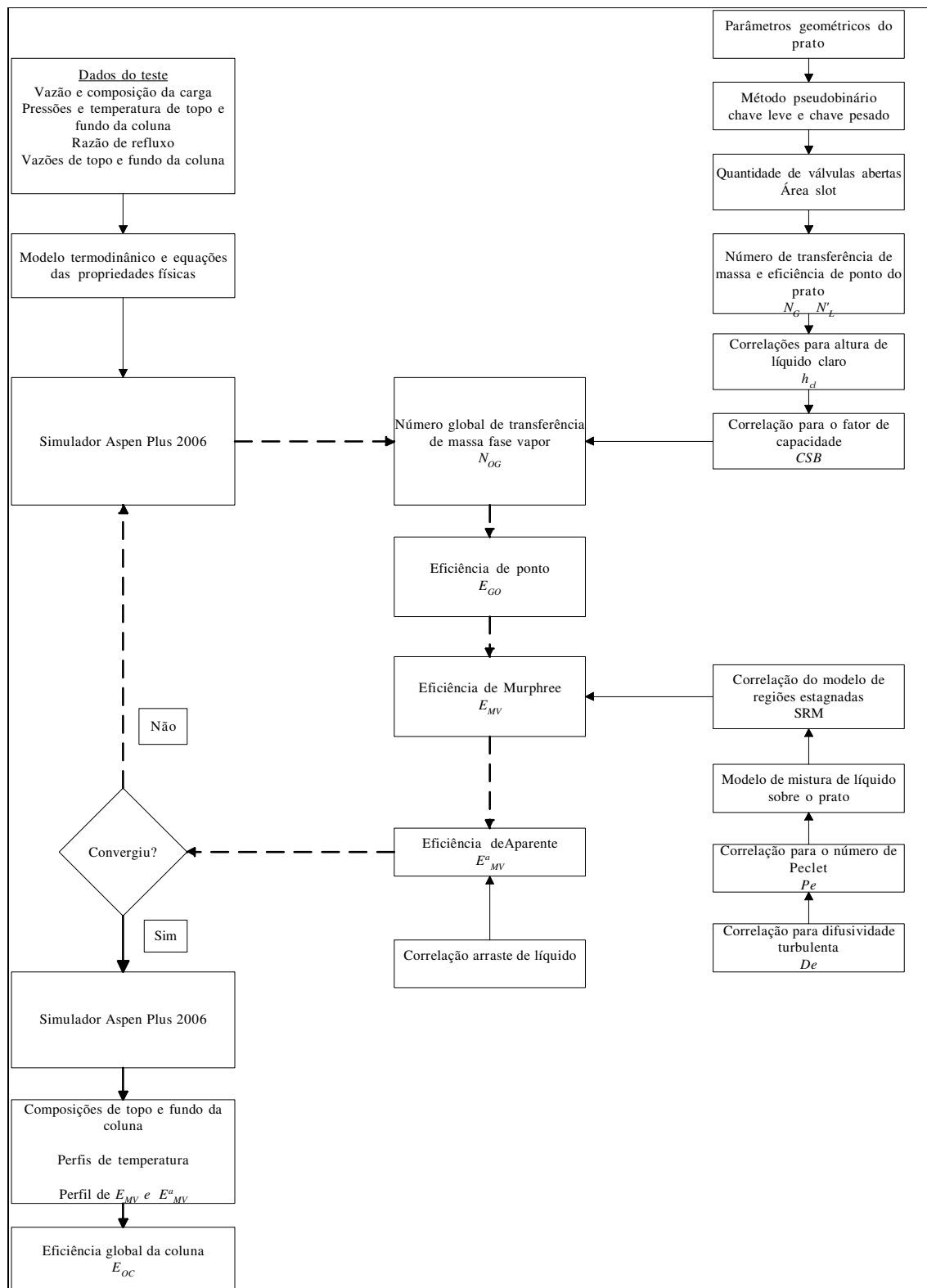


Figura 5.2: Algoritmo para o cálculo da eficiência de prato aparente de Murphree (E_{MV}^a) e eficiência global da coluna (E_{OC}).

5 Metodologia proposta para o cálculo da eficiência de colunas

Os resultados da eficiência global da coluna (E_{OC}) obtida pelo modelo proposto por O'Connell (1946) foram comparados aos resultados de uma variante do modelo utilizando a viscosidade da fase líquida de cada prato para os componentes chave leve e pesado. A Figura 5.3 mostra o algoritmo utilizado.

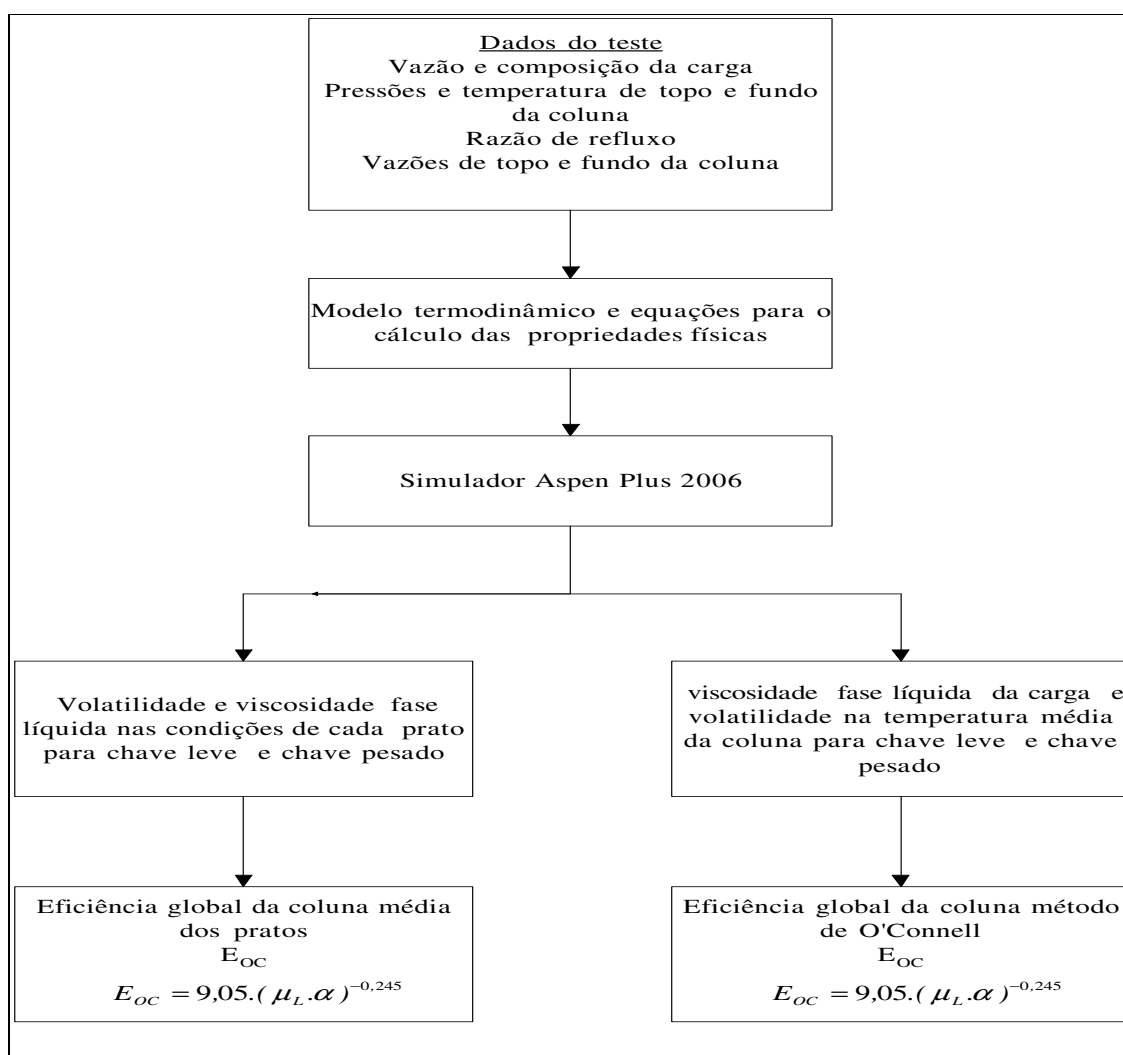


Figura 5.3: Algoritmo para o cálculo da eficiência global da coluna (E_{OC}) de O'Connell.

6 ANÁLISE DOS RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados e analisados os resultados obtidos pela aplicação da metodologia descrita no Capítulo 5, comparando-os com os resultados obtidos nos testes realizados na planta da coluna fracionadora de butadieno com os modelos propostos por O'Connell (1946), Chan e Fair (1984), Garcia (1999) e pelos modelos modificados de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) com o uso do comprimento equivalente (C_E) proposto por Klemola e Ilme (1997b).

Os resultados das eficiências são comparados considerando:

- a) Os modelos originalmente propostos por Chan e Fair (1984) e Garcia (1999).
- b) Os modelos modificados de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) com o uso da C_E proposto por Klemola e Ilme (1997b).
- c) Os modelos propostos com a introdução das correções do modelo *SRM* (*Stagnant Region Model*) desenvolvidas por LIM *et al.* (1974).
- d) Do modelo originalmente proposto por O'Connell com uma variação do próprio modelo aplicado às condições de viscosidade e volatilidade relativa de cada prato.

6.1 A COLUNA AVALIADA

Para a validação dos modelos de predição de eficiência foi utilizada a coluna fracionadora de butadieno.

A coluna foi modelada no simulador Aspen Plus 2006, visando a obtenção da eficiência de Murphree (E_{MV}) que após foi convertida na eficiência global real (E_{OC}), sendo comparada com as eficiências calculadas pelos modelos de predição.

6.1.1 Fluxograma Simplificado de Processo da Coluna Avaliada

A fracionadora de butadieno faz parte de uma planta industrial, localizada no Complexo Petroquímico do RS, sendo utilizada para separar o 1,3 butadieno, presente em alta concentração na carga da coluna (>93% mol) de uma corrente composta por uma mistura de C4s.

O 1,3 butadieno produto é retirado no topo da coluna com uma pureza mínima de 99,5% mol, sendo que, no fundo da coluna é retirada uma corrente composta por cis-2-buteno, trans-2-buteno e uma pequena quantidade de compostos C5+.

O cis-2-buteno é o principal contaminante de topo da fracionadora e seu limite máximo no 1,3 butadieno produto é de 0,5% em volume.

As observações realizadas na operação diária da coluna e o estudo das volatilidades relativas dos componentes da mistura levaram à escolha dos componentes 1,3 butadieno e cis-2-buteno como compostos chave leve e chave pesado, respectivamente.

A Figura 6.1 mostra o fluxograma simplificado da fracionadora de butadieno.

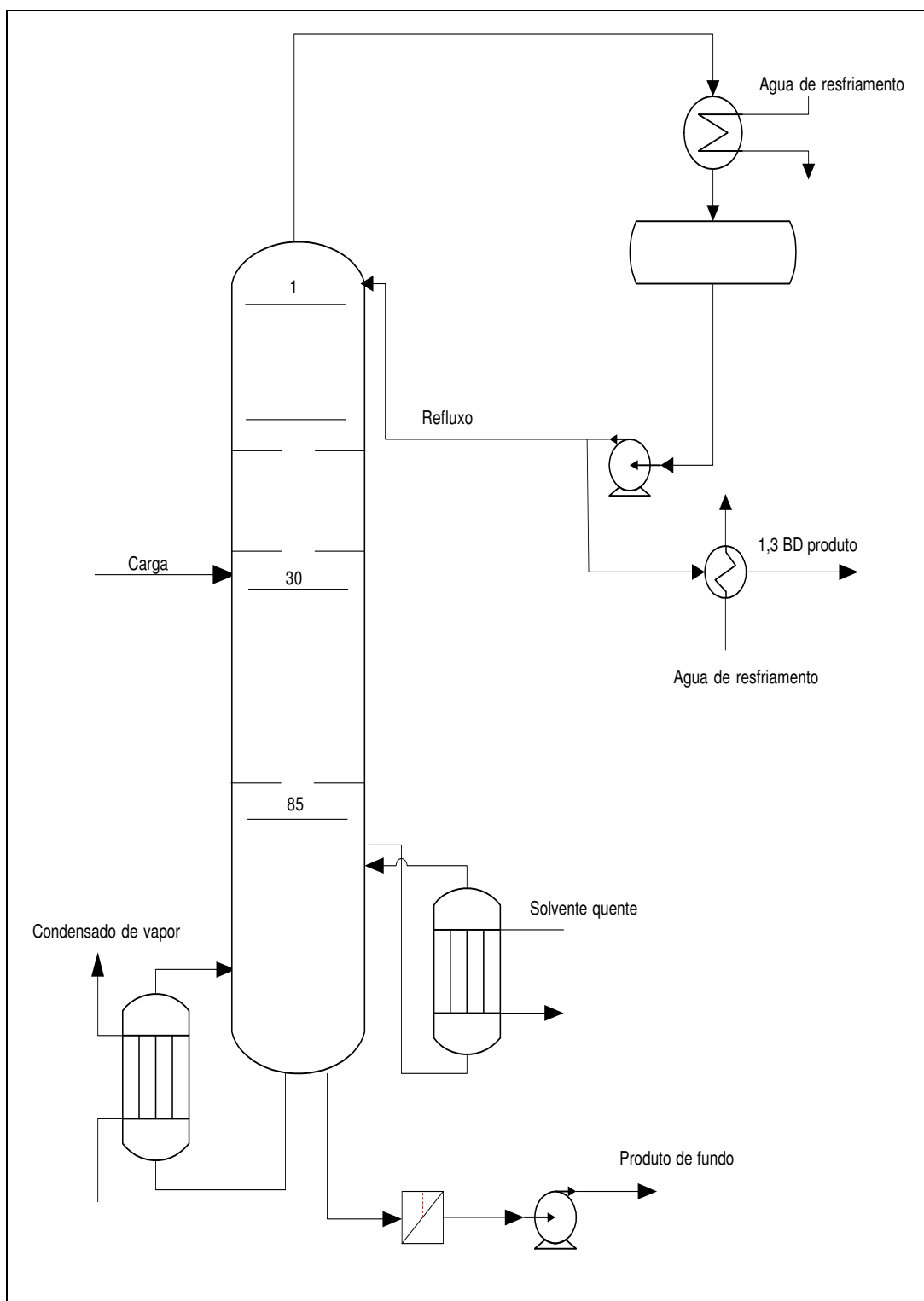


Figura 6.1: Fluxograma da coluna fracionadora de butadieno

As características de projeto da coluna são mostradas na Tabela 6.1

Tabela 6.1: Dados de projeto da coluna

Fracionadora de Butadieno	
Diâmetro, d_C (m)	2,26
Altura (m)	52,5
Nº de pratos	85
Prato de carga	30
Tipo de prato	Valvulado de dois passes tipo V-1 Glitsch
Diâmetro da válvula, d_H (mm)	39 -40
Espaçamento entre pratos, T_S (m)	0,45
Fração perfurada do prato, (%)	7,93
Área ativa, A_A (m ²)	2,98
Altura do vertedouro, h_W (mm)	51
Comprimento do vertedouro lateral, L_W (m)	1,35
Comprimento do vertedouro central, L_W (m)	2,23
Chave leve	1,3 butadieno
Chave pesado	Cis-2-buteno

6.2 EFICIÊNCIAS DE PRATO DE MURPHREE – MODELOS E MODIFICAÇÕES PROPOSTAS

Nesta seção, são apresentados os resultados das eficiências de prato de Murphree (E_{MV}) e da eficiência global da coluna (E_{OC}) usando os modelos originalmente propostos por Chan e Fair (1984) e Garcia (1999), bem como os resultados utilizando os modelos modificados de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) com o uso do comprimento equivalente (C_E) proposto por Klemola e Ilme (1997b).

O cálculo da eficiência de prato de Murphree para pratos de dois passes de fluxo cruzado foi realizado considerando as peculiaridades dos passes pares e ímpares, que possuem geometrias diferentes e são apresentadas como eficiência de prato média da coluna, exceto onde explícita outra consideração.

Para a conversão da eficiência de prato de Murphree da coluna resultante da simulação em eficiência global foi utilizado o modelo de Lewis (1934) – Caso 1.

A vazão de líquido (Q_L) foi ajustada, onde necessário, para os dois passes, dividindo-se a vazão calculada pelo simulador Aspen Plus 2006 por dois.

6.2.1 Modelos de Mistura sobre o Prato e a Eficiência de Prato de Murphree

Conforme abordado na Seção 2.1, a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) representa a variação da composição de um componente no estágio pela variação da composição do mesmo componente que deveria ocorrer considerando o estágio teórico.

Se o vapor e o líquido fossem perfeitamente misturados sobre os pratos, a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) seria igual à eficiência de ponto (E_{OG}). Uma vez que as fases não são perfeitamente misturadas, é necessário utilizar um modelo que represente o escoamento para a mistura de líquido e vapor para converter a eficiência de ponto (E_{OG}) na eficiência de prato de Murphree (E_{MV}).

A existência de um gradiente de concentração do componente no líquido que escoar sobre o prato resulta em um aumento da eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), fazendo com que, em alguns casos, a eficiência exceda a 100%.

Os padrões de mistura de líquido são o escoamento empistonado (*plug flow*), o modelo de zonas estagnadas e o modelo de *backmixing*, onde as gotas de líquido projetadas pelo vapor alteram o perfil de concentração dos componentes na direção horizontal do escoamento sobre o prato, enquanto que, os padrões de escoamento do vapor são o de escoamento empistonado (*plug flow*) e de mistura perfeita. (KISTER, 1992)

O modelo de Lewis, desenvolvido em 1946, ainda é o mais utilizado para a conversão de eficiência de ponto (E_{OG}) na eficiência de prato (E_{MV}).

O simulador Aspen 2006 não admite que a eficiência de Murphree seja maior que 107% para qualquer componente presente na mistura. Uma eficiência de Murphree superior a 107% leva à ausência de vazão de líquido e de vapor sobre os pratos, causando “secamento”

dos pratos ou de seções inteiras da coluna, o que não permite a convergência do programa. Assim, neste trabalho, foram adotadas algumas considerações explicadas na próxima Seção.

6.2.2 Eficiência de Murphree - Modelos de Chan e Fair e Garcia

O cálculo da eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) aplicando-se o modelo de Chan e Fair (1984) resultou em uma eficiência de 104,6% e apresentou um desvio de 21,1% em relação à eficiência da coluna ajustada no simulador. A Tabela 6.2 descreve os resultados, bem como os desvios obtidos nos cálculos.

Tabela 6.2: Eficiência de Murphree

EFICIÊNCIAS DE MURPHREE (E_{MV}) - SEM MODELO SRM					
	Ajuste no simulador	Garcia (1999)*	Chan e Fair (1984)	Chan e Fair (1984) C_E KLEMOLA	Garcia (1999)* C_E KLEMOLA
Eficiência Murphree (%)	86,40%	137,34%	104,64%	91,37%	134,17%
Desvio em relação simulador %		58,96%	21,11%	5,75%	55,29%

* Composições: baseadas no modelo de Chan e Fair devido a limitação do Aspen Plus para eficiências >> que 100%

Nos cálculos da eficiência de prato de Murphree utilizando o modelo de Garcia (1999) e o modelo modificado de Garcia (1999) utilizando C_E proposto por Klemola e Ilme (1997b), os resultados apresentaram eficiências muito superiores a 100%, conforme pode ser visto na Tabela 6.2. Para contornar esta dificuldade, foram adotadas as composições obtidas pelo método de Chan e Fair (1984) para estimar eficiências com o modelo de Garcia (1999).

A adoção das composições dos componentes resultantes do cálculo de eficiência de prato de Murphree (E_{MV}) pelo modelo de Chan e Fair (1984) originou-se do estudo dos resultados da eficiência de Murphree para o modelo de Garcia (1999), utilizando as composições calculadas pelos métodos de Chan e Fair (1984) e O'Connell (1946), onde se constata que não há desvios significativos nos resultados das eficiências de Garcia (1999).

Tabela 6.3: E_{MV} usando modelo de Garcia e as composições de Chan e Fair e O'Connell

E_{MV} DE GARCIA UTILIZANDO				
COMPOSIÇÕES DE CHAN E FAIR E O'CONNELL - SEM MODELO SRM				
	Garcia (1999) Composições do modelo de Chan e Fair	Garcia (1999) Composições do modelo de O'Connell	Garcia (1999) C_E Klemola Composições do modelo de Chan e Fair	Garcia (1999)* C_E Klemola Composições do modelo de O'Connell
E_{MV}	137,34%	133,96%	134,17%	133,36%
Desvio entre os métodos (%)		-2,46%		-0,60%

Dado que os desvios são pequenos, deste ponto em diante, adotou-se o critério de uso das composições geradas pelo modelo de Chan e Fair (1984) para o cálculo das eficiências do modelo de Garcia (1999), onde os resultados são maiores que 100%. A adoção do modelo de Chan e Fair (1984), baseia-se no fato do modelo levar em conta fatores que consideram a hidráulica dos pratos.

Com esta consideração, os resultados das eficiências dos pratos com o uso do modelo de Garcia (1999) apresentaram uma eficiência de prato de 137,3%, com desvio de 60% em relação às eficiências de prato ajustadas no simulador.

A Figura 6.2 ilustra as eficiências de prato de Murphree obtidas para cada prato pelo modelo de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) cabendo destacar que as diferenças entre as eficiências dos pratos pares e ímpares devem-se às diferenças na geometria dos pratos (efeito *dente de serra*).

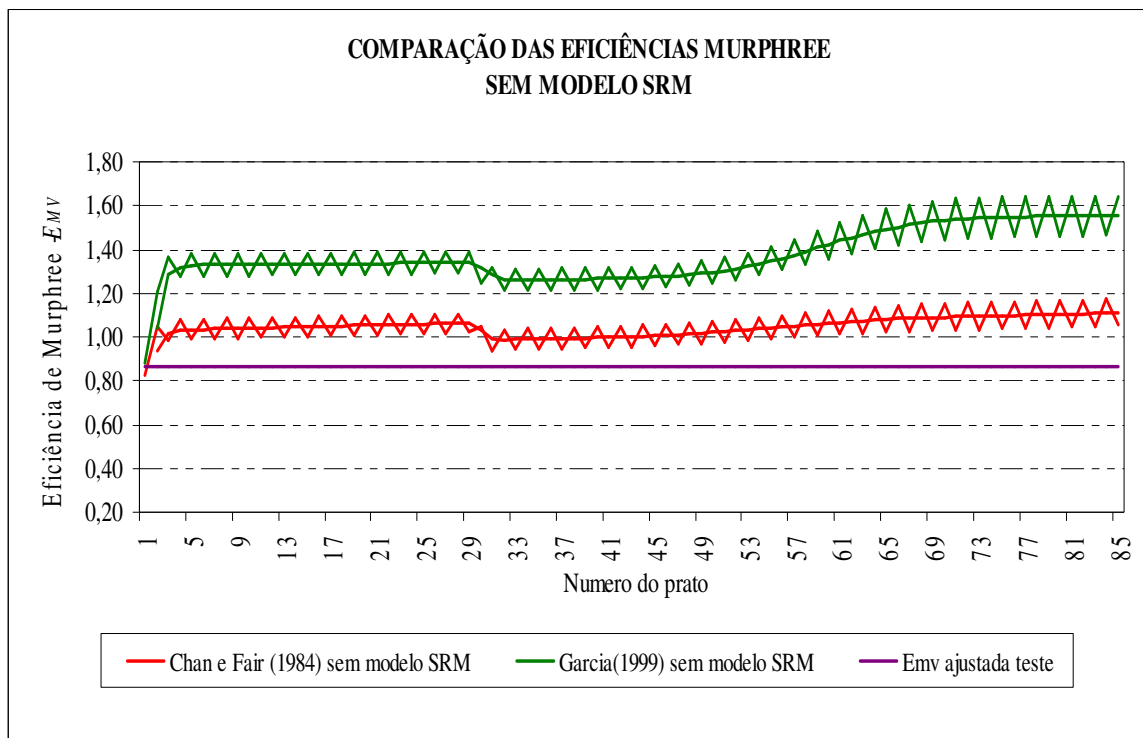


Figura 6.2: Eficiências de Murphree de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) de cada prato

6.2.3 Eficiência de Murphree – Modelos Modificados de Chan e Fair e Garcia Considerando o Comprimento Equivalente Proposto por Klemola e Ilme

Klemola e Ilme (1997b) propuseram a conversão do prato de dois passes para um passe mantendo-se a área ativa ou de borbulhamento (A_A) do prato de dois passes, o que leva a determinação de um novo comprimento do caminho do líquido sobre o prato (C_E), um novo comprimento de vertedouro e de uma nova área dos *downcomers* para o prato de um passe.

Esta transformação faz com que todos os pratos da coluna apresentem uma mesma configuração geométrica, desaparecendo as diferenças de eficiência entre os pratos pares e ímpares (efeito *dente de serra*).

Com a adoção do critério de Klemola e Ilme (1997b), o modelo modificado de Garcia (1999) apresentou, conforme Tabela 6.3, uma eficiência de prato de 134,2 % com desvios em relação às eficiências de prato ajustadas no simulador de 55,3%.

Já o modelo modificado de Chan e Fair (1984) apresentou uma eficiência de prato de 91,4% com um desvio de 5,8% em relação à eficiência ajustada no simulador, conforme Tabela 6.2.

A Figura 6.3 ilustra as eficiências de prato de Murphree obtidas para cada prato pelo modelo de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) com uso de C_E de Klemola e Ilme (1997b). Nota-se que o efeito *dente de serra* não está presente visto que agora os pratos da coluna apresentam uma mesma configuração geométrica.

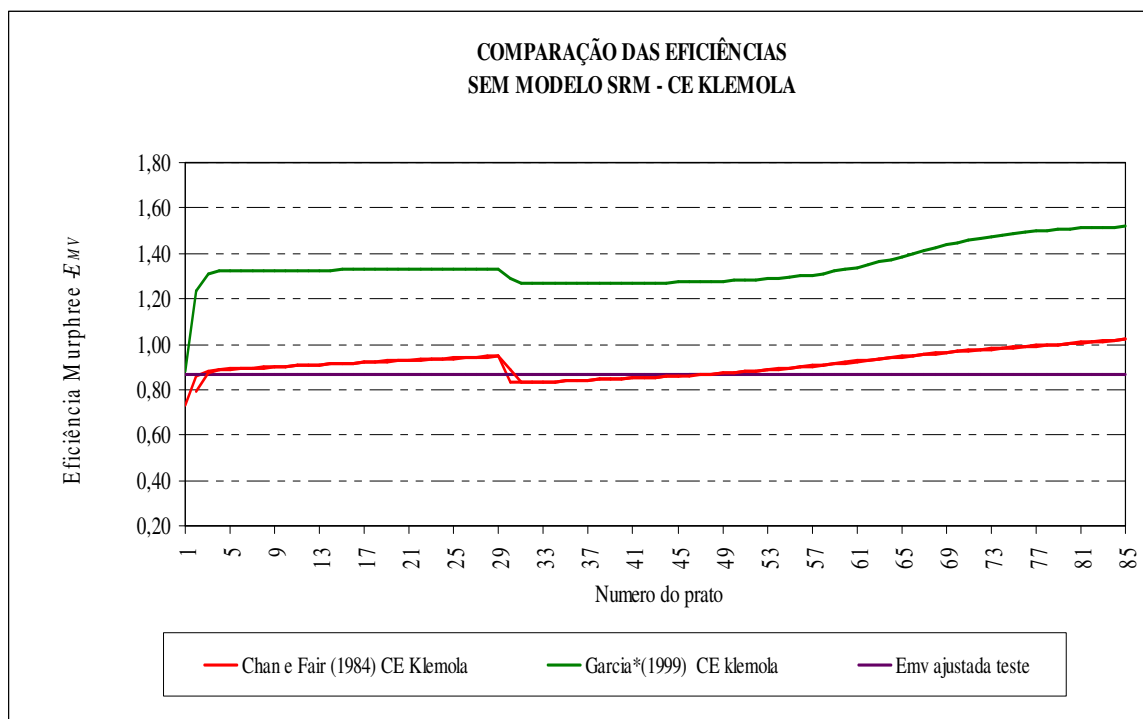


Figura 6.3: Eficiências de prato de Murphree usando o modelo de Chan e Fair e o de Garcia com uso de C_E de Klemola e Ilme de cada prato.

6.3 EFICIÊNCIA GLOBAL DA COLUNA

A eficiência global (E_{OC}) é definida como a razão entre o número de estágios teóricos (N_T), requeridos para uma determinada separação, a uma razão de refluxo especificada, e o número de pratos reais da coluna (N_R), para o mesmo refluxo.

$$E_{OC} = \frac{N_T}{N_R} \quad (6.49)$$

A partir da eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), determinada pelo simulador Aspen Plus 2006, pode-se estimar a eficiência da coluna utilizando a Equação 6.50 desenvolvida por Lewis (1936 *apud* KISTER, 1992).

$$E_{OC} = \frac{\ln[1 + E_{MV} \cdot (\lambda - 1)]}{\ln \lambda} \quad (6.50)$$

Uma vez que o simulador Aspen Plus permite ajustar somente a eficiência de prato de Murphree (E_{MV}), é necessário converter a eficiência de prato de Murphree da coluna testada em eficiência global (E_{OC}), para permitir a comparação com as eficiências globais obtidas pelos diferentes modelos. Isto é feito através do uso da Equação 2.19 que leva em consideração a razão (λ) entre a inclinação da curva de equilíbrio e a curva de operação (m) para cada prato, conforme a Equação 2.20.

6.3.1 Eficiência de Global – Resultados

Os resultados da eficiência de prato de Murphree foram convertidos em eficiência de prato aparente (E_{MV}^a) e, após, em eficiência global (E_{OC}) da coluna.

A eficiência aparente (E_{MV}^a) foi calculada pela equação de Colburn (1936) considerando o arraste de líquido para o prato superior (*spray entrainment*) pelo método de Zuiderweg (1982).

A Tabela 6.4 mostra os resultados das composições de topo e fundo e eficiências globais (E_{OC}) da fracionadora de butadieno estudada.

Tabela 6.4: Composições de topo e fundo e eficiências globais (E_{OC}) da fracionadora de butadieno

EFICIÊNCIAS GLOBAIS (E_{OC}) CALCULADAS SEM UTILIZAÇÃO DO MODELO SRM								
	Planta	Ajuste no simulador	Garcia (1999)*	Chan e Fair (1984)	Chan e Fair (1984) CE KLEMOLA	Garcia (1999)* CE KLEMOLA	O'Connell (1946) para os pratos	O'Connell (1946)
Composição de topo (% mol)								
1,3 Butadieno	99,62%	99,64%	99,67%	99,67%	99,66%	99,66%	99,61%	99,64%
Cis-2-buteno	0,30%	0,27%	0,22%	0,22%	0,25%	0,25%	0,31%	0,27%
Composição de fundo (% mol)								
1,3 Butadieno	0,90%	0,93%	0,07%	0,07%	0,49%	0,49%	1,72%	0,94%
Cis-2-buteno	74,92%	76,33%	77,65%	77,65%	76,85%	76,85%	75,53%	76,34%
Eficiência global (%)		86,20%	135,69%	104,31%	90,65%	133,95%	79,80%	82,12%
Desvio em relação simulador (%)			57,41%	21,01%	5,16%	55,39%	-7,42%	-4,73%

* Composições: baseadas no modelo de Chan e Fair devido a limitação do Aspen Plus para eficiências >> que 100%

Os resultados da Tabela 6.4 indicam que os modelos modificados de Chan e Fair (1984) com uso do comprimento equivalente (C_E) recomendada por Klemola e Ilme (1997b) e o modelo proposto por O'Connell (1946) são os que melhor ajustam as eficiências globais (E_{OC}) quando comparadas à eficiência global do teste de campo da coluna ajustada pelo simulador, considerando a composição dos componentes chaves tanto de topo quanto de fundo. Cabe ressaltar que o modelo de O'Connell se revelou superior aos demais, apresentando desvios menores na composição dos chaves leve e pesado, em relação ao modelo ajustado.

6.3.2 Eficiência Global – Correlação de O'Connell

A correlação de O'Connell (1946) é um método empírico para o cálculo da eficiência global da coluna (E_{OC}) que vem sendo usado como padrão na indústria durante décadas.

Possui razoável precisão, boa confiabilidade e simplicidade e, para os pratos perfurados e valvulados, as predições são levemente conservativas (KISTER, 1992).

Dado que a correlação de O'Connel não leva em conta os fatores hidráulicos dos pratos, nenhuma informação é obtida em relação aos mecanismos de troca de calor e massa, pouco agrega no entendimento dos fatores chave dos projetos de pratos e pouco ou nada contribui para o desenvolvimento de novos modelos.

Neste trabalho, a correlação de O'Connell apresentou o melhor ajuste na predição das composições de topo e fundo do chave leve e pesado em relação aos demais modelos.

Em relação ao resultado da eficiência global da coluna (E_{OC}), mostrou-se levemente conservativa, apresentando um resultado de 82,1% contra 86,2% em comparação à eficiência ajustada no simulador, o que leva a um desvio de -4,75%, confirmando a predição de Kister (1992).

Na Tabela 6.4, também pode-se encontrar, na penúltima coluna, os resultados da correlação de O'Connell aplicada às condições de viscosidade e volatilidade relativa de cada prato.

Embora a eficiência global (E_{OC}) calculada pela correlação de O'Connell utilizando os parâmetros do prato (79,8%), em relação à eficiência global ajustada no simulador (86,20%), apresente um desvio de -7,4%, sendo o desvio, portanto, aceitável, o ajuste da composição de fundo da coluna apresenta um desvio de + 84% para o 1,3 butadieno, resultando em um ajuste inferior ao da aplicação da correlação de O'Connell recomendada por Lockett (1986) para pratos valvulados.

A Figura 6.4 mostra a comparação das eficiências globais (E_{OC}) calculadas pelos diversos modelos em relação à eficiência global ajustada no simulador para a fracionadora de butadieno. Foram admitidas linhas de variação de $\pm 10\%$, que se mostra um desvio aceitável quando do projeto dos números de prato de uma coluna.

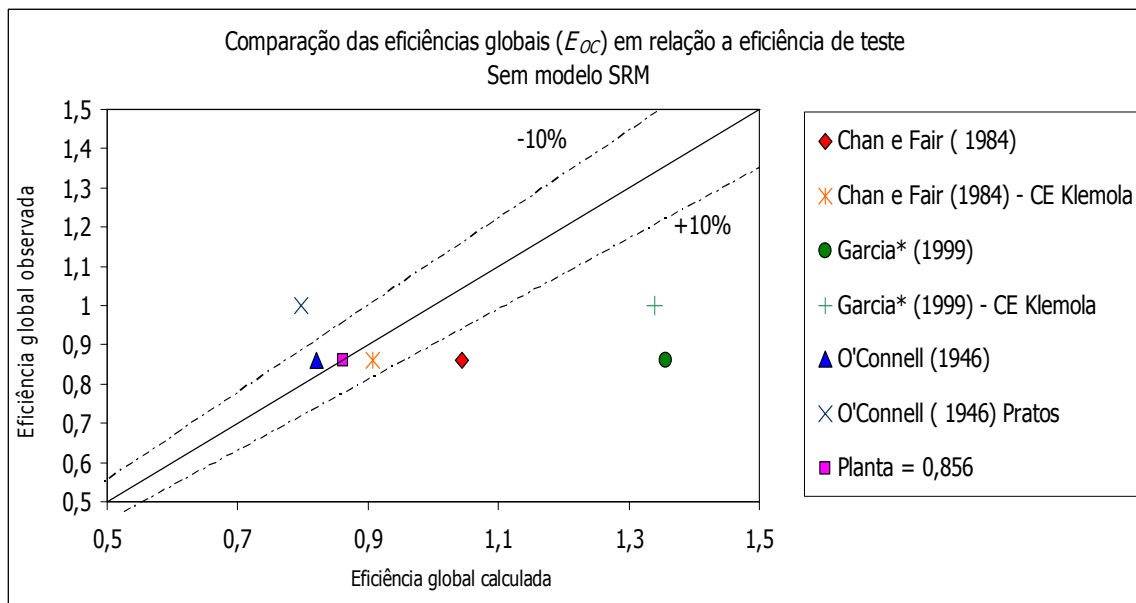


Figura 6.4: Comparação das eficiências globais previstas (E_{OC}) em relação à eficiência global ajustada no simulador para a fracionadora de butadieno – sem o modelo SRM.

Verifica-se na Figura 6.4 que a eficiência global (E_{OC}) calculada pelo modelo modificado de Chan e Fair (1984) com uso do comprimento equivalente (C_E) recomendada por Klemola e Ilme (1997b) e pela correlação proposta por O'Connell (1946) apresentam os menores desvios.

A eficiência global calculada pelo modelo de Chan e Fair (1984) mostrou-se não conservativa apresentando um desvio positivo de 21,0% em relação à eficiência ajustada.

Os resultados das eficiências globais (E_{OC}) com o uso do modelo de Garcia (1999) e Garcia modificado apresentam um desvio em relação à eficiência ajustada de 57,4% e 55,4% respectivamente, superestimando os valores das eficiências e desaconselhando o uso destes métodos para o cálculo da eficiência global de pratos de duplo passe de fluxo cruzado.

6.4 EFICIÊNCIAS DE PRATO DE MURPHREE – MODELOS PROPOSTOS AJUSTADOS PELO MÉTODO DAS REGIÕES ESTAGNADAS

Nesta seção, são apresentados os resultados das eficiências de prato de Murphree (E_{MV}) e da eficiência global da coluna (E_{OC}) com o uso dos modelos propostos ajustados pelo modelo de regiões estagnadas - *Stagnant Region Model* (SRM).

Como a correlação de O'Connell (1946) não leva em conta parâmetros hidráulicos do prato, mas somente a volatilidade relativa (α) do pseudo-binário e a viscosidade (μ_L) da carga da coluna tomados na média aritmética da temperatura no topo e no fundo da coluna, não cabe a utilização do modelo SRM para esta correlação.

A Tabela 6.5 apresenta os parâmetros geométricos dos pratos que foram utilizados nos modelos considerados para os cálculos das eficiências da coluna.

Deve-se destacar que, apesar dos parâmetros geométricos dos pratos pares e ímpares utilizados nos cálculos com o modelo SRM serem iguais, a diferença entre eles está na menor área disponível para a troca de calor e massa do prato par.

Tabela 6.5: Parâmetros geométricos dos pratos utilizados para os cálculos das eficiências da coluna.

	Fracionadora de butadieno projeto	Garcia (1999) SRM	Chan e Fair (1984) SRM	Garcia (1999) sem SRM	Chan e Fair (1984) sem SRM
Tipo de prato	Valvulado 2 passes				
Prato ímpar - escoamento central para lateral					
Comprimento do downcomer central, m	2,250	?	?	?	?
Comprimento do downcomer lateral, m	1,350	?	?	?	?
Comprimento do caminho do líquido, m	0,785	?	?	?	?
Prato par - escoamento lateral para central					
Comprimento do downcomer lateral, m	1,350	?	?	?	?
Comprimento do downcomer central, m	2,250	2,25*	2,25*	2,250	2,250
Comprimento do caminho do líquido, m	0,785	?	?	?	?
Prato equivalente					
Comprimento do downcomer central - CE equivalente Klemola, m					
Comprimento do downcomer lateral - CE equivalente Klemola, m					
Comprimento do caminho do líquido, m					

* Comprimento do downcomer central apresenta um bom ajuste para Lambda e "m" do projeto

6.4.1 Eficiência de Prato de Murphree - Modelos de Chan e Fair e de Garcia com Uso do Modelo SRM para os Pratos Pares

Nos pratos de fluxo cruzado de duplo passe, o líquido emerge do *downcomer* em uma seção divergente quando escoar do *downcomer* lateral para o *downcomer* central, o que provoca severas canalizações. Este fato causa uma redução da eficiência pelo escoamento inadequado do líquido sobre o prato.

Na coluna avaliada, somente nos pratos pares o líquido emerge do *downcomer* em uma seção divergente e, portanto, o modelo *SRM* só é aplicado a estes pratos.

O cálculo da eficiência dos pratos pares considera o comprimento do *downcomer* central modificado pelo modelo *SRM*, enquanto que para o cálculo dos pratos ímpares foi considerado o comprimento de projeto do *downcomer* lateral, fornecido pelo fabricante do prato.

Com a finalidade de comparar os resultados das eficiências de prato de Murphree (E_{MV}) obtida usando os modelos de Chan e Fair (1984), de Garcia (1999) e pelos métodos modificados de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) com a utilização do conceito de comprimento equivalente proposto por Klemola e Ilme (1997b), foram calculadas as eficiências com o uso do modelo *SRM* (*Stagnant Region Model*).

Da mesma forma que na Seção 6.2.2, nos cálculos da eficiência de Murphree utilizando o modelo de Garcia (1999) e o modelo modificado de Garcia (1999) utilizando C_E proposto por Klemola e Ilme (1997b) aplicando *SRM*, foram adotadas as composições obtidas pelo método de Chan e Fair (1984) para estimar eficiências segundo o modelo de Garcia (1999), quando os resultados apresentaram desvios superiores a 107%.

A Tabela 6.6 mostra os desvios da eficiência de prato de Murphree com uso do modelo *SRM* para o modelo de Garcia (1999), utilizando as composições calculadas pelos métodos de Chan e Fair (1984) e O'Connell (1946), onde se constata, novamente, que não há desvios significativos nos resultados das eficiências de Garcia (1999).

Os resultados dos cálculos da eficiência de Murphree para pratos de dois passes de fluxo cruzado com *downcomer* levam em consideração as peculiaridades dos pratos pares e

ímpares, que possuem geometrias diferentes e são apresentadas como eficiência de prato média da coluna, exceto onde explícita outra consideração.

Tabela 6.6: E_{MV} com o modelo de Garcia utilizando as composições de Chan e Fair e O'Connell e uso do *SRM*

E_{MV} DE GARCIA UTILIZANDO				
COMPOSIÇÕES DE CHAN E FAIR E O'CONNELL - COM MODELO SRM				
	Garcia (1999) Composições do modelo de Chan e Fair	Garcia (1999) Composições do modelo de O'Connell	Garcia (1999) A_E Klemola Composições do modelo de Chan e Fair	Garcia (1999)* A_E Klemola Composições do modelo de O'Connell
E_{MV}	113,75%	113,14%	108,52%	106,47%
Desvio entre os métodos (%)		-0,53%		-1,89%

A Tabela 6.7 apresenta os resultados das eficiências de prato de Murphree (E_{MV}) para os modelos considerados utilizando a correção das zonas estagnadas pelo método *SRM* para os pratos pares, bem como os desvios obtidos pelos cálculos.

Tabela 6.7: Eficiência de Murphree utilizando o modelo *SRM*

EFICIÊNCIAS DE MURPHREE (E_{MV}) - MODELO SRM					
	Ajuste no simulador	Garcia (1999)	Chan e Fair (1984)	Chan e Fair (1984) C_E KLEMOLA	Garcia (1999)* C_E KLEMOLA
Eficiência Murphree (%)	86,40%	113,75%	96,16%	75,30%	108,52%
Desvio em relação simulador %		31,65%	11,29%	-12,85%	25,60%

* Composições: baseadas no modelo de Chan e Fair devido a limitação do Aspen Plus para eficiências >> que 100%

Os resultados da Tabela 6.7 mostram que os desvios das eficiências de Murphree calculadas utilizando o método *SRM* nos pratos pares diminuíram consideravelmente quando comparados às eficiências calculadas sem levar em consideração a correção das regiões estagnadas (ver Tabela 6.3).

As eficiências calculadas com o modelo de Garcia (1999) e com o modelo modificado de Garcia (1999) que considera a comprimento equivalente (C_E) proposto por Klemola e Ilme (1997b) com uso do modelo *SRM* – 113,75% e 108,52% respectivamente; reduziram seus desvios em relação à eficiência de prato de Murphree ajustada pelo simulador

quando comparadas às mesmas eficiências sem o uso do modelo *SRM*. Ainda assim, os resultados superestimam o valor das eficiências.

Os resultados com o modelo de Chan e Fair (1984) mostram que o desvio da eficiência de prato de Murphree calculada utilizando o método *SRM* também se reduziu, quando comparada à eficiência calculada sem levar em conta a correção das regiões estagnadas. Da mesma forma que com o modelo de Garcia (1999), o resultado superestima o valor da eficiência, embora de forma consideravelmente menor (ver Tabela 6.3).

O emprego do modelo modificado de Chan e Fair (1984) considerando o comprimento equivalente proposto por Klemola e Ilme (1997b) com o uso do modelo *SRM* resultou em uma eficiência de prato de Murphree de 75,3%, com um desvio em relação à eficiência ajustada de -12,9%, subestimando o valor da eficiência..

A Figura 6.5 ilustra as eficiências de Murphree obtidas para cada prato pelo modelo de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) com o uso do modelo *SRM*.

As eficiências calculadas pelo modelo de Garcia (1999) com o uso do *SRM* apresentam uma diferença maior entre as eficiências dos pratos pares quando comparados aos resultados do mesmo modelo sem uso do *SRM*. Essas diferenças são explicadas pela formação de regiões estagnadas nos pratos pares, que tem o escoamento do líquido da lateral para o centro, o que reduz a eficiência destes pratos.

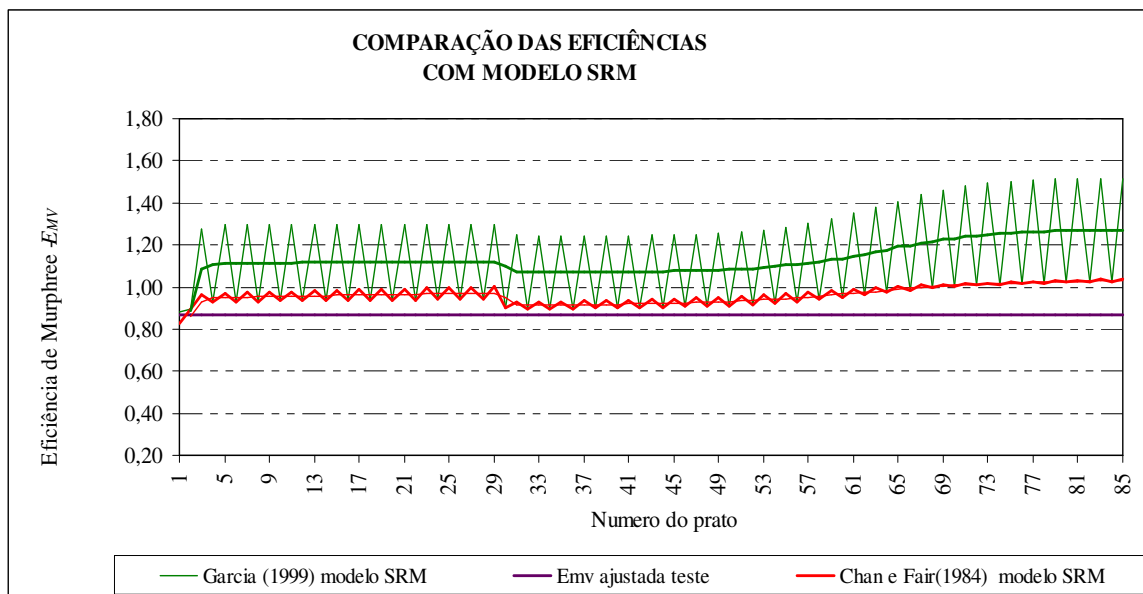


Figura 6.5: Eficiências de prato de Murphree usando o modelo de Chan e Fair e o de Garcia com uso do modelo *SRM*.

A Figura 6.6 ilustra as eficiências de Murphree obtidas para cada prato pelo modelo de Chan e Fair (1984) e o de Garcia (1999) com uso de C_E de Klemola e Ilme (1997b) conjuntamente com o modelo *SRM*. O efeito *dente de serra* não está presente visto que agora os pratos da coluna apresentam uma mesma configuração geométrica.

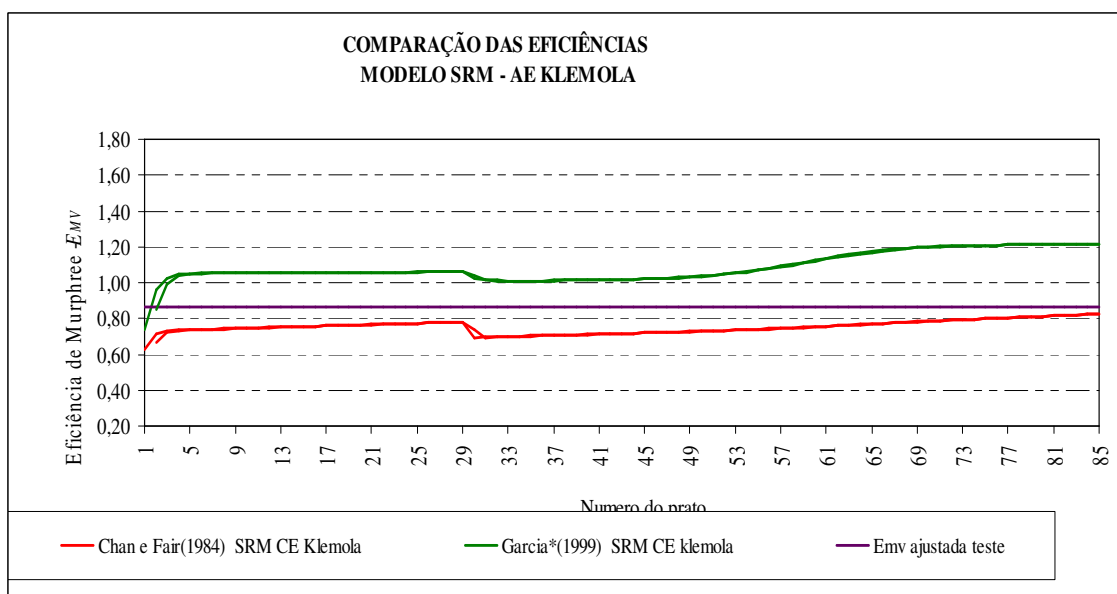


Figura 6.6: Eficiências de prato de Murphree usando o modelo de Chan e Fair e o de Garcia com uso de C_E de Klemola e Ilme e do modelo *SRM*.

6.5 EFICIÊNCIAS GLOBAIS DA COLUNA – MODELOS PROPOSTOS COM USO DO MODELO SRM

Para prato de grande diâmetro, a eficiência de prato de Murphree pode ser calculada por:

$$\left[\frac{E_{MV}}{E_{OG}} \right]_L = \frac{A_I}{A_A} \left[\frac{E_{MVI}}{E_{OG}} \right] \quad (6.51)$$

onde A_I é a área da Região I do prato e A_A é a área de borbulhamento do prato.

Para o cálculo da eficiência de prato de Murphree modificada (E_{MVI}), Porter *et al.* (1972) sugerem o uso dos modelos de mistura de líquido sobre o prato de Lewis (1936) com correções para o cálculo do número de *Peclet* e do *lambda* (λ).

Os resultados da eficiência de prato de Murphree modificada (E_{MVI}) foram convertidos em eficiência de prato aparente (E_{MV}^a) e, após, em eficiência global (E_{OC}) da coluna, conforme Equação 6.50.

Na Tabela 6.8 são apresentados os resultados das composições de topo e fundo e eficiências globais (E_{OC}) para a coluna testada.

Tabela 6.8: Composições de topo e fundo e eficiências globais (E_{OC}) da coluna testada

EFICIÊNCIAS GLOBAIS (E_{OC}) CALCULADAS UTILIZANDO MODELO SRM								
	Planta	Ajuste no simulador	Garcia (1999)	Chan e Fair (1984)	Chan e Fair (1984) CE KLEMOLA	Garcia (1999)* CE KLEMOLA	O'Connell (1946) para os pratos	O'Connell (1946)
Composição de topo (%)								
1,3 Butadieno	99,62%	99,64%	99,67%	99,67%	99,57%	99,68%	99,61%	99,64%
Cis-2-buteno	0,30%	0,27%	0,23%	0,23%	0,34%	0,21%	0,31%	0,27%
Composição de fundo (%)								
1,3 Butadieno	0,90%	0,93%	0,25%	0,25%	2,58%	0,04%	1,72%	0,94%
Cis-2-buteno	74,92%	76,33%	77,21%	77,21%	74,68%	77,74%	75,53%	76,34%
Efficiencia global (%)		86,20%	113,52%	95,59%	74,49%	107,53%	79,80%	82,12%
Desvio em relação simulador (%)			31,69%	10,90%	-13,59%	24,75%	-7,42%	-4,73%

* Composições: baseadas no modelo de Chan e Fair devido a limitação do Aspen Plus para eficiencias >> que 100%

Os resultados da Tabela 6.8 mostram que os desvios das eficiências globais (E_{OC}) diminuíram consideravelmente quando comparados aos das eficiências calculadas sem levar em consideração a correção das regiões estagnadas (Tabela 6.3), consistente com os resultados obtidos nos cálculos das eficiências de prato de Murphree utilizando o método *SRM*.

Conforme a Tabela 6.8, os resultados usando os modelos de Garcia (1999) e Chan e Fair (1984) com uso do *SRM* mostram predições consistente das composições de topo, embora apresentem um desvio maior nas composições do chave leve (1,3 butadieno) no fundo, 0,9% nos resultados do teste ajustado pelo simulador, contra 0,25% calculado pelos modelos de Garcia (1999) e Chan e Fair (1984). Estes desvios são maiores que os apresentados pelo modelo de O'Connell (1946) de 0,94%.

Os resultados calculados pelo modelo de Garcia (1999) e pelo modelo de Chan e Fair (1984) com uso do *SRM* ainda superestimam o valor das eficiências globais (E_{OC}), embora de forma consideravelmente menor do que quando sem o *SRM*.

Os modelos modificados de Chan e Fair (1984) e Garcia (1999) pelo uso de C_E e do modelo *SRM* não apresentaram ajustes aceitáveis para a composição do 1,3 butadieno de fundo da coluna, o que invalida o uso dos mesmos para o cálculo da eficiência global (E_{OC}) da coluna testada.

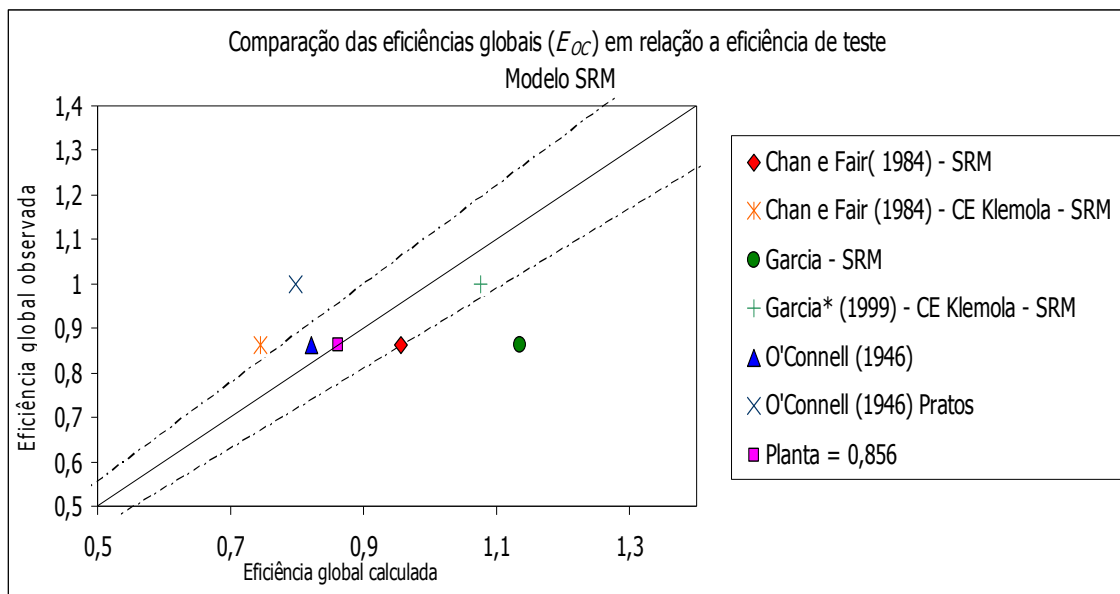


Figura 6.7: Comparação das eficiências globais (E_{OC}) em relação à eficiência global ajustada no simulador para a coluna testada – uso do modelo *SRM*

Através da Figura 6.7, verifica-se que os valores da eficiência global da coluna (E_{OC}) calculada pelo modelo de Chan e Fair (1984) com uso do *SRM* e pela correlação de O'Connell (1946) apresentam os menores desvios.

A eficiência global calculada pelo modelo de Chan e Fair (1984) com modelo *SRM* mostrou-se não-conservativa apresentando um desvio positivo de 10,9 % em relação à eficiência ajustada.

Os resultados das eficiências globais da coluna (E_{OC}), obtidas com o modelo de Garcia (1999) e Garcia modificado com uso do *SRM* mostraram-se mais ajustados do que os calculados pelos mesmos modelos sem o uso do *SRM*, apresentando um desvio em relação à eficiência global ajustada de 31,7% e 24,5%, respectivamente, o que superestima os valores dessas eficiências, desaconselhando o uso destes métodos para o cálculo da eficiência global de pratos de duplo passe de fluxo cruzado.

6.6 MODELOS DE GARCIA – PREDIÇÃO DA EFICIÊNCIA DE PONTO

Nesta seção são analisados os resultados da predição da eficiência de ponto (E_{OG}) de Garcia (1999) e comparados com os resultados das predições da eficiência de ponto (E_{OG}) dos modelos de Chan e Fair (1984) com o uso do C_E de Klemola e Ilme (1997b) e com o modelo de Chan e Fair (1984) com o uso do modelo *SRM* para os pratos pares e suas influências nas eficiências de prato de Murphree (E_{MV}) e na eficiência global da coluna (E_{OC}).

A Tabela 6.9 mostra que os valores da eficiência de ponto e a eficiência global da coluna (E_{OC}), sem o uso de modelo de mistura de líquido sobre o prato, calculadas pelo modelo de Garcia (1999) e Garcia (1999) com o uso do C_E de Klemola e Ilme (1997b) são praticamente iguais à eficiência global (E_{OC}) da coluna testada, indicando que o modelo de Garcia (1999) superestima a eficiência de ponto (E_{OG}).

Tabela 6.9: Comparação das eficiências calculadas pelo modelo de Garcia (1999) com as eficiências calculadas pelo modelo de Chan e Fair (1984) e Chan e Fair (1984) modificado

	Eficiência global da coluna ajustada	Chan e Fair (1984)	Chan e Fair (1984) C_E KLEMOLA	Chan e Fair (1984) SRM	Garcia (1999)*	Garcia(1999)* C_E KLEMOLA
Tipo de prato	Valvulado 2 passes fluxo cruzado					
Eficiência global da coluna de teste ajustada	0,8620					
Eficiência de ponto (EOG)		0,7717	0,6525	0,7746	0,8643	0,8622
Desvio entre EOG modelo de Garcia e EOG modelo de Chan e Fair %		12,0	32,5	11,6		
Eficiência global da coluna - sem modelo de mistura de líquido		0,7164	0,6483	0,7258	0,8590	0,8562
Desvio entre EOC sem o uso de modelo de mistura sobre o prato e EOC de teste ajustada %		-16,9	-24,8	-15,8	-0,3	-0,7
Eficiência de prato de Murphree		1,0722	0,8787	0,9134	1,2519	1,2849
Desvio entre EMV modelo de Garcia e EMV modelo de Chan e Fair %		16,8	42,5	37,1		
Eficiência global da coluna		1,0431	0,9065	0,9559	1,3569	1,3395
Desvio entre EOC e EOC de teste ajustada %		21,0	5,2	10,9	57,4	55,4

* Composições: baseadas no modelo de Chan e Fair devido a limitação do Aspen Plus para eficiências >> que 100%

Segundo Syeda *et al.* (2007), o modelo de Garcia e Fair (2000b) falha na identificação da distribuição bimodal do tamanho de bolhas na região de espuma, o que

mostra o caráter arbitrário da expressão utilizada no modelo para a fração de bolhas pequenas (*FSB*). Esta mesma expressão foi utilizada no modelo de Garcia (1999).

Os mesmos autores mostram que estas discrepâncias são resultados da natureza altamente empírica do modelo de Garcia e Fair (2000b), pois envolve um grande número de equações e, pelo menos, quatro parâmetros de ajustes: os fatores ϕ e k de correção da difusividade efetiva do líquido e do gás; fração de bolhas pequenas na espuma, *AJ*, e a fração de furos que estão inativos, *FLC*.

Quando é comparado o valor da eficiência de ponto (E_{OG}) de Garcia (1999) com os resultados das eficiências calculadas pelos modelos de Chan e Fair (1984), de Chan e Fair (1984) com o uso do C_E de Klemola e Ilme (1997b) e com o modelo de Chan e Fair (1984) com o uso do modelo *SRM* para os pratos pares verifica-se um desvio de 12, 32,5 e 11,6 %, respectivamente.

Por fim, os valores das eficiências de ponto (E_{OG}) calculadas pelo modelo de Garcia (1999) e de Garcia (1999) com o uso do C_E de Klemola e Ilme (1997b) levam a desvios na eficiência global da coluna (E_{OC}) de 57,4 e 55,4 %, respectivamente, quando comparada com à eficiência global ajustada do teste.

7 CONCLUSÕES

A transferência simultânea de calor e massa combinada com a complexa hidráulica de fluido em duas fases faz da destilação um vasto campo para análises de seus fundamentos. A destilação tornou-se uma operação bem estabelecida muito antes que as modernas teorias de transferência de massa fossem consolidadas. Por isso, a tendência comum da maioria das pesquisas em destilação ainda mantém sua natureza empírica, semi-empírica ou mecanicista. É neste cenário que foram obtidas as conclusões deste trabalho.

A correlação de O'Connell (1946) apresentou um bom ajuste da eficiência global da coluna (E_{OC}), o que corrobora sua adoção como padrão na indústria ainda hoje.

Uma vez que a correlação não leva em conta os fatores hidráulicos dos pratos, nenhuma informação é obtida em relação aos fenômenos que ocorrem na transferência de massa nos pratos e pouco agrega no entendimento dos fatores-chaves dos atuais projetos de pratos e pouco ou nada contribui para o desenvolvimento de novos modelos.

O modelo de Chan e Fair (1984) apresentou desvios nas eficiências de prato de Murphree dentro dos limites previstos pelos próprios autores do método.

A introdução do modelo *SRM* (*stagnant regions model*) ao modelo de Chan e Fair (1984) conduziu a menores desvios, quando comparado ao modelo de Chan e Fair (1984), mas os resultados ainda superestimaram os valores das eficiências de prato de Murphree.

O modelo de Chan e Fair (1984) associado ao modelo proposto de Klemola e Ilme (1997b) referente à conversão do prato de dois passes para prato de um passe, mantendo-se a área ativa ou de borbulhamento (A_A) do prato de dois passes, representou de forma adequada a eficiência de prato da coluna estudada, validando o uso deste modelo como uma alternativa de rápida e fácil implementação.

O modelo de Garcia (1999) com e sem o uso do modelo *SRM* apresentou desvios significativos em relação à eficiência de prato quando comparada com a eficiência da coluna testada ajustada no simulador, o que demonstra que é necessário avançar no desenvolvimento deste modelo. No entanto, cabe destacar que o modelo de cálculo de eficiência de ponto (E_{OG})

de Garcia (1999) aprofunda o conhecimento até então disponível dos fenômenos de transferência de massa que ocorrem sobre o prato.

Em síntese, a correlação de O'Connell (1946) foi a que melhor representou a eficiência global da coluna testada, sendo recomendada para a predição da eficiência global de colunas dotadas de pratos valvulados de dois passes com *downcomer*. O modelo de Chan e Fair (1984) combinado ao modelo SRM e o modelo de Chan e Fair (1984) com o uso do comprimento equivalente (C_E) proposto por Klemola e Ilme (1997b) superestimam levemente a eficiência global da coluna. No entanto, esta dificuldade pode ser contornada utilizando-se um fator de correção que leva em consideração no cálculo do número de pratos reais da coluna os desvios apresentados pelos dois métodos.

A implementação do algoritmo em Fortran 77 no Aspen Plus 2006 para o cálculo de eficiência de pratos de fluxo cruzado, valvulado de duplo passe se constitui em uma ferramenta útil para o estudo de outras colunas de pratos valvulados de duplo passe.

O algoritmo, baseado no trabalho de Domingues (2005), mostrou-se bastante versátil, permitindo modificações de parâmetros da coluna estudada de forma rápida, apresentando rápida convergência e fácil interface com o usuário.

O uso do simulador Aspen Plus 2006 mostrou-se uma ferramenta fundamental no decorrer deste trabalho. A possibilidade de importar e exportar dados do programa em Fortran 77, a disponibilidade dos bancos de dados, dos modelos termodinâmicos e de correlações que permitem a determinação das propriedades físicas dos componentes envolvidos, juntamente com o modelo de simulação de colunas de destilação – *RADFRAC* permitiu a implementação das correlações necessárias para o desenvolvimento deste trabalho.

Por fim, ressalta-se que os resultados aqui encontrados são baseados em estudo de uma única coluna e sua representatividade deve ser tomada com a devida precaução.

SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Apesar de a destilação ser uma tecnologia madura, esta continuará por muito tempo sendo a mais importante tecnologia de separação. Vários aspectos dos modelos de predição de eficiência ainda podem e devem ser desenvolvidos.

Trabalhos futuros poderão confirmar e expandir os resultados aqui relatados para pratos valvulados de dois passes e fluxo cruzado. A comparação do modelo de predição de eficiência de ponto de Syeda *et al.* (2007) com os modelos de cálculo de eficiências estudados neste trabalho poderá ser o primeiro passo nesta direção.

Para escolha do modelo termodinâmico a ser utilizado na modelagem das colunas é recomendado verificar o desempenho dos modelos pré-selecionados, comparando-os com dados experimentais da mistura, envolvendo os componentes de interesse, na mesma faixa de pressão e temperatura de operação da coluna.

Como contribuições para melhoria do simulador Aspen 2006, podem-se citar a inclusão do cálculo das difusividades de binários de uma mistura multicomponente e a possibilidade de uso de vetores para importação e exportação de dados de outros programas. Estas duas melhorias já haviam sido identificadas por Domingues (2005) e, novamente, se mostraram como limitações do simulador.

REFERÊNCIAS

AMERICAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS *Bubble Tray Design Manual*. New York, USA: AIChE, 1958.

ASPEN TECHNOLOGY INC. *Physical Property Methods and Models*: versão 10.2. Manual de uso do software. Cambridge, EUA: Aspen Technology Inc., 2000.

BOLLES, W. L. Estimating Valve Tray Performance. *Chem. Eng. Progress*, p. 43-50, 1976.

CHAN, H.; FAIR, J. R. Predict of Point Efficiencies on Sieve Trays. 1. Binary Systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 23, n. 4, p. 814-819, 1984.

CHAN, H.; FAIR, J. R. Prediction of Point Efficiencies on Sieve Trays. 2. Multicomponent Systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 23, n. 4, p. 820-827, 1984.

CHEN, G. X.; CHUANG, K. T. Determining the Number of Gas-Phase and Liquid-Phase Transfer Units from Point Efficiencies in Distillation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 33, n. 4, p. 907-913, 1994.

DOMINGUES, T.L. *Avaliação da eficiência se pratos valvulados com downcomer e pratos dualflow em colunas de destilação industriais*, 2005. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2005.

DHULESIA, H. Clear Liquid Height on Sieve and Valve Trays. *Chem. Eng. Res. Des.*, v. 62, p. 321-326, 1984.

GARCIA, J. A. *Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency*: Hydrocarbon and Aqueous Systems. Austin: The University of Texas at Austin, 1999. Tese (Doutorado em Engenharia Química), The University of Texas at Austin, 1999.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. A Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency. 1. Database Development. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, n. 6, p. 1809-1817, 2000.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. A Fundamental Model for the Prediction of Distillation Sieve Tray Efficiency. 2. Model Development and Validation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, n. 6, p. 1818-25, 2000.

GARCIA, J. A.; FAIR, J. R. Distillation Sieve Trays without Downcomers: Prediction of Performance Characteristics. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 41, n. 6, p. 1632-40, 2002.

GLITSCH. *Ballast Tray Design Manual*: Bulletin n° 4900. Informações de fabricantes. 6.ed. Dallas, EUA: Glitsch Inc., 1993.

JUG, K; KUMERT, L.; KOSTER, A.M. Dipole Moments and Molecular electrostatic potentials from MSINDO. *Theor. Chem. Acc*, 104 , p. 417-425, 2000

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

KISTER, H.Z.; HAAS, J.R. *Chem. Eng. Progress*, v.86, n.9, p. 63, 1990.

KELLER, G.E. Separation, new directions for an old field. *AIChE Monograph Series*. v.83, n.17, p.1-52, 1987.

KLEMOLA, K. T.; ILME, J. K. Distillation Efficiencies of an Industrial-Scale i-Butane / n-Butane Fractionator. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 35, n. 12, p. 4579-4586, 1996.

KLEMOLA, K. T.; ILME, J. K. Calculation Methods for the Numbers of Transfer Units on Sieve Trays. In: AICHE ANNUAL MEETING, 1997a, Los Angeles.

KLEMOLA, K. T.; ILME, J. K. Effect of Two-Pass Trays on Distillation Efficiencies. *Chem. Eng. Technol.*, v. 20, n. 7, p. 478-84, 1997b.

LEWIS, W.K. Rectification of Binary Mixtures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 28, n. 14, p. 339-402, 1936.

LIM, C.T.; PORTER, K.E.; LOCKETT M.J. The Effect of Liquid Channelling on Two-Pass Distillation Plate Efficiency *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 52, p 193-201, 1974.

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

Referências

LOCKETT, M. J.; BANIK, S. The effect of lateral liquid mixing in the downcomer on single pass distillation tray efficiency. *Process Chempor*, v.81, p.14, 1981.

LOCKETT, M. J.; LIM, C.T.; PORTER, K.E. The effect of liquid channeling on distillation column efficiency in the absence of vapor mixing. *Trans.Inst.Chem.Engrs.* v.51, p.125-139, 1973.

LOCKETT, M. J.; PORTER, K.E.; BASSON, K.S. The effect of vapor mixing on distillation plate efficiency when liquid channeling occurs. *Trans.Inst.Chem.Engrs*, v.53, p.125-131, 1975.

CALDAS, J.N.; LACERDA, A.I.; VELOSO, E.; PASCHOAL, L.C.M. *Internos de Torres*. Rio de Janeiro: Interciência, 2007. 509 p.

O'CONNELL, H.E. Plate efficiency of fractionating columns and absorbers, *Trans. Inst. Chem. Engrs*, v.42, p.741-755, 1946.

PORTER, K.E.; LOCKETT, M.J.; LIM, C.T. The effect of liquid Channelling on Distillation Plate Efficiency, *Trans. Inst. Chem. Engrs*, v. 50, p. 91-101, 1972.

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

PRADO, M.; JOHNSON, K. L., FAIR, J. R. Bubble-to-Spray Transition on Sieve Trays. *Chem. Eng. Progress*, p. 32-40, 1987.

PRADO, M.; FAIR, J. R. Fundamental Model for the Prediction of Sieve Tray Efficiency. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 29, n. 6, p. 1031-1042, 1990.

PERRY, R. H; GREEN, D.W.. *Perry' Chemical Engineers' Handbook*. 7th ed. [S.l.]: McGraw-Hill: 1997. 2581 p.

RAPER, J.A.; PINCZEWSKI, W.V.; FELL, C.J.D. Liquid Passage on Sieve Trays Operating in Spray Regime. *Chem Eng Res Des.*, v.62, 1984.

RAPER, J.A.; KEARNEY, J.M.; BURGESS, J.M.; FELL, C.J. The structure of Industrial Sieve Tray Froths, *Chem Eng Science*, Vol.37, n 4, p 501-506, 1982.

TOROPOV, A.A.; NABIEV, O.M; DUCHOWICZ, P. QSPR Modelling of Hydrocarbon Dipole Moments By Means of Correlation weighting of Local Graph Invariants. *J. of Theor. Comput. Chem.*, v. 2, n. 2, p. 139-146, 2003.

TASI, G, MIZUKAMI, F. Analysis of Permanent Electric Dipole of Aliphatic Hydrocarbon Molecules. 2. DFT Results. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, v. 38, p.313-316, 1998.

SYEDA, S.R.;AFACAN, A.;CHUANG, K.T. A Fundamental Model for Prediction of Sieve Tray Efficiency. *Trans IChemE ,Part A*, v.85, n.A2, p .269-277, 2007.

WEILER, D.W.; DELNICK, D.W.; ENGLAND B.L.. Flow hydraulics of Large Diameter Trays . *Chem. Eng. Progress*, v 69, n. 10, p. 67-72, 1973.

WEILER, D.W.; KIRKPATRICK, R. D.; LOCKETT, M. J. Effect of Downcommer Mixing on Distillation Tray Efficiency. *Chem. Eng. Progress*,v.1, p. 63-70, 1981.

XU, Z. P.; AFACAN, A.; CHUANG, K. T. Efficiency of Dualflow Trays in Distillation. *The Canadian Journal of Chem. Eng.*, v. 72, p. 607-13, 1994.

ZUIDERWEG, F. J. Sieve Trays: A View on the State of the Art. *Chem. Eng. Science*, v. 37, n. 10, p. 1441-64, 1982.

OBRAS CONSULTADAS

ASHLEY, M. J. Effectiveness of Vapor-Liquid Contacting on a Sieve Plate. *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, v.50, p.119-124, 1972.

BILLET, R. Separation Tray without Downcomers. *Chem. Eng. Technol.*, v. 24, n. 11, p. 1103-1112, 2001.

BILLET, R. Development and Progress in the Design and Performance of Valve Trays. *British Chem.Eng.*, v. 14, n.14, p.489-493, 1969.

BOLLES, W. L. Multipass Flow Distribution and Mass Transfer Efficiency for Distillation Plates. *AIChE J.*, v.22, n.1, p. 153-158, 1976.

BURGESS, J.M.; CALDERBANK, P. H. The measurement of bubble parameters in two-phase dispersion – II, *Chem. Eng. Sci.*, v. 30, p. 1107-1121, 1975.

JONES, A. B.; PYLE, C. Relative Performance of Sieve and Bubble-Cap Plates. *Chem. Eng. Progress.* v.51, n.9, p.424-429, 1955.

KISTER, H. Z.; HAAS, J. R.; BRAUN, C.E. Predict Entrainment Flooding on sieve and Valve Trays. *Chem. Eng. Progress*, p. 63-69, Sept. 1990.

KISTER, H. Z. Troubleshoot Distillation Simulations. *Chem. Eng. Progress*, p. 63-75, jun. 1995.

KISTER, H. Z. Can we believe the simulation results? *Chem. Eng. Progress*, p. 52-8, out. 2002.

KISTER, H. Z. What caused tower malfunctions in the last 50 years? *Trans IChemE*, v. 81, p. 5-26, 2003.

KNUDSEN, J. G. *et al.* Heat and Mass Transfer. In: PERRY, Robert H. *Chem. Eng. Handbook*. 7.ed. New York: McGraw-Hill, 1999. p. 1-59. cap. 5.

KOCH-GLITSCH. *Flexitray Valve Trays*. Wichita, EUA, 2001. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *Ultrafrac Trays*. Wichita, EUA, 2001. CATÁLOGO.

KOCH-GLITSCH. *High Performance Trays*. Wichita, EUA, 2003. CATÁLOGO.

KOZIOL, A. Generalization of AIChE and Colburn Models for Tray Efficiency. *Chem. Eng. Technol.*, n.12, p.333-339, 1989.

KORCHINSKY, W. J. Liquid Mixing in Distillation Trays: Simultaneous Measurement of the Diffusion Coefficient and Point Efficiency. *Trans IChemE*, v.72, p. 472-478, 1994.

KREYSZIG, E. *Advanced Engineering Mathematics*. 7.ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 1993.

HESKETH, R.P.; ETCHELLS, A. W.; FRASER RUSSELL, T.W. Bubble breakage in pipeline flow. *Chem. Eng. Sci*, v. 46, p. 1-9, 1991.

LOCKETT, M. J.; SAFEKOURDI, A. The Effect of the Liquid Flow Pattern on Distillation Plate Efficiency. *The Chem. Eng. Journal*, v. 11, p. 111-121, 1976.

LOCKETT, M. J.; DHULESIA, H. A. Murphree Plate Efficiency with Nonuniform Vapour Distribution. *The Chem. Eng. Journal*, v. 19, p. 183-188, 1980.

LOCKETT, M. J.; RAHMAN, M. A.; DHULESIA, H. A.; The Effect of Entrainment on Distillation Tray Efficiency. *Chem. Eng. Science*, v. 38, n. 5, p. 661-672, 1983.

LOCKETT, M. J.; AUGUSTYNIAK, J. D. Parallel-flow Slotted Sieve Tray Efficiency. *Gas Separation and Purification*, v.6, n. 4, p. 215-219, 1992.

NORMAN, W.S., Factors Affecting the Performance of Valve Plates. *Trans .Instn. Chem. Engrs.*, v.39, p. 305- 311, 1961.

NORTON CHEMICAL PROCESS. *Valve Tray Design Manual*. Manual de projeto. Akron, EUA: Norton Chemical Process, 1999.

PILLING, P., Ensure Proper Design and Operation of Multi-Pass Trays. *Chem. Eng. Progress*, p. 22-26, 2005.

Obras consultadas

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

PRADO, M.; JOHNSON, K. L.; FAIR, J. R. Bubble-to-Spray Transition on Sieve Trays, *Chem. Eng. Progress*, p. 32-40, 1987.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. *The Properties of Gases and Liquids*. 4. ed. New York: McGraw-Hill, 1987.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; SHERWOOD, T. K. *The Properties of Gases and Liquids*. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1977.

SULZER CHEMTECH. *Trays for any application*. Winterthur, Switzerland, [s.d]. CATÁLOGO.

YANAGI, T.; SAKATA, M. Performance of a Commercial Scale 14% Hole Area Sieve Tray. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, v. 21, p. 712-7, 1982.

YANA GI, T. Inside a trayed distillation column. *Chem. Eng*, p. 120-129, 1990

WOOD, R.M. The Stability of the Valves of Floating Valve Plates, *Trans. Inst. Chem. Engrs.*, v. 39, 1961.

VAN WINKLE, M.; TODD, W. G. Correlation of Valve Tray Efficiency Data, *Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev.*, v. 11, n.4, p.589-603, 1972.

VAN WINKLE, M.; TODD, W. G. Fractionation Efficiency, *Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev.*, v. 11, n.4, p.578-88, 1972.

VAN WINKLE, M.; GARRETT, G.; ANDERSON, R. H. Efficiency Comparison of valve and Sieve Tray in Distillation Columns, *Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev.*, v. 15, n.1, 1976.

Apêndice A – condições operacionais do teste da coluna de butadieno

APÊNDICE A – CONDIÇÕES OPERACIONAIS DO TESTE DA COLUNA DE BUTADIENO

Tabela A-1: Condições operacionais com balanço de massa ajustado da fracionadora de butadieno

Data / hora	23/08/2005 08:00 hs às 20:00 hs
Vazões (Kg/h)	
Carga	13001,15
Produto de topo (1)	12445,83
Fundo	555,32
Refluxo	78947,91
Relações	
Refluxo/destilado	0,86
Temperaturas (°C)	
Topo (prato 1)	44,84
Prato 43	51,14
Prato 57	53,66
Fundo	63,16
Pressões man (Kg/cm ²)	
Topo (prato1)	4,1
Fundo (prato)	5,23

Apêndice A – condições operacionais do teste da coluna de butadieno

Tabela A-2: Composição ajustada das correntes da fracionadora de butadieno

Data / hora		23/08/2005 08:00 hs às 20:00 hs		
Carga			% massa	mass frac
1,2-Butadieno	% mol	0,69	0,691	0,0069
1,3-Butadieno	% mol	95,2	95,4	0,954
1-Buteno	ppm mol			
2-Cisbuteno	% mol	3,4	3,534	0,0353
2-Transbuteno	% mol	0,135	0,14	0,0014
C5+	% mol	0,103	0,134	0,0013
Etilacetileno	% mol	0,1	0,1	0,001
Isobuteno	ppm mol			
Vinilacetileno	ppm mol			
Total			100	1

Apêndice B – Programas Fortran 77

APÊNDICE B – PROGRAMAS FORTRAN 77

Tabela B-1: Programa em Fortran 77 para cálculo de eficiência de prato de dois passes, com fluxo cruzado e downcomer - pratos pares e ímpares

```

C  INICIO

    NP = 86
    NF = 31

C  ESPESSURA DO PRATO
    T = 0.0034

C  DIAMETRO DO FURO ( = RAO HIDRAULICO)
    DH = 0.038

C  NUMERO DE VÁLVULAS
    NV = 330

C  ESPESSURA DA VÁLVULA
    VT = 0.00152

    D = 2.258

C  AREA SLOT TOTAL
    AS = 0.2664

    DL = 8.73E-9
    TS = 0.450

C  VERIFICAR QUE COMO HW > 0,0254 ENTÃO HWCSB=1.0
    HW = 0.051
    DG = 1.26E-6

C  CAMINHO DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO
    Z = 0.784

C  ÁREA TOTAL
    AT = ((3.1416*D**2)/4)

C  NUMERO DE COMPONENTES
    IC = 6

C  INDICE DOS COMPONENTES CHAVES LEVE (IL) E PESADO (IH)
    IL = 2
    IH = 3

C  COMPOSICAO DA MISTURA PSEUDO-BINARIA
    YLK(1) = Y(IL)/(Y(IL)+Y(IH))
    XLK(1) = X(IL)/(X(IL)+X(IH))

    SUM = 0.0
    SUM1 = 0.0
    SUM2 = 0.0
    SUM3 = 0.0
    SUM4 = 0.0
    SUM5 = 0.0
    SUM6 = 0.0
    SUM7 = 0.0
    SUM8 = 0.0
    SUM9 = 0.0
    SUM10 = 0.0

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

DO I=2 , NP

C  VERIFICAÇÃO DO PRATO IMPAR

IF(MOD(I,2).EQ.0) THEN

C  COMPRIMENTO DA CORDA # impar
LW(I)= 1.350

C  AREA UM DONWCOMER LATERAL - # impar
ADLI = 0.222

C  AREA DO DONWCOMER CENTRAL - # impar
ADCI = 0.585

C  ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA) - # impar
AA = AT - (2*ADLI+ADCI)

C  ÁREA LÍQUIDA (NET) - # impar
ANI = AT - ADCI

C  VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET - # impar
US(I) = QG(I)/ANI

ELSE

C  PRATO PAR

C  COMPRIMENTO DA CORDA # par

LWP = 2.251

C  COMPRIMENTO DA CORDA # par SEM MODELO SRM

LW(I) = LWP

C  AREA UM DONWCOMER LATERAL - # par
ADLP = 0.281

C  AREA DO DONWCOMER CENTRAL - # par
ADCP = 0.402

C  ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA) - # par
AA = AT - (2*ADLP+ADCP)

C  ÁREA LÍQUIDA (NET) - # par
ANP = AT - (2*ADLP)

C  VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET - # par
US(I) = QG(I)/ANP

END IF

C  VÁVULAS ABERTAS ( BOLLES 1982)
FVO(I)=(1/(RHOG(I)*0.0624))
UCBP(I) = ((VT/0.0254)*1.23*(1.3/6.154)*484*FVO(I))*0.5
UCBO(I) = UCBP(I)*((6.154/0.821)**0.5)

C  AREA PERFURADA DO PRATO ( BASEADO NO DIAMETRO DO FURO)
AH = (3.1416*((DH*3.2808)**2)/4)*NV

C  VELOCIDADE BASEADA NO DIAMETRO DO FURO
UHD(I)= ((QG(I)*35.315)/(AH*(3.2808**2)))

C  FRAÇÃO DE VALULAS ABERTAS
VO(I) = (UHD(I) - UCBP(I))/(UCBO(I)-UCBP(I))

```


Apêndice B – Programas Fortran 77

```

      IF (VO(I) .GT. 1.0) THEN
        VO(I) =1.0
      ELSE
        VO(I)=VO(I)
      END IF

      IF (VO(I) .LT. 0.9) THEN
        VO(I)= 1.0
      ELSE
        VO(I)=VO(I)
      END IF

C   FRAÇÃO DE ÁREA DE SLOT DO PRATO
      FAP(I)=(AS/AA)*VO(I)

C   INCLINACAO DA CURVA DE EQUILIBRIO
      YLK(I)=Y(IL+(I-1)*IC)/(Y(IL+(I-1)*IC)+Y(IH+(I-1)*IC))
      XLK(I)=X(IL+(I-1)*IC)/(X(IL+(I-1)*IC)+X(IH+(I-1)*IC))
      M(I) = (YLK(I)-YLK(I-1))/(XLK(I)-XLK(I-1))

C   FATOR DE ESGOTAMENTO
      LAMB(I) = M(I)*((MG(I)/MWG(I))/(ML(I)/MWL(I)))

C   VAZÃO VOLUMETRICA DE LIQUIDO DIVIDIDA POR 2
      QL1(I) = QL(I)/2

C   VELOC. SUP. BASEADA NA ÁREA ATIVA.
      UA(I)=QG(I)/AA

C   FATOR FS
      FS(I)=UA(I)*RHOG(I)**0.5

C   VELOCIDADE NOS FUROS BASEADO NA AREA SLOT
      UH(I) = QG(I)/AS

C   PARÂMETRO DE FLUXO
      FP(I) = (ML(I)/MG(I))*(RHOG(I)/RHOL(I))**0.5

C   ALTURA DA ESPUMA

C   FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
      RHOM(I)=(RHOG(I)/(RHOL(I)-RHOG(I)))
      ALPH(I)=DEXP(-12.55*(UA(I)*RHOM(I)**0.5)**0.91)

C   FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
      C=0.50+0.438*DEXP(-137.8*HW)

C   ALTURA DO LIQUIDO CLARO, BENNETT ET AL (1983) EM USO CHAN
      HL1(I)=ALPH(I)*(HW+C*(QL1(I)/(LW(I)*ALPH(I))**0.67)

C   ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, DHULESIA (1984) EM USO GARCIA VV TRAY
      HL(I)=0.42*(QL1(I)/(LW(I)*UA(I))*(RHOL(I)/RHOG(I))**0.5)**0.33*
      & HW**0.67

C   ALTURA DO LÍQ. CLARO, BRAMBILLA ET AL. (1969)
      HL2(I)=0.74*HW-0.0145*FS(I)+1.66*QL1(I)/LW(I)+0.003

C   ALTURA DO LÍQ. CLARO DINÂMICO, LOCKETT
      HLD(I)=HL(I)-UA(I)*RHOG(I)*(UH(I)-UA(I))/(RHOL(I)*9.81)

C   ALTURA DA ESPUMA, TODD & VAN WINKLE (1972)
      HF(I)=0.076+32.6*FS(I)**2/(RHOL(I)-RHOG(I))+0.82*HL(I)

C   PROROSIDADE
      E(I)=1-HL(I)/HF(I)

C   FATOR DE INUNDAÇÃO
C   FATOR DE CAPACIDADE, TREYBAL (1968)
C   CSB(I)=(0.0744*TS+0.0117)*(DLOG10(FP(I)**-1))+0.0304*TS+0.0153

C   FATOR DE CAPACIDADE, KISTER & HASS( 1990)
      CSB(I)=0.0277*((DH*1000)**2*(SIGMA(I)*1000/RHOL(I))**0.125*

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

& (RHOG(I)/RHOL(I))**0.1*(TS/HL(I))**0.5

F(I)=1/(1+1.4*((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5)
C1(I)=0.445*(1-F(I))*(SIGMA(I)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I)))**0.25
& -1.4*(QL(I)/AA)
C2(I)=0.356*(1-F(I))*(SIGMA(I)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I)))**0.25

C  VELOCIDADE DE INUNDAÇÃO - LOCKETT
UF(I) = CSB(I)*(SIGMA(I)/0.02)**0.2*
& ((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5*(FAP(I)/0.1)**0.44

C  FATOR DE INUNDAÇÃO
FF(I) = US(I)/UF(I)

C  FASE LÍQUIDA
C  ZONA 1
C  FRAÇÃO DE FUIROS PASSANDO VAPOR, PRADO 1990
C  XF(I)=1-1836.97*UH(I)**-1.602*(QL1(I)/LW(I))**0.524*HW**0.292
C  FIGURA 5-6 (PRADO,1987)
C  XF(I)=0.90
C  SEGUNDO GARCIA 1999, PG 183, FLC=0, XF=1,0
C  XF(I)=1.0
C  DIÂMETRO DO JET
DJ(I)=1.1*DH+0.25*HL(I)

C  VELOCIDADE DO JET COM "XF" AO INVÉS DE (1-FLC)
UJ(I)=(UH(I)*DH**2)/(XF(I)*DJ(I)**2)

C  REYNOLDS NO FUIRO - LOCKETT(1979)
REH(I)=DH*UH(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C  ALTURA DO JET - GARCIA 2000
HJ(I)=1.1E-3*DH**0.2*REH(I)**0.46

C  TEMPO RESIDÊNCIA ZONA 1
TG1(I)=HJ(I)/UJ(I)

C  FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
FTM(I) = (RHOL(I)*MG(I)*DL**0.5)/
& (3.1416**0.5*RHOG(I)*ML(I))

C  NTUL ZONA 1
NL1(I) = (8*FTM(I)*TG1(I)**0.5)/DJ(I)

C  ZONA 2
C  DIÂMETRO DAS BOLHAS
C  DIÂMETRO DE BOLHAS PEQUENAS (GARCIA 2000)
DBS(I)=3.34/(UA(I)*9.8)**0.4*(SIGMA(I)/RHOL(I))**0.6*
& (MIL(I)/MIG(I))**0.1

C  DIÂMETRO DE BOLHAS GRANDES (GARCIA 2000) AO INVÉS DE
DBL(I)=DBS(I)*(0.83+41.5*(SIGMA(I)**0.6*
& (MIL(I)/RHOG(I))**0.1))

C  DIÂMETRO MÉDIO SAUTER DAS BOLHAS (GARCIA 2000) NOVA CORREL.
C  FATOR DE CORREÇÃO
IF (SIGMA(I) .GT. 5E-3) THEN
  SIGCSB(I)=1
ELSE
  SIGCSB(I)=3*SIGMA(I)**0.6
ENDIF

IF (MIL(I) .GT. 0.6E-3) THEN
  MILCSB(I)=4.13*MIL(I)**1.5
ELSE
  MILCSB(I)=1
ENDIF

C  COMO HW > 0,0254 ENTÃO HWCBS=1.0
FI3(I)= 1.0 * MILCSB(I) * SIGCSB(I)

C  CÁLCULO DE DBLS E DBSS

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

DBLS(I)=FI3(I)*0.605*DH**0.84*UH(I)**0.18/((QL1(I)/LW(I))**0.07)
DBSS(I)=FI3(I)*0.660*DH**0.84*UH(I)**0.085/((QL1(I)/LW(I))**0.08)

C   VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS - GARCIA 2000
C   NÚMERO DE EOTVOS
EO(I) = 9.8*(RHOL(I)-RHOG(I))*DBS(I)**2/SIGMA(I)
EO1(I) = 9.8*(RHOL(I)-RHOG(I))*DBSS(I)**2/SIGMA(I)

C   NÚMERO DE MORTON
MO(I) = 9.81*MIL(I)**4*(RHOL(I)-RHOG(I))/(RHOL(I)**2*
& SIGMA(I)**3)

C   CONSTANTE H
H(I)=4/3*EO(I)*MO(I)**-0.149*(MIL(I)/9.12E-4)**-0.14
H1(I)=4/3*EO1(I)*MO(I)**-0.149*(MIL(I)/9.12E-4)**-0.14

IF (H(I) .GT. 59.3) THEN
  J(I)=3.42*H(I)**0.441
ELSE
  J(I)=0.94*H(I)**0.757
ENDIF

IF (H1(I) .GT. 59.3) THEN
  J1(I)=3.42*H1(I)**0.441
ELSE
  J1(I)=0.94*H1(I)**0.757
ENDIF

C   VELOC. TERMINAL DAS BOLHAS PEQ NAS ZONAS 2 E 4 (GARCIA 2000)
USB(I)=MIL(I)/(RHOL(I)*DBS(I))*MO(I)**-0.149*(J(I)-0.857)

C   VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS DBSS NA ZONAS 5 (GARCIA 2000)
UBSS(I)=MIL(I)/(RHOL(I)*DBSS(I))*MO(I)**-0.149*(J1(I)-0.857)

C   FRAÇÃO DE BOLHAS PEQUENAS NA ESPUMA (GARCIA 2000)
C   PROP. DO AR E DA ÁGUA SIMULADOS NO ASPEN À 1 ATM E 25°C
AJ(I) = 1 - 0.463*(SIGMA(I)/0.07282)**0.6*
& (MIL(I)/9.12E-4*1.845E-5/MIG(I))**
& 0.1*(994.7/RHOL(I))**0.6*(1.183/RHOG(I))**0.1

C   NÃO FOI INCLUÍDA CORREÇÃO DE AJ QUANDO MIL>0.6E-3 E SIGMA<50E-3

C   VELOCIDADE DE SUBIDA DAS BOLHAS GRANDES (PRADO 1990)
ULB(I) = US(I)/((1 - AJ(I))*E(I)) - USB(I)*AJ(I)/(1-AJ(I))

C   TEMPO DE RESIDÊNCIA -
C   VERIFICAR SE HF > HJ SENÃO FAZER (HF-HJ) = HF
IF (HF(I) .GT. HJ(I)) THEN
  TG2S(I) = (HF(I)-HJ(I))/USB(I)
  TG2L(I) = (HF(I)-HJ(I))/ULB(I)
ELSE
  TG2S(I) = HF(I)/USB(I)
  TG2L(I) = HF(I)/ULB(I)
ENDIF

C   NUT ZONA 2
NL2S(I) = 12*FTM(I)*TG2S(I)**0.5/DBS(I)
NL2L(I) = 12*FTM(I)*TG2L(I)**0.5/DBL(I)

C   ZONA 3
C   TEMPO DE RESIDÊNCIA
ULB3(I) = US(I)/E(I)
TG3(I) = DBLS(I)/ULB3(I)

C   NUT ZONA 3
NL3(I) = 12*FTM(I)*TG3(I)**0.5/DBLS(I)

C   ZONA 4
C   TEMPO DE RESIDÊNCIA
C   VERIFICAR SE HF > DBLS SENÃO FAZER (HF-DBLS) = HF
IF (HF(I) .GT. DBLS(I)) THEN
  TG4S(I) = (HF(I)-DBLS(I))/USB(I)

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

      TG4L(I) = (HF(I)-DBLS(I))/ULB(I)
      ELSE
      TG4S(I) = HF(I)/USB(I)
      TG4L(I) = HF(I)/ULB(I)
      ENDIF

C   NUT ZONA 4
      NL4S(I)=12*FTM(I)*TG4S(I)**0.5/DBS(I)
      NL4L(I)=12*FTM(I)*TG4L(I)**0.5/DBL(I)

C   ZONA 5
      TG5(I)=HF(I)/ULB3(I)
      NL5(I)=12*FTM(I)*TG5(I)**0.5/DBSS(I)

C   ESTIMATIVA DA QUANTIDADE DE FUIROS EM REGIME JET

C   FJ (PRADO, 1990)
      UA0(I)=0.1*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*HW**0.132*
& DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0.27
      UA100(I)=1.1*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*HW**0.132*
& DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0.27
      FJ1(I)=(UA(I)-UA0(I))/(UA100(I)-UA0(I))

C   FJ (PRADO, 1987)
      UATP(I)=(0.04302*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*SIGMA(I)**0.06*
& FAP(I)**0.25*(QL1(I)/LW(I))**0.05*DH**0.1)

      UA0P(I)=10.38*HW**0.132*DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0
      UA100P(I)=114*HW**0.132*DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0

      FJP(I)=(UA(I)*DH**0.27/(103.65*FAP(I)*(HW**0.5*(QL1(I)/LW(I))**
& 0.27))-0.1

C   CONSIDERANDO FJ=60% QDO UA=UATP TRANSIÇÃO (PRADO, 1987)
C   FJ(I)=UA(I)*0.60/UATP(I)

C   FJ (PRADO, 1990)
      FJ(I)= FJ1(I)

C   FJ (PRADO, 1987)
C   FJ(I)= FJP(I)

C   CONSTANTES FSB E FLB
      FSB=165.65*DH**1.32*FAP(I)**1.33
      FLB(I)=1-FJ(I)-FSB

C   CALCULO DA EFICIENCIA DA FASE LÍQUIDA

C   EFICIENCIA FASE LÍQUIDA TODO PRATO
      NLFJ(i)=NL1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL2S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL2L(i)))))
      NLFLB(i)= NL3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL4S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL4L(i)))))

      EL(I)=(FJ(I)*(1-DEXP(-NLFJ(I)))+FLB(I)
& *(1-DEXP(-NLFLB(I)))+ FSB*(1-DEXP(-NL5(I)))

C   FASE GÁS
C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
      FTMG(I)=(ML(I)*RHOG(I))/(MG(I)*RHOL(I))

C   ZONA1
C   REYNOLDS NO JET
      REJ(I)=UJ(I)*DJ(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   SCHIMIDT NA FASE GÁS
      SCG(I)=MIG(I)/(RHOG(I)*DG)

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
      KG1(I)=0.046*(DG/DJ(I))*REJ(I)**0.96*SCG(I)**0.44

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
    KL1(I)=1.13*(DL/TG1(I))*0.5

C   NTU ZONA 1
    NG1(I)=FTMG(I)*KG1(I)*NL1(I)/KL1(I)

C   ZONA 2,3,4,5
    PEG2S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
    PEG2L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
    PEG3(I)=DBLS(I)*ULB3(I)/DG
    PEG4S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
    PEG4L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
    PEG5(I)=DBSS(I)*UBSS(I)/DG

    IF (PEG2S(I) .GT. 200) THEN
        SH2S(I)=17.9
    ELSE
        SH2S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2S(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG2L(I) .GT. 200) THEN
        SH2L(I)=17.9
    ELSE
        SH2L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2L(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG3(I) .GT. 200) THEN
        SH3(I)=17.9
    ELSE
        SH3(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG3(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG3(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG4S(I) .GT. 200) THEN
        SH4S(I)=17.9
    ELSE
        SH4S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4S(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG4L(I) .GT. 200) THEN
        SH4L(I)=17.9
    ELSE
        SH4L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4L(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG5(I) .GT. 200) THEN
        SH5(I)=17.9
    ELSE
        SH5(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG5(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG5(I)))**2
    ENDIF

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
    KG2S(I)=SH2S(I)*DG/DBS(I)
    KG2L(I)=SH2L(I)*DG/DBL(I)
    KG3(I)=SH3(I)*DG/DBLS(I)
    KG4S(I)=SH4S(I)*DG/DBS(I)
    KG4L(I)=SH4L(I)*DG/DBL(I)
    KG5(I)=SH5(I)*DG/DBSS(I)

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
    KL2S(I)=1.13*(DL/TG2S(I))*0.5
    KL2L(I)=1.13*(DL/TG2L(I))*0.5
    KL3(I)=1.13*(DL/TG3(I))*0.5
    KL4S(I)=1.13*(DL/TG4S(I))*0.5
    KL4L(I)=1.13*(DL/TG4L(I))*0.5
    KL5(I)=1.13*(DL/TG5(I))*0.5

C   NUT ZONAS 2,3,4 E 5

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

NG2S(I)=FTMG(I)*KG2S(I)*NL2S(I)/KL2S(I)
NG2L(I)=FTMG(I)*KG2L(I)*NL2L(I)/KL2L(I)
NG3(I)=FTMG(I)*KG3(I)*NL3(I)/KL3(I)
NG4S(I)=FTMG(I)*KG4S(I)*NL4S(I)/KL4S(I)
NG4L(I)=FTMG(I)*KG4L(I)*NL4L(I)/KL4L(I)
NG5(I)=FTMG(I)*KG5(I)*NL5(I)/KL5(I)

```

C CÁLCULO DA EFICIÊNCIA NA FASE GÁS

C EFICIÊNCIA NA FASE GÁS TODO PRATO

```

NGFJ(I)=NG1(I)-DLOG(1-(AJ(I)*(1-DEXP(-NG2S(I)))+
& (1-AJ(I))*(1-DEXP(-NG2L(I))))))
NGFLB(I)= NG3(I)-DLOG(1-(AJ(I)*(1-DEXP(-NG4S(I)))+
& (1-AJ(I))*(1-DEXP(-NG4L(I))))))

EG(I)=(FJ(I)*(1-DEXP(-NGFJ(I)))+FLB(I)
& *(1-DEXP(-NGFLB(I)))+FSB*(1-DEXP(-NG5(I)))

```

C MÉTODO DE O'CONNELL

```

KBD(I)=Y(IL+(I-1)*IC)/X(IL+(I-1)*IC)
KCI(I)=Y(IH+(I-1)*IC)/X(IH+(I-1)*IC)

VOLA(I)= KBD(I)/KCI(I)

EC(I)=(9.05*((MIL(I)*VOLA(I)))**0.245)/100

```

C MÉTODO DE CHAN E FAIR (1984)

C TEMPO DE RESIDENCIA DO VAPOR

```

TG(I)=((1-ALPH(I))*HL(I))/(ALPH(I)*UA(I))

```

C NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE VAPOR

```

NG(I)=(10300-8670*FF(I))*FF(I)*SQRT(DG/HL1(I))*TG(I)

```

C TEMPO DE RESIDENCIA DO LIQUIDO

```

TL(I)=HL(I)*Z*LW(I)/QL1(I)

```

C NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE LIQUIDA

```

NL(I)=19700*DL**0.5*(0.4*FS(I)+0.17)*TL(I)

```

C NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA GLOBAL

```

NOG(I)=1/((LAMB(I)/NL(I))+(1/NG(I)))

```

C EFICIENCIA DE PONTO

```

EG1(I)=1-EXP(-NOG(I))

```

C MODELO DE MISTURA(EG PARA EMV)

C DIFUSIVIDADE TURBULENTA, MOLNAR (1974)

```

DE(I)=(0.0005+0.01285*UA(I)+6.32*QL1(I)/LW(I)+0.312*HW)**2

```

C NÚMERO DE PECLET, LOCKETT

```

PE(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
PE1(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL1(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))

```

C MODELO DE MISTURA BENNETT E GRIMM (EG PARA EMV)

```

C CBG(I)= 0.501+(0.439*DEXP(-137.8*HL(I)))
C KS(I) = UA(I)*(RHOG(I)/(RHOL(I)-RHOG(I)))**0.5
C FIE(I) = DEXP(-12.55*(KS(I)**0.91))
C HFE(I) = HL(I)+ CBG(I)*((QL1(I)/LW(I)*FIE(I))**0.667
C H2FI(I) = HFE(I) +((0.794*KS(I)**2)/(AH/AA)*FIE(I))
C DEBG(I) = 0.02366*(H2FI(I)**1.5)

```

C NÚMERO DE PECLET, BENNETT E GRIMM

```

C PE(I)=(QL1(I)*(Z**2))/(DEBG(I)*AA*HL(I))
C PE1(I)=(QL1(I)*(Z**2))/(DEBG(I)*AA*HL1(I))

```

C VERIFICAR TIPO DE FLUXO NO PRATO

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

      IF (PE(I) .GT. 20) THEN
C      CÁLCULO DE EMV PARA PLUG FLOW
      EMV(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG(I))-1)/LAMB(I)
      ELSE
C      FATOR N
      N(I)=(PE(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*EG(I)/PE(I)))-1)
C      CÁLCULO DE N+PE=CTET
      CTET(I)=N(I)+PE(I)
C      CÁLCULO DE EMV PARA MISTURA PARCIAL
      EMV(I)=EG(I)*((1-EXP(-CTET(I)))/(CTET(I)*
&      (1+CTET(I)/N(I)))+
&      (EXP(N(I))-1)/N(I)*(1+N(I)/CTET(I)))
      ENDIF

      IF (PE1(I) .GT. 20) THEN
C      CÁLCULO DE EMV1 PARA PLUG FLOW
      EMV1(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG1(I))-1)/LAMB(I)
      ELSE
C      FATOR N1
      N1(I)=(PE1(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*EG1(I)/PE1(I)))-1)
C      CÁLCULO DE N1+PE1=T1
      CTET1(I)=N1(I)+PE1(I)
C      CÁLCULO DE EMV1 PARA MISTURA PARCIAL
      EMV1(I)=EG1(I)*((1-EXP(-CTET1(I)))/(CTET1(I)*
&      (1+CTET1(I)/N1(I)))+
&      (EXP(N1(I))-1)/N1(I)*(1+N1(I)/CTET1(I)))
      ENDIF

C      ARRASTE DE LÍQUIDO (SPRAY ENTRAINMENT), ZUIDERWEG (1982)
      HB(I)=HL(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL(I))**0.5*
&      (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)
      HB1(I)=HL1(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL1(I))**0.5*
&      (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)

      LE(I)=1E-8*(HB(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2
      LE1(I)=1E-8*(HB1(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2

C      EFICIÊNCIA APARENTE A PARTIR DA EFIC. DRY, COLBURN (1936)
      EMVA(I)=EMV(I)/(1+LE(I)*EMV(I))
      EMVA1(I)=EMV1(I)/(1+LE1(I)*EMV1(I))

C      ESTIMATIVA DE WEEPING (LOCKETT PG. 115)
      FRH(I)=UH(I)*(RHOG(I)/(9.81*HL(I)*(RHOL(I))**0.5
&      (1+LE(I)*EMV(I)))-1)
      WEEP(I)=0.020*FRH(I)**-1-0.030

C      CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (CHAN = EMVA1(I))
      EFI(I) =EMVA1(I)

C      CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (GARCIA=EMVA(I))
      EFIG(I) = EMVA(I)

C      CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (OCONNEL= EC(I))
      EFIC(I) =EC(I)

C      RESTRIÇÃO QUANDO A EFICIÊNCIA É > 1, POIS ASPEN NÃO ACEITA
C      IF (EFI(I) .GT. 1.0) THEN
C      EFI(I)=1
C      ELSE
C      EFI(I) =EMVA1(I)
C      END IF

C      EFICIÊNCIA GLOBAL
      EOG(I)=DLOG(1+EMVA(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
      EOG3(I)=DLOG(1+EG(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
      EOG4(I)=DLOG(1+EMVA1(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
      EOG5(I)=DLOG(1+EG1(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
      EOG6(I)=EC(I)

      SUM1 = SUM1 + FS(I)
      FSAVG = SUM1/(NP-1)

      SUM2 = SUM2 + LAMB(I)

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```
LAMBVG = SUM2/(NP-1)
```

```
SUM = SUM + EOG(I)
EOGC = SUM/(NP-1)
```

```
SUM3 = SUM3+ EOG3(I)
EOGC3 = SUM3/(NP-1)
```

```
SUM4 = SUM4 + EOG4(I)
EOGC4 = SUM4/(NP-1)
```

```
SUM5 = SUM5 + EOG5(I)
EOGC5 = SUM5/(NP-1)
```

```
SUM6 = SUM6 + EOG6(I)
EOGC6 = SUM6/(NP-1)
```

```
SUM7 = SUM7 + WEEP(I)
WEEPVG = SUM7/(NP-1)
```

```
SUM8 = SUM8 + FF(I)
FFAVG = SUM8/(NP-1)
```

```
SUM9 = SUM9 + FJ(I)
FJAVG = SUM9/(NP-1)
```

```
SUM10 = SUM10 + FJ1(I)
FJ1AVG = SUM10/(NP-1)
```

```
END DO
```

C CÁLCULO DA EFICIÊNCIA GLOBAL POR SEÇÕES

```
SUM = 0.0
DO I = 2, NF-1
SUM = SUM + EOG(I)
END DO
EOGC1 = SUM/(NF-2)
```

```
SUM = 0.0
DO I = NF, NP
SUM = SUM + EOG(I)
END DO
EOGC2 = SUM/(NP-NF+1)
```

C VARIÁVEIS DE SAÍDA

```
M51=M(51)
LAMB51=LAMB(51)
```

C ZONA 1-LÍQUIDO

```
US51=US(51)
UA51=UA(51)
FP51=FP(51)
FS51=FS(51)
UH51=UH(51)
HL51=HL(51)
HL151=HL1(51)
HL251=HL2(51)
E51=E(51)
HF51=HF(51)
CSB51=CSB(51)
F51=F(51)
C151=C1(51)
C251=C2(51)
UF51=UF(51)
UF20=UF(20)
VO51=VO(51)
FAP51=FAP(51)
FF51=FF(51)
XF51=XF(51)
DJ51=DJ(51)
UJ51=UJ(51)
REH51=REH(51)
```


Apêndice B – Programas Fortran 77

```

HJ51=HJ(51)
NL151=NL1(51)

C   ZONA 2 LÍQUIDO
DBS51=DBS(51)
DBL51=DBL(51)
J51=J(51)
USB51=USB(51)
AJ51=AJ(51)
ULB51=ULB(51)
UBSS51=UBSS(51)
NL2S51=NL2S(51)
NL2L51=NL2L(51)
TG2L51=TG2L(51)

C   ZONA 3 LÍQUIDO
FI351=FI3(51)
DBLS51=DBLS(51)
DBSS51=DBSS(51)
NL351=NL3(51)

C   ZONA 4 LÍQUIDO
NL4S51=NL4S(51)
NL4L51=NL4L(51)
TG4L51=TG4L(51)

C   ZONA 5 LÍQUIDO
NL551=NL5(51)
TG551=TG5(51)

UA051=UA0(51)
UA1051=UA100(51)
FJ51=FJ(51)
FJ151=FJ1(51)
UATP51=UATP(51)
UA0P51=UA0P(51)
UA1P51=UA100P(51)
FJP51=FJP(51)
RHOG51=RHOG(51)
RHOL51=RHOL(51)
QG51=QG(51)
QL51=QL(51)
FLB51=FLB(51)
EL51=EL(51)

C   FASE GÁS

NG151=NG1(51)
NG2S51=NG2S(51)
NG2L51=NG2L(51)
NG351=NG3(51)
NG4S51=NG4S(51)
NG4L51=NG4L(51)
NG551=NG5(51)
NGFJ51=NGFJ(51)
NGFL51=NGFLB(51)

TG151=TG1(51)
TG2S51=TG2S(51)
TG351=TG3(51)
TG4S51=TG4S(51)

EG51=EG(51)
PE51=PE(51)
EMV51=EMV(51)
LE51=LE(51)
EMVA51=EMVA(51)
FRH51=FRH(51)

```

EOG51=EOG(51)

C MÉTODO DE CHAN E FAIR

NG51=NG(51)
NL51=NL(51)
EG151=EG1(51)
PE151=PE1(51)
EMV151=EMV1(51)
LE151=LE1(51)
EMVA15=EMVA1(51)

EF2=EFI(2)
EF3=EFI(3)
EF4=EFI(4)
EF5=EFI(5)
EF6=EFI(6)
EF7=EFI(7)
EF8=EFI(8)
EF9=EFI(9)
EF10=EFI(10)
EF11=EFI(11)
EF12=EFI(12)
EF13=EFI(13)
EF14=EFI(14)
EF15=EFI(15)
EF16=EFI(16)
EF17=EFI(17)
EF18=EFI(18)
EF19=EFI(19)
EF20=EFI(20)
EF21=EFI(21)
EF22=EFI(22)
EF23=EFI(23)
EF24=EFI(24)
EF25=EFI(25)
EF26=EFI(26)
EF27=EFI(27)
EF28=EFI(28)
EF29=EFI(29)
EF30=EFI(30)
EF31=EFI(31)
EF32=EFI(32)
EF33=EFI(33)
EF34=EFI(34)
EF35=EFI(35)
EF36=EFI(36)
EF37=EFI(37)
EF38=EFI(38)
EF39=EFI(39)
EF40=EFI(40)
EF41=EFI(41)
EF42=EFI(42)
EF43=EFI(43)
EF44=EFI(44)
EF45=EFI(45)
EF46=EFI(46)
EF47=EFI(47)
EF48=EFI(48)
EF49=EFI(49)
EF50=EFI(50)
EF51=EFI(51)
EF52=EFI(52)
EF53=EFI(53)
EF54=EFI(54)
EF55=EFI(55)
EF56=EFI(56)
EF57=EFI(57)
EF58=EFI(58)
EF59=EFI(59)
EF60=EFI(60)
EF61=EFI(61)
EF62=EFI(62)

Apêndice B – Programas Fortran 77

EF63=EFI(63)
EF64=EFI(64)
EF65=EFI(65)
EF66=EFI(66)
EF67=EFI(67)
EF68=EFI(68)
EF69=EFI(69)
EF70=EFI(70)
EF71=EFI(71)
EF72=EFI(72)
EF73=EFI(73)
EF74=EFI(74)
EF75=EFI(75)
EF76=EFI(76)
EF77=EFI(77)
EF78=EFI(78)
EF79=EFI(79)
EF80=EFI(80)
EF81=EFI(81)
EF82=EFI(82)
EF83=EFI(83)
EF84=EFI(84)
EF85=EFI(85)
EF86=EFI(86)

C MÉTODO DE OCONNEL

EF2C=EFIC(2)
EF3C=EFIC(3)
EF4C=EFIC(4)
EF5C=EFIC(5)
EF6C=EFIC(6)
EF7C=EFIC(7)
EF8C=EFIC(8)
EF9C=EFIC(9)
EF10C=EFIC(10)
EF11C=EFIC(11)
EF12C=EFIC(12)
EF13C=EFIC(13)
EF14C=EFIC(14)
EF15C=EFIC(15)
EF16C=EFIC(16)
EF17C=EFIC(17)
EF18C=EFIC(18)
EF19C=EFIC(19)
EF20C=EFIC(20)
EF21C=EFIC(21)
EF22C=EFIC(22)
EF23C=EFIC(23)
EF24C=EFIC(24)
EF25C=EFIC(25)
EF26C=EFIC(26)
EF27C=EFIC(27)
EF28C=EFIC(28)
EF29C=EFIC(29)
EF30C=EFIC(30)
EF31C=EFIC(31)
EF32C=EFIC(32)
EF33C=EFIC(33)
EF34C=EFIC(34)
EF35C=EFIC(35)
EF36C=EFIC(36)
EF37C=EFIC(37)
EF38C=EFIC(38)
EF39C=EFIC(39)
EF40C=EFIC(40)
EF41C=EFIC(41)
EF42C=EFIC(42)
EF43C=EFIC(43)
EF44C=EFIC(44)
EF45C=EFIC(45)
EF46C=EFIC(46)
EF47C=EFIC(47)

EF48C=EFIC(48)
EF49C=EFIC(49)
EF50C=EFIC(50)
EF51C=EFIC(51)
EF52C=EFIC(52)
EF53C=EFIC(53)
EF54C=EFIC(54)
EF55C=EFIC(55)
EF56C=EFIC(56)
EF57C=EFIC(57)
EF58C=EFIC(58)
EF59C=EFIC(59)
EF60C=EFIC(60)
EF61C=EFIC(61)
EF62C=EFIC(62)
EF63C=EFIC(63)
EF64C=EFIC(64)
EF65C=EFIC(65)
EF66C=EFIC(66)
EF67C=EFIC(67)
EF68C=EFIC(68)
EF69C=EFIC(69)
EF70C=EFIC(70)
EF71C=EFIC(71)
EF72C=EFIC(72)
EF73C=EFIC(73)
EF74C=EFIC(74)
EF75C=EFIC(75)
EF76C=EFIC(76)
EF77C=EFIC(77)
EF78C=EFIC(78)
EF79C=EFIC(79)
EF80C=EFIC(80)
EF81C=EFIC(81)
EF82C=EFIC(82)
EF83C=EFIC(83)
EF84C=EFIC(84)
EF85C=EFIC(85)
EF86C=EFIC(86)

C MÉTODO DE GARCIA

EF2G=EFIG(2)
EF3G=EFIG(3)
EF4G=EFIG(4)
EF5G=EFIG(5)
EF6G=EFIG(6)
EF7G=EFIG(7)
EF8G=EFIG(8)
EF9G=EFIG(9)
EF10G=EFIG(10)
EF11G=EFIG(11)
EF12G=EFIG(12)
EF13G=EFIG(13)
EF14G=EFIG(14)
EF15G=EFIG(15)
EF16G=EFIG(16)
EF17G=EFIG(17)
EF18G=EFIG(18)
EF19G=EFIG(19)
EF20G=EFIG(20)
EF21G=EFIG(21)
EF22G=EFIG(22)
EF23G=EFIG(23)
EF24G=EFIG(24)
EF25G=EFIG(25)
EF26G=EFIG(26)
EF27G=EFIG(27)
EF28G=EFIG(28)
EF29G=EFIG(29)
EF30G=EFIG(30)
EF31G=EFIG(31)
EF32G=EFIG(32)

Apêndice B – Programas Fortran 77

EF33G=EFIG(33)
EF34G=EFIG(34)
EF35G=EFIG(35)
EF36G=EFIG(36)
EF37G=EFIG(37)
EF38G=EFIG(38)
EF39G=EFIG(39)
EF40G=EFIG(40)
EF41G=EFIG(41)
EF42G=EFIG(42)
EF43G=EFIG(43)
EF44G=EFIG(44)
EF45G=EFIG(45)
EF46G=EFIG(46)
EF47G=EFIG(47)
EF48G=EFIG(48)
EF49G=EFIG(49)
EF50G=EFIG(50)
EF51G=EFIG(51)
EF52G=EFIG(52)
EF53G=EFIG(53)
EF54G=EFIG(54)
EF55G=EFIG(55)
EF56G=EFIG(56)
EF57G=EFIG(57)
EF58G=EFIG(58)
EF59G=EFIG(59)
EF60G=EFIG(60)
EF61G=EFIG(61)
EF62G=EFIG(62)
EF63G=EFIG(63)
EF64G=EFIG(64)
EF65G=EFIG(65)
EF66G=EFIG(66)
EF67G=EFIG(67)
EF68G=EFIG(68)
EF69G=EFIG(69)
EF70G=EFIG(70)
EF71G=EFIG(71)
EF72G=EFIG(72)
EF73G=EFIG(73)
EF74G=EFIG(74)
EF75G=EFIG(75)
EF76G=EFIG(76)
EF77G=EFIG(77)
EF78G=EFIG(78)
EF79G=EFIG(79)
EF80G=EFIG(80)
EF81G=EFIG(81)
EF82G=EFIG(82)
EF83G=EFIG(83)
EF84G=EFIG(84)
EF85G=EFIG(85)
EF86G=EFIG(86)

Apêndice B – Programas Fortran 77

Tabela B-2: Programa em Fortran 77 para calculo de eficiência de prato de dois passes, com fluxo cruzado e *downcomer* - pratos pares e ímpares com o modelo *SRM*

```

C  INICIO

NP = 86
NF = 31

C  ESPESSURA DO PRATO
T = 0.0034

C  DIAMETRO DO FURO ( = RAIO HIDRAULICO)
DH = 0.038

C  NUMERO DE VÁLVULAS
NV = 330

C  ESPESSURA DA VÁLVULA
VT= 0.00152

D = 2.258

C  AREA SLOT TOTAL
AS = 0.2664

DL = 8.73E-9
TS = 0.450

C  VERIFICAR QUE COMO HW > 0,0254 ENTÃO HWCSB=1.0
HW = 0.051
DG = 1.26E-6

C  CAMINHO DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO
Z = 0.784

C  ÁREA TOTAL
AT = ((3.1416*D**2)/4)

C  NUMERO DE COMPONENTES
IC = 6

C  INDICE DOS COMPONENTES CHAVES LEVE (IL) E PESADO (IH)
IL = 2
IH = 3

C  COMPOSICAO DA MISTURA PSEUDO-BINARIA
YLK(1)= Y(IL)/(Y(IL)+Y(IH))
XLK(1)= X(IL)/(X(IL)+X(IH))

SUM = 0.0
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
SUM4 = 0.0
SUM5 = 0.0
SUM6 = 0.0
SUM7 = 0.0
SUM8 = 0.0
SUM9 = 0.0
SUM10= 0.0

DO I=2 , NP

C  VERIFICAÇÃO DO PRATO IMPAR

IF(MOD(I,2).EQ.0) THEN

C  AREA SLOT TOTAL
AS = 0.2664

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   COMPRIMENTO DA CORDA # impar
    LW(I)= 1.35

C   AREA UM DONWCOMER LATERAL - # impar
    ADLI = 0.222

C   AREA DO DONWCOMER CENTRAL - # impar
    ADCI = 0.585

C   ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA) - # impar
    AA = AT - (2*ADLI+ADCI)

C   ÁREA LÍQUIDA (NET) - # impar
    ANI = AT - ADCI

C   VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET - # impar
    US(I) = QG(I)/ANI

    ELSE
C   PRATO PAR

C   RELAÇÃO A1/AA # par
    A1AA= AA/AT

C   COMPRIMENTO DA CORDA # par COM MODELO SRM
    LW(i)=2.25

C   AREA UM DONWCOMER LATERAL - # par
    ADLP = 0.281

C   AREA DO DONWCOMER CENTRAL - # par
    ADCP = 0.402

C   ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA) - # par
    AA = AT - (2*ADLP+ADCP)

C   ÁREA LÍQUIDA (NET) - # par
    ANP = AT - (2*ADLP)

C   VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET - # par
    US(I) = QG(I)/ANP

    END IF

C   VÁVULAS ABERTAS ( BOLLES 1982)
    FVO(I)=(1/(RHOG(I)*0.0624))
    UCBP(I) = ((VT/0.0254)*1.23*(1.3/6.154)*484*FVO(I))*0.5
    UCBO(I) = UCBP(I)*((6.154/0.821)*0.5)

C   AREA PERFURADA DO PRATO ( BASEADO NO DIAMETRO DO FURO)
    AH = (3.1416*((DH*3.2808)**2)/4)*NV

C   VELOCIDADE BASEADA NO DIAMETRO DO FURO
    UHD(I)= (((QG(I)*35.315)/(AH*(3.2808**2))))

C   FRAÇÃO DE VALULAS ABERTAS
    VO(I) = (UHD(I) - UCBP(I))/(UCBO(I)-UCBP(I))

    IF (VO(I) .GT. 1.0) THEN
        VO(I) =1.0
    ELSE
        VO(I)=VO(I)
    END IF

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

IF (VO(I) .LT. 0.9) THEN
  VO(I)= 1.0
ELSE
  VO(I)=VO(I)
END IF

C  FRAÇÃO DE ÁREA DE SLOT DO PRATO
FAP(I)=(AS/AA)*VO(I)

C  INCLINACAO DA CURVA DE EQUILIBRIO
YLK(I)=Y(IL+(I-1)*IC)/(Y(IL+(I-1)*IC)+Y(IH+(I-1)*IC))
XLK(I)=X(IL+(I-1)*IC)/(X(IL+(I-1)*IC)+X(IH+(I-1)*IC))
M(I) = (YLK(I)-YLK(I-1))/(XLK(I)-XLK(I-1))

C  FATOR DE ESGOTAMENTO
LAMB(I) = M(I)*((MG(I)/MWG(I))/(ML(I)/MWL(I)))

C  VAZÃO VOLUMETRICA DE LIQUIDO DIVIDIDA POR 2
QL1(I) = QL(I)/2

C  VELOC. SUP. BASEADA NA ÁREA ATIVA.
UA(I)=QG(I)/AA

C  FATOR FS
FS(I)=UA(I)*RHOG(I)**0.5

C  VELOCIDADE NOS FUIROS BASEADO NA AREA SLOT
UH(I) = QG(I)/AS

C  PARÂMETRO DE FLUXO
FP(I) = (ML(I)/MG(I))*(RHOG(I)/RHOL(I))**0.5

C  ALTURA DA ESPUMA

C  FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
RHOM(I)=(RHOG(I)/(RHOL(I)-RHOG(I)))
ALPH(I)=DEXP(-12.55*(UA(I)*RHOM(I)**0.5)**0.91)

C  FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
C=0.50+0.438*DEXP(-137.8*HW)

C  ALTURA DO LIQUIDO CLARO, BENNETT ET AL (1983) EM USO CHAN
HL1(I)=ALPH(I)*(HW+C*(QL1(I)/(LW(I)*ALPH(I))**0.67))

C  ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, DHULESIA (1984) EM USO GARCIA VV TRAY
HL(I)=0.42*(QL1(I)/(LW(I)*UA(I))*(RHOL(I)/RHOG(I))**0.5)**0.33*
& HW**0.67

C  ALTURA DO LÍQ. CLARO, BRAMBILLA ET AL. (1969)
HL2(I)=0.74*HW-0.0145*FS(I)+1.66*QL1(I)/LW(I)+0.003

C  ALTURA DO LÍQ. CLARO DINÂMICO, LOCKETT EQ 3.7
HLD(I)=HL(I)-UA(I)*RHOG(I)*(UH(I)-UA(I))/(RHOL(I)*9.81)

C  ALTURA DA ESPUMA, TODD & VAN WINKLE (1972)
HF(I)=0.076+32.6*FS(I)**2/(RHOL(I)-RHOG(I))+0.82*HL(I)

C  PROROSIDADE
E(I)=1-HL(I)/HF(I)

C  FATOR DE INUNDAÇÃO
C  FATOR DE CAPACIDADE, TREYBAL (1968)
C  CSB(I)=(0.0744*TS+0.0117)*(DLOG10(FP(I)**-1))+0.0304*TS+0.0153

C  FATOR DE CAPACIDADE, KISTER & HASS( 1990)
CSB(I)=0.0277*((DH*1000)**2*(SIGMA(I)*1000/RHOL(I))**0.125*
& (RHOG(I)/RHOL(I))**0.1*(TS/HL(I))**0.5

F(I)=1/(1+1.4*((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5)
C1(I)=0.445*(1-F(I))*(SIGMA(I)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I))**0.25
& -1.4*(QL(I)/AA)

```


Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C2(I)=0.356*(1-F(I))*(SIGMA(I)*1000/(RHOL(I)-RHOG(I)))*0.25

C   VELOCIDADE DE INUNDAÇÃO - LOCKETT
UF(I) = CSB(I)*(SIGMA(I)/0.02)**0.2*
& ((RHOL(I)-RHOG(I))/RHOG(I))**0.5*(FAP(I)/0.1)**0.44

C   FATOR DE INUNDAÇÃO
FF(I) = US(I)/UF(I)

C   FASE LÍQUIDA
C   ZONA 1
C   FRAÇÃO DE FUIROS PASSANDO VAPOR, PRADO 1990
C   XF(I)=1-1836.97*UH(I)**-1.602*(QL1(I)/LW(I))**0.524*HW**0.292
C   FIGURA 5-6 (PRADO,1987)
C   XF(I)=0.90
C   SEGUNDO GARCIA 1999, PG 183, FLC=0, XF=1,0
C   XF(I)=1.0
C   DIÂMETRO DO JET
DJ(I)=1.1*DH+0.25*HL(I)

C   VELOCIDADE DO JET COM "XF" AO INVÉS DE (1-FLC)
UJ(I)=(UH(I)*DH**2)/(XF(I)*DJ(I)**2)

C   REYNOLDS NO FURO - LOCKETT(1979)
REH(I)=DH*UH(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   ALTURA DO JET - GARCIA 2000
HJ(I)=1.1E-3*DH**0.2*REH(I)**0.46

C   TEMPO RESIDÊNCIA ZONA 1
TG1(I)=HJ(I)/UJ(I)

C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
FTM(I) = (RHOL(I)*MG(I)*DL**0.5)/
& (3.1416**0.5*RHOG(I)*ML(I))

C   NTUL ZONA 1
NL1(I) = (8*FTM(I)*TG1(I)**0.5)/DJ(I)

C   ZONA 2
C   DIÂMETRO DAS BOLHAS
C   DIÂMETRO DE BOLHAS PEQUENAS (GARCIA 2000)
DBS(I)=3.34/(UA(I)*9.8)**0.4*(SIGMA(I)/RHOL(I))**0.6*
& (MIL(I)/MIG(I))**0.1

C   DIÂMETRO DE BOLHAS GRANDES (GARCIA 2000) AO INVÉS DE
DBL(I)=DBS(I)*(0.83+41.5*(SIGMA(I)**0.6*
& (MIL(I)/RHOG(I))**0.1))

C   DIÂMETRO MÉDIO SAUTER DAS BOLHAS (GARCIA 2000) NOVA CORREL.
C   FATOR DE CORREÇÃO
IF (SIGMA(I) .GT. 5E-3) THEN
    SIGCSB(I)=1
ELSE
    SIGCSB(I)=3*SIGMA(I)**0.6
ENDIF

IF (MIL(I) .GT. 0.6E-3) THEN
    MILCSB(I)=4.13*MIL(I)**1.5
ELSE
    MILCSB(I)=1
ENDIF

C   COMO HW > 0,0254 ENTÃO HWCSB=1.0
FI3(I)= 1.0 * MILCSB(I) * SIGCSB(I)

C   CÁLCULO DE DBLS E DBSS
DBLS(I)=FI3(I)*0.605*DH**0.84*UH(I)**0.18/((QL1(I)/LW(I))**0.07)
DBSS(I)=FI3(I)*0.660*DH**0.84*UH(I)**0.085/((QL1(I)/LW(I))**0.08)

C   VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS - GARCIA 2000
C   NÚMERO DE EOTVOS

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

EO(I) = 9.8*(RHOL(I)-RHOG(I))*DBS(I)**2/SIGMA(I)
EO1(I) = 9.8*(RHOL(I)-RHOG(I))*DBSS(I)**2/SIGMA(I)

C  NÚMERO DE MORTON
MO(I) = 9.81*MIL(I)**4*(RHOL(I)-RHOG(I))/(RHOL(I)**2*
& SIGMA(I)**3)

C  CONSTANTE H
H(I)=4/3*EO(I)*MO(I)**-0.149*(MIL(I)/9.12E-4)**-0.14
H1(I)=4/3*EO1(I)*MO(I)**-0.149*(MIL(I)/9.12E-4)**-0.14

IF (H(I) .GT. 59.3) THEN
  J(I)=3.42*H(I)**0.441
ELSE
  J(I)=0.94*H(I)**0.757
ENDIF

IF (H1(I) .GT. 59.3) THEN
  J1(I)=3.42*H1(I)**0.441
ELSE
  J1(I)=0.94*H1(I)**0.757
ENDIF

C  VELOC. TERMINAL DAS BOLHAS PEQ NAS ZONAS 2 E 4 (GARCIA 2000)
USB(I)=MIL(I)/(RHOL(I)*DBS(I))*MO(I)**-0.149*(J(I)-0.857)

C  VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS DBSS NA ZONAS 5 (GARCIA 2000)
UBSS(I)=MIL(I)/(RHOL(I)*DBSS(I))*MO(I)**-0.149*(J1(I)-0.857)

C  FRAÇÃO DE BOLHAS PEQUENAS NA ESPUMA (GARCIA 2000)
C  PROP. DO AR E DA ÁGUA SIMULADOS NO ASPEN À 1 ATM E 25°C
AJ(I) = 1 - 0.463*(SIGMA(I)/0.07282)**0.6*
& (MIL(I)/9.12E-4*1.845E-5/MIG(I))**
& 0.1*(994.7/RHOL(I))**0.6*(1.183/RHOG(I))**0.1

C  NÃO FOI INCLUÍDA CORREÇÃO DE AJ QUANDO MIL>0.6E-3 E SIGMA<50E-3

C  VELOCIDADE DE SUBIDA DAS BOLHAS GRANDES (PRADO 1990)
ULB(I) = US(I)/((1 - AJ(I))*E(I)) - USB(I)*AJ(I)/(1-AJ(I))

C  TEMPO DE RESIDÊNCIA -
C  VERIFICAR SE HF > HJ SENÃO FAZER (HF-HJ) = HF
IF (HF(I) .GT. HJ(I)) THEN
  TG2S(I) = (HF(I)-HJ(I))/USB(I)
  TG2L(I) = (HF(I)-HJ(I))/ULB(I)
ELSE
  TG2S(I) = HF(I)/USB(I)
  TG2L(I) = HF(I)/ULB(I)
ENDIF

C  NUT ZONA 2
NL2S(I) = 12*FTM(I)*TG2S(I)**0.5/DBS(I)
NL2L(I) = 12*FTM(I)*TG2L(I)**0.5/DBL(I)

C  ZONA 3
C  TEMPO DE RESIDÊNCIA
ULB3(I) = US(I)/E(I)
TG3(I) = DBLS(I)/ULB3(I)

C  NUT ZONA 3
NL3(I) = 12*FTM(I)*TG3(I)**0.5/DBLS(I)

C  ZONA 4
C  TEMPO DE RESIDÊNCIA
C  VERIFICAR SE HF > DBLS SENÃO FAZER (HF-DBLS) = HF
IF (HF(I) .GT. DBLS(I)) THEN
  TG4S(I) = (HF(I)-DBLS(I))/USB(I)
  TG4L(I) = (HF(I)-DBLS(I))/ULB(I)
ELSE
  TG4S(I) = HF(I)/USB(I)
  TG4L(I) = HF(I)/ULB(I)
ENDIF

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   NUT ZONA 4
NL4S(I)=12*FTM(I)*TG4S(I)**0.5/DBS(I)
NL4L(I)=12*FTM(I)*TG4L(I)**0.5/DBL(I)

C   ZONA 5
TG5(I)=HF(I)/ULB3(I)
NL5(I)=12*FTM(I)*TG5(I)**0.5/DBSS(I)

C   ESTIMATIVA DA QUANTIDADE DE FUROS EM REGIME JET

C   FJ (PRADO, 1990)
UA0(I)=0.1*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*HW**0.132*
& DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0.27
UA100(I)=1.1*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*HW**0.132*
& DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0.27
FJ1(I)=(UA(I)-UA0(I))/(UA100(I)-UA0(I))

C   FJ (PRADO, 1987)
UATP(I)=(0.04302*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*SIGMA(I)**0.06*
& FAP(I)**0.25*(QL1(I)/LW(I))**0.05*DH**0.1)

UA0P(I)=10.38*HW**0.132*DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0
UA100P(I)=114*HW**0.132*DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0

FJP(I)=(UA(I)*DH**0.27/(103.65*FAP(I)*(HW**0.5*(QL1(I)/LW(I))**
& 0.27))-0.1

C   CONSIDERANDO FJ=60% QDO UA=UATP TRANSIÇÃO (PRADO, 1987)
C   FJ(I)=UA(I)*0.60/UATP(I)

C   FJ (PRADO, 1990)
FJ(I)= FJ1(I)

C   FJ (PRADO, 1987)
C   FJ(I)= FJP(I)

C   CONSTANTES FSB E FLB
FSB=165.65*DH**1.32*FAP(I)**1.33
FLB(I)=1-FJ(I)-FSB

C   CALCULO DA EFICIENCIA DA FASE LÍQUIDA

C   EFICIENCIA FASE LÍQUIDA TODO PRATO
NLFJ(i)=NL1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL2S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL2L(i)))))
NLFLB(i)= NL3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL4S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL4L(i)))))

EL(I)=(FJ(I)*(1-DEXP(-NLFJ(I)))+FLB(I)
& *(1-DEXP(-NLFLB(I)))+ FSB*(1-DEXP(-NL5(I)))

C   FASE GÁS

C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
FTMG(I)=(ML(I)*RHOG(I))/(MG(I)*RHOL(I))

C   ZONA1
C   REYNOLDS NO JET
REJ(I)=UJ(I)*DJ(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   SCHIMIDT NA FASE GÁS
SCG(I)=MIG(I)/(RHOG(I)*DG)

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
KG1(I)=0.046*(DG/DJ(I))*REJ(I)**0.96*SCG(I)**0.44

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
KL1(I)=1.13*(DL/TG1(I))**0.5

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   NTU ZONA 1
    NG1(I)=FTMG(I)*KG1(I)*NL1(I)/KL1(I)

C   ZONA 2,3,4,5
    PEG2S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
    PEG2L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
    PEG3(I)=DBLS(I)*ULB3(I)/DG
    PEG4S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
    PEG4L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
    PEG5(I)=DBSS(I)*UBSS(I)/DG

    IF (PEG2S(I) .GT. 200) THEN
        SH2S(I)=17.9
    ELSE
        SH2S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2S(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG2L(I) .GT. 200) THEN
        SH2L(I)=17.9
    ELSE
        SH2L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG2L(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG3(I) .GT. 200) THEN
        SH3(I)=17.9
    ELSE
        SH3(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG3(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG3(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG4S(I) .GT. 200) THEN
        SH4S(I)=17.9
    ELSE
        SH4S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4S(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG4L(I) .GT. 200) THEN
        SH4L(I)=17.9
    ELSE
        SH4L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4L(I)))**2
    ENDIF

    IF (PEG5(I) .GT. 200) THEN
        SH5(I)=17.9
    ELSE
        SH5(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG5(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG5(I)))**2
    ENDIF

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
    KG2S(I)=SH2S(I)*DG/DBS(I)
    KG2L(I)=SH2L(I)*DG/DBL(I)
    KG3(I)=SH3(I)*DG/DBLS(I)
    KG4S(I)=SH4S(I)*DG/DBS(I)
    KG4L(I)=SH4L(I)*DG/DBL(I)
    KG5(I)=SH5(I)*DG/DBSS(I)

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
    KL2S(I)=1.13*(DL/TG2S(I))**0.5
    KL2L(I)=1.13*(DL/TG2L(I))**0.5
    KL3(I)=1.13*(DL/TG3(I))**0.5
    KL4S(I)=1.13*(DL/TG4S(I))**0.5
    KL4L(I)=1.13*(DL/TG4L(I))**0.5
    KL5(I)=1.13*(DL/TG5(I))**0.5

C   NUT ZONAS 2,3,4 E 5
    NG2S(I)=FTMG(I)*KG2S(I)*NL2S(I)/KL2S(I)
    NG2L(I)=FTMG(I)*KG2L(I)*NL2L(I)/KL2L(I)
    NG3(I)=FTMG(I)*KG3(I)*NL3(I)/KL3(I)

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

NG4S(I)=FTMG(I)*KG4S(I)*NL4S(I)/KL4S(I)
NG4L(I)=FTMG(I)*KG4L(I)*NL4L(I)/KL4L(I)
NG5(I)=FTMG(I)*KG5(I)*NL5(I)/KL5(I)

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA NA FASE GÁS
C   EFICIÊNCIA NA FASE GÁS TODO PRATO

    NGFJ(I)=NG1(I)-DLOG(1-(AJ(I)*(1-DEXP(-NG2S(I)))+
& (1-AJ(I))*(1-DEXP(-NG2L(I))))))
    NGFLB(I)= NG3(I)-DLOG(1-(AJ(I)*(1-DEXP(-NG4S(I)))+
& (1-AJ(I))*(1-DEXP(-NG4L(I))))))

    EG(I)=(FJ(I)*(1-DEXP(-NGFJ(I))))+FLB(I)
& *(1-DEXP(-NGFLB(I)))+FSB*(1-DEXP(-NG5(I)))

C   MÉTODO DE O'CONNELL

    KBD(I)=Y(IL+(I-1)*IC)/X(IL+(I-1)*IC)
    KCI(I)=Y(IH+(I-1)*IC)/X(IH+(I-1)*IC)

    VOLA(I)= KBD(I)/KCI(I)

    EC(I)=(9.05*((MIL(I)*VOLA(I)))**0.245)/100

C   MÉTODO DE CHAN E FAIR (1984)
C   TEMPO DE RESIDENCIA DO VAPOR
    TG(I)=((1-ALPH(I))*HL(I))/(ALPH(I)*UA(I))

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE VAPOR
    NG(I)=(10300-8670*FF(I))*FF(I)*SQRT(DG/HL1(I))*TG(I)

C   TEMPO DE RESIDENCIA DO LIQUIDO
    TL(I)=HL(I)*Z*LW(I)/QL1(I)

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE LIQUIDA
    NL(I)=19700*DL**0.5*(0.4*FS(I)+0.17)*TL(I)

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA GLOBAL
    NOG(I)=1/((LAMB(I)/NL(I))+(1/NG(I)))

C   EFICIENCIA DE PONTO
    EG1(I)=1-EXP(-NOG(I))

C   MODELO DE MISTURA(EG PARA EMV)
C   DIFUSIVIDADE TURBULENTA, MOLNAR (1974)
    DE(I)=(0.0005+0.01285*UA(I)+6.32*QL1(I)/LW(I)+0.312*HW)**2

C   VERIFICAÇÃO DO PRATO IMPAR

    IF(MOD(I,2).EQ.0) THEN

C   NÚMERO DE PECLET, LOCKETT
    PE(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
    PE1(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL1(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))

    IF (PE(I) .GT. 20) THEN
C   CÁLCULO DE EMV PARA PLUG FLOW
    EMV(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG(I))-1)/LAMB(I)
    ELSE
C   FATOR N
    N(I)=(PE(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*EG(I)/PE(I)))-1)
C   CÁLCULO DE N+PE=CTET
    CTET(I)=N(I)+PE(I)
C   CÁLCULO DE EMV PARA MISTURA PARCIAL
    EMV(I)=EG(I)*((1-EXP(-CTET(I)))/(CTET(I))*
& (1+CTET(I)/N(I)))+

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

& (EXP(N(I))-1)/N(I)*(1+N(I)/CTET(I))
ENDIF

IF (PE1(I) .GT. 20) THEN
C   CÁLCULO DE EMV1 PARA PLUG FLOW
EMV1(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG1(I))-1)/LAMB(I)
ELSE
C   FATOR N1
N1(I)=(PE1(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*EG1(I)/PE1(I)))-1)
C   CÁLCULO DE N1+PE1=T1
CTET1(I)=N1(I)+PE1(I)
C   CÁLCULO DE EMV1 PARA MISTURA PARCIAL
EMV1(I)=EG1(I)*((1-EXP(-CTET1(I)))/(CTET1(I)*
& (1+CTET1(I)/N1(I)))+
& (EXP(N1(I))-1)/N1(I)*(1+N1(I)/CTET1(I)))
ENDIF

ELSE

C   PRATO PAR

C   NÚMERO DE PECLET, LOCKETT

PE(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
& *(1-(LW(I)/D)**2)**0.5
PE1(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL1(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
& *(1-(LW(I)/D)**2)**0.5

IF (PE(I) .GT. 20) THEN
C   CÁLCULO DE EMV PARA PLUG FLOW
EMV(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG(I)*A1AA)-1)/LAMB(I)
ELSE
C   FATOR N
N(I)=(PE(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*A1AA*EG(I)/PE(I)))-1)
C   CÁLCULO DE N+PE=CTET
CTET(I)=N(I)+PE(I)
C   CÁLCULO DE EMV PARA MISTURA PARCIAL
EMVI(I)=EG(I)*((1-EXP(-CTET(I)))/(CTET(I)*
& (1+CTET(I)/N(I)))+
& (EXP(N(I))-1)/N(I)*(1+N(I)/CTET(I)))
EMV(I) = EMVI(I)*A1AA
ENDIF

IF (PE1(I) .GT. 20) THEN
C   CÁLCULO DE EMV1 PARA PLUG FLOW
EMV1(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG1(I)*A1AA)-1)/LAMB(I)
ELSE
C   FATOR N1
N1(I)=(PE1(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*A1AA*EG1(I)/PE1(I)))-1)
C   CÁLCULO DE N1+PE1=T1
CTET1(I)=N1(I)+PE1(I)
C   CÁLCULO DE EMV1 PARA MISTURA PARCIAL
EMV1I(I)=EG1(I)*((1-EXP(-CTET1(I)))/(CTET1(I)*
& (1+CTET1(I)/N1(I)))+
& (EXP(N1(I))-1)/N1(I)*(1+N1(I)/CTET1(I)))
EMV1(I) = EMV1I(I)*A1AA
ENDIF
END IF

HB(I)=HL(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL(I)))**0.5*
& (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)
HB1(I)=HL1(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL1(I)))**0.5*
& (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)

LE(I)=1E-8*(HB(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2
LE1(I)=1E-8*(HB1(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2

C   EFICIÊNCIA APARENTE A PARTIR DA EFIC. DRY, COLBURN (1936)
EMVA(I)=EMV(I)/(1+LE(I)*EMV(I))
EMVA1(I)=EMV1(I)/(1+LE1(I)*EMV1(I))

C   ESTIMATIVA DE WEEPING (LOCKETT PG. 115)

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

FRH(I)=UH(I)*(RHOG(I)/(9.81*HL(I)*(RHOL(I))**0.5
WEEP(I)=0.020*FRH(I)**-1-0.030

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (CHAN = EMVA1(I))
    EFI(I) = emva1(I)

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (GARCIA=EMVA(I))
    EFIG(I) = emva(i)

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (OCONNEL= EC(I))
    EFIC(I) = ec(I)

C   EFICIÊNCIA GLOBAL
    EOG(I)=DLOG(1+EMVA(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
    EOG3(I)=DLOG(1+EG(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
    EOG4(I)=DLOG(1+EMVA1(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
    EOG5(I)=DLOG(1+EG1(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
    EOG6(I)=EC(I)

    SUM1 = SUM1 + FS(I)
    FSAVG = SUM1/(NP-1)

    SUM2 = SUM2 + LAMB(I)
    LAMBVG = SUM2/(NP-1)

    SUM = SUM + EOG(I)
    EOGC = SUM/(NP-1)

    SUM3 = SUM3+ EOG3(I)
    EOGC3 = SUM3/(NP-1)

    SUM4 = SUM4 + EOG4(I)
    EOGC4 = SUM4/(NP-1)

    SUM5 = SUM5 + EOG5(I)
    EOGC5 = SUM5/(NP-1)

    SUM6 = SUM6 + EOG6(I)
    EOGC6 = SUM6/(NP-1)

    SUM7 = SUM7 + WEEP(I)
    WEEPVG = SUM7/(NP-1)

    SUM8 = SUM8 + FF(I)
    FFAVG = SUM8/(NP-1)

    SUM9 = SUM9 + FJ(I)
    FJAVG = SUM9/(NP-1)

    SUM10 = SUM10 + FJ1(I)
    FJ1AVG = SUM10/(NP-1)

    END DO

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA GLOBAL POR SEÇÕES
    SUM = 0.0
    DO I = 2, NF-1
        SUM = SUM + EOG(I)
    END DO
    EOGC1 = SUM/(NF-2)

    SUM = 0.0
    DO I = NF, NP
        SUM = SUM + EOG(I)
    END DO
    EOGC2 = SUM/(NP-NF+1)

C   VARIÁVEIS DE SAÍDA
    M51=M(51)
    LAMB51=LAMB(51)

C   ZONA 1-LÍQUIDO

```

```

US51=US(51)
UA51=UA(51)
FP51=FP(51)
FS51=FS(51)
UH51=UH(51)
HL51=HL(51)
HL151=HL1(51)
HL251=HL2(51)
E51=E(51)
HF51=HF(51)
CSB51=CSB(51)
F51=F(51)
C151=C1(51)
C251=C2(51)
UF51=UF(51)
UF20=UF(20)
VO51=VO(51)
FAP51=FAP(51)
FF51=FF(51)
XF51=XF(51)
DJ51=DJ(51)
UJ51=UJ(51)
REH51=REH(51)
HJ51=HJ(51)
NL151=NL1(51)

```

C ZONA 2 LÍQUIDO

```

DBS51=DBS(51)
DBL51=DBL(51)
J51=J(51)
USB51=USB(51)
AJ51=AJ(51)
ULB51=ULB(51)
UBSS51=UBSS(51)
NL2S51=NL2S(51)
NL2L51=NL2L(51)
TG2L51=TG2L(51)

```

C ZONA 3 LÍQUIDO

```

FI351=FI3(51)
DBLS51=DBLS(51)
DBSS51=DBSS(51)
NL351=NL3(51)

```

C ZONA 4 LÍQUIDO

```

NL4S51=NL4S(51)
NL4L51=NL4L(51)
TG4L51=TG4L(51)

```

C ZONA 5 LÍQUIDO

```

NL551=NL5(51)

```

```

UA051=UA0(51)
UA1051=UA100(51)
FJ51=FJ(51)
FJ151=FJ1(51)
UATP51=UATP(51)
UA0P51=UA0P(51)
UA1P51=UA100P(51)
FJP51=FJP(51)
RHOG51=RHOG(51)
RHOL51=RHOL(51)
QG51=QG(51)
QL51=QL(51)
FLB51=FLB(51)
EL51=EL(51)

```

C FASE GÁS

Apêndice B – Programas Fortran 77

NG151=NG1(51)
 NG2S51=NG2S(51)
 NG2L51=NG2L(51)
 NG351=NG3(51)
 NG4S51=NG4S(51)
 NG4L51=NG4L(51)
 NG551=NG5(51)
 NGFJ51=NGFJ(51)
 NGFL51=NGFLB(51)

TG151=TG1(51)
 TG2S51=TG2S(51)
 TG351=TG3(51)
 TG4S51=TG4S(51)
 TG551=TG5(51)

EG51=EG(51)
 PE51=PE(51)
 EMV51=EMV(51)
 LE51=LE(51)
 EMVA51=EMVA(51)
 FRH51=FRH(51)

EOG51=EOG(51)

C MÉTODO DE CHAN E FAIR

NG51=NG(51)
 NL51=NL(51)
 EG151=EG1(51)
 PE151=PE1(51)
 EMV151=EMV1(51)
 LE151=LE1(51)
 EMVA15=EMVA1(51)

EF2=EFI(2)
 EF3=EFI(3)
 EF4=EFI(4)
 EF5=EFI(5)
 EF6=EFI(6)
 EF7=EFI(7)
 EF8=EFI(8)
 EF9=EFI(9)
 EF10=EFI(10)
 EF11=EFI(11)
 EF12=EFI(12)
 EF13=EFI(13)
 EF14=EFI(14)
 EF15=EFI(15)
 EF16=EFI(16)
 EF17=EFI(17)
 EF18=EFI(18)
 EF19=EFI(19)
 EF20=EFI(20)
 EF21=EFI(21)
 EF22=EFI(22)
 EF23=EFI(23)
 EF24=EFI(24)
 EF25=EFI(25)
 EF26=EFI(26)
 EF27=EFI(27)
 EF28=EFI(28)
 EF29=EFI(29)
 EF30=EFI(30)
 EF31=EFI(31)
 EF32=EFI(32)
 EF33=EFI(33)
 EF34=EFI(34)
 EF35=EFI(35)
 EF36=EFI(36)
 EF37=EFI(37)
 EF38=EFI(38)
 EF39=EFI(39)

EF40=EFI(40)
EF41=EFI(41)
EF42=EFI(42)
EF43=EFI(43)
EF44=EFI(44)
EF45=EFI(45)
EF46=EFI(46)
EF47=EFI(47)
EF48=EFI(48)
EF49=EFI(49)
EF50=EFI(50)
EF51=EFI(51)
EF52=EFI(52)
EF53=EFI(53)
EF54=EFI(54)
EF55=EFI(55)
EF56=EFI(56)
EF57=EFI(57)
EF58=EFI(58)
EF59=EFI(59)
EF60=EFI(60)
EF61=EFI(61)
EF62=EFI(62)
EF63=EFI(63)
EF64=EFI(64)
EF65=EFI(65)
EF66=EFI(66)
EF67=EFI(67)
EF68=EFI(68)
EF69=EFI(69)
EF70=EFI(70)
EF71=EFI(71)
EF72=EFI(72)
EF73=EFI(73)
EF74=EFI(74)
EF75=EFI(75)
EF76=EFI(76)
EF77=EFI(77)
EF78=EFI(78)
EF79=EFI(79)
EF80=EFI(80)
EF81=EFI(81)
EF82=EFI(82)
EF83=EFI(83)
EF84=EFI(84)
EF85=EFI(85)
EF86=EFI(86)

C MÉTODO DE OCONNEL

EF2C=EFIC(2)
EF3C=EFIC(3)
EF4C=EFIC(4)
EF5C=EFIC(5)
EF6C=EFIC(6)
EF7C=EFIC(7)
EF8C=EFIC(8)
EF9C=EFIC(9)
EF10C=EFIC(10)
EF11C=EFIC(11)
EF12C=EFIC(12)
EF13C=EFIC(13)
EF14C=EFIC(14)
EF15C=EFIC(15)
EF16C=EFIC(16)
EF17C=EFIC(17)
EF18C=EFIC(18)
EF19C=EFIC(19)
EF20C=EFIC(20)
EF21C=EFIC(21)
EF22C=EFIC(22)
EF23C=EFIC(23)
EF24C=EFIC(24)

Apêndice B – Programas Fortran 77

EF25C=EFIC(25)
EF26C=EFIC(26)
EF27C=EFIC(27)
EF28C=EFIC(28)
EF29C=EFIC(29)
EF30C=EFIC(30)
EF31C=EFIC(31)
EF32C=EFIC(32)
EF33C=EFIC(33)
EF34C=EFIC(34)
EF35C=EFIC(35)
EF36C=EFIC(36)
EF37C=EFIC(37)
EF38C=EFIC(38)
EF39C=EFIC(39)
EF40C=EFIC(40)
EF41C=EFIC(41)
EF42C=EFIC(42)
EF43C=EFIC(43)
EF44C=EFIC(44)
EF45C=EFIC(45)
EF46C=EFIC(46)
EF47C=EFIC(47)
EF48C=EFIC(48)
EF49C=EFIC(49)
EF50C=EFIC(50)
EF51C=EFIC(51)
EF52C=EFIC(52)
EF53C=EFIC(53)
EF54C=EFIC(54)
EF55C=EFIC(55)
EF56C=EFIC(56)
EF57C=EFIC(57)
EF58C=EFIC(58)
EF59C=EFIC(59)
EF60C=EFIC(60)
EF61C=EFIC(61)
EF62C=EFIC(62)
EF63C=EFIC(63)
EF64C=EFIC(64)
EF65C=EFIC(65)
EF66C=EFIC(66)
EF67C=EFIC(67)
EF68C=EFIC(68)
EF69C=EFIC(69)
EF70C=EFIC(70)
EF71C=EFIC(71)
EF72C=EFIC(72)
EF73C=EFIC(73)
EF74C=EFIC(74)
EF75C=EFIC(75)
EF76C=EFIC(76)
EF77C=EFIC(77)
EF78C=EFIC(78)
EF79C=EFIC(79)
EF80C=EFIC(80)
EF81C=EFIC(81)
EF82C=EFIC(82)
EF83C=EFIC(83)
EF84C=EFIC(84)
EF85C=EFIC(85)
EF86C=EFIC(86)

C MÉTODO DE GARCIA

EF2G=EFIG(2)
EF3G=EFIG(3)
EF4G=EFIG(4)
EF5G=EFIG(5)
EF6G=EFIG(6)
EF7G=EFIG(7)
EF8G=EFIG(8)
EF9G=EFIG(9)

EF10G=EFIG(10)
EF11G=EFIG(11)
EF12G=EFIG(12)
EF13G=EFIG(13)
EF14G=EFIG(14)
EF15G=EFIG(15)
EF16G=EFIG(16)
EF17G=EFIG(17)
EF18G=EFIG(18)
EF19G=EFIG(19)
EF20G=EFIG(20)
EF21G=EFIG(21)
EF22G=EFIG(22)
EF23G=EFIG(23)
EF24G=EFIG(24)
EF25G=EFIG(25)
EF26G=EFIG(26)
EF27G=EFIG(27)
EF28G=EFIG(28)
EF29G=EFIG(29)
EF30G=EFIG(30)
EF31G=EFIG(31)
EF32G=EFIG(32)
EF33G=EFIG(33)
EF34G=EFIG(34)
EF35G=EFIG(35)
EF36G=EFIG(36)
EF37G=EFIG(37)
EF38G=EFIG(38)
EF39G=EFIG(39)
EF40G=EFIG(40)
EF41G=EFIG(41)
EF42G=EFIG(42)
EF43G=EFIG(43)
EF44G=EFIG(44)
EF45G=EFIG(45)
EF46G=EFIG(46)
EF47G=EFIG(47)
EF48G=EFIG(48)
EF49G=EFIG(49)
EF50G=EFIG(50)
EF51G=EFIG(51)
EF52G=EFIG(52)
EF53G=EFIG(53)
EF54G=EFIG(54)
EF55G=EFIG(55)
EF56G=EFIG(56)
EF57G=EFIG(57)
EF58G=EFIG(58)
EF59G=EFIG(59)
EF60G=EFIG(60)
EF61G=EFIG(61)
EF62G=EFIG(62)
EF63G=EFIG(63)
EF64G=EFIG(64)
EF65G=EFIG(65)
EF66G=EFIG(66)
EF67G=EFIG(67)
EF68G=EFIG(68)
EF69G=EFIG(69)
EF70G=EFIG(70)
EF71G=EFIG(71)
EF72G=EFIG(72)
EF73G=EFIG(73)
EF74G=EFIG(74)
EF75G=EFIG(75)
EF76G=EFIG(76)
EF77G=EFIG(77)
EF78G=EFIG(78)
EF79G=EFIG(79)
EF80G=EFIG(80)
EF81G=EFIG(81)
EF82G=EFIG(82)

Apêndice B – Programas Fortran 77

EF83G=EFIG(83)
EF84G=EFIG(84)
EF85G=EFIG(85)
EF86G=EFIG(86)

Apêndice B – Programas Fortran 77

Tabela B-3: Programa em Fortran 77 para cálculo de eficiência de prato de dois passes convertido para um passe utilizando C_E proposto por Klemola e Ilme (1997b)

```

C  INICIO

NP = 86
NF = 31

C  ESPESSURA DO PRATO
T = 0.0034

C  DIAMETRO DO FURO ( = RAIO HIDRAULICO)
DH = 0.038

C  NUMERO DE VÁLVULAS
NV = 330

C  ESPESSURA DA VÁLVULA
VT= 0.00152

D = 2.258

C  AREA SLOT TOTAL
AS = 0.2664

DL = 8.73E-9
TS = 0.450

C  VERIFICAR QUE COMO HW > 0,0254 ENTÃO HWCSB=1.0
HW = 0.051
DG = 1.26E-6

C  CAMINHO DO LÍQUIDO SOBRE O PRATO
Z = 1.414

C  ÁREA TOTAL
AT = ((3.1416*D**2)/4)

C  NUMERO DE COMPONENTES
IC = 6

C  INDICE DOS COMPONENTES CHAVES LEVE (IL) E PESADO (IH)
IL = 2
IH = 3

C  COMPOSICAO DA MISTURA PSEUDO-BINARIA
YLK(1)= Y(IL)/(Y(IL)+Y(IH))
XLK(1)= X(IL)/(X(IL)+X(IH))

SUM = 0.0
SUM1 = 0.0
SUM2 = 0.0
SUM3 = 0.0
SUM4 = 0.0
SUM5 = 0.0
SUM6 = 0.0
SUM7 = 0.0
SUM8 = 0.0
SUM9 = 0.0
SUM10= 0.0

DO I=2 , NP

C  PRATO PAR E IMPAR COM SRM

C  AREA UM DONWCOMER LATERAL = CENTRAL- # par
AD = 0.516

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C  ÁREA DE BORBULHAMENTO (=ATIVA) - # par
AA = AT - (2*AD)

C  ÁREA LÍQUIDA (NET) - # par
ANP = AT - AD

C  COMPRIMENTO DA CORDA # par

LW1(I) = 1.760

FAR(I) = (1-(LW1(I)/D)**2)**0.5
FAR1(I) = 2*(LW1(I)/D)*FAR(I)
FAR2(I) = ATAN(FAR(I)/(LW1(I)/D))
FAR3(I) = (LW1(I)/D)*FAR(I)
FAR4(I) = FAR2(I)+FAR3(I)
A1AA = FAR1(I)/FAR4(I)

C  COMPRIMENTO DA CORDA # par COM MODELO SRM

LW(i)=LW1(i)

C  VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET - # par
US(I) = QG(I)/ANP

C  VELOC SUP BASEADO NA ÁREA NET - # par
US(I) = QG(I)/ANP

C  VÁVULAS ABERTAS ( BOLLES 1982)
FVO(I)=(1/(RHOG(I)*0.0624))
UCBP(I) = ((VT/0.0254)*1.23*(1.3/6.154)*484*FVO(I))**0.5
UCBO(I) = UCBP(I)*((6.154/0.821)**0.5)

C  AREA PERFURADA DO PRATO ( BASEADO NO DIAMETRO DO FURO)
AH = (3.1416*((DH*3.2808)**2)/4)*NV

C  VELOCIDADE BASEADA NO DIAMETRO DO FURO
UHD(I) = ((QG(I)*35.315)/(AH*(3.2808**2)))

C  FRAÇÃO DE VALULAS ABERTAS
VO(I) = (UHD(I) - UCBP(I))/(UCBO(I)-UCBP(I))

IF (VO(I) .GT. 1.0) THEN
  VO(I) =1.0
ELSE
  VO(I)=VO(I)
END IF

IF (VO(I) .LT. 0.9) THEN
  VO(I)= 1.0
ELSE
  VO(I)=VO(I)
END IF

C  FRAÇÃO DE ÁREA DE SLOT DO PRATO
FAP(I)=(AS/AA)*VO(I)

C  INCLINACAO DA CURVA DE EQUILIBRIO
YLK(I)=Y(IL+(I-1)*IC)/(Y(IL+(I-1)*IC)+Y(IH+(I-1)*IC))
XLK(I)=X(IL+(I-1)*IC)/(X(IL+(I-1)*IC)+X(IH+(I-1)*IC))
M(I) = (YLK(I)-YLK(I-1))/(XLK(I)-XLK(I-1))

C  FATOR DE ESGOTAMENTO
LAMB(I) = M(I)*((MG(I)/MWG(I))/(ML(I)/MWL(I)))

C  VAZÃO VOLUMETRICA DE LIQUIDO DIVIDIDA POR 2
QL1(I) = QL(I)

C  VELOC. SUP. BASEADA NA ÁREA ATIVA.
UA(I)=QG(I)/AA

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

- C FATOR FS
 $FS(I) = UA(I) * RHOG(I) ** 0.5$
- C VELOCIDADE NOS FUROS BASEADO NA AREA SLOT
 $UH(I) = QG(I) / AS$
- C PARÂMETRO DE FLUXO
 $FP(I) = (ML(I) / MG(I)) * (RHOG(I) / RHOL(I)) ** 0.5$
- C ALTURA DA ESPUMA
- C FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
 $RHOM(I) = (RHOG(I) / (RHOL(I) - RHOG(I)))$
 $ALPH(I) = DEXP(-12.55 * UA(I) * RHOM(I) ** 0.5) ** 0.91$
- C FATOR PARA CALCULO DA ALTURA DO LIQUIDO CLARO
 $C = 0.50 + 0.438 * DEXP(-137.8 * HW)$
- C ALTURA DO LIQUIDO CLARO, BENNETT *ET AL* (1983) EM USO CHAN
 $HL1(I) = ALPH(I) * (HW + C * (QL1(I) / (LW(I) * ALPH(I)))) ** 0.67$
- C ALTURA DO LÍQUIDO CLARO, DHULESIA (1984) EM USO GARCIA VV TRAY
 $HL(I) = 0.42 * (QL1(I) / (LW(I) * UA(I)) * (RHOL(I) / RHOG(I)) ** 0.5) ** 0.33 *$
 $\& HW ** 0.67$
- C ALTURA DO LÍQ. CLARO, BRAMBILLA *ET AL.* (1969)
 $HL2(I) = 0.74 * HW - 0.0145 * FS(I) + 1.66 * QL1(I) / LW(I) + 0.003$
- C ALTURA DO LÍQ. CLARO DINÂMICO, LOCKETT EQ 3.7
 $HLD(I) = HL(I) - UA(I) * RHOG(I) * (UH(I) - UA(I)) / (RHOL(I) * 9.81)$
- C ALTURA DA ESPUMA, TODD & VAN WINKLE (1972)
 $HF(I) = 0.076 + 32.6 * FS(I) ** 2 / (RHOL(I) - RHOG(I)) + 0.82 * HL(I)$
- C PROROSIDADE
 $E(I) = 1 - HL(I) / HF(I)$
- C FATOR DE INUNDAÇÃO
- C FATOR DE CAPACIDADE, TREYBAL (1968)
- C $CSB(I) = (0.0744 * TS + 0.0117) * (DLOG10(FP(I) ** -1)) + 0.0304 * TS + 0.0153$
- C FATOR DE CAPACIDADE, KISTER & HASS(1990)
 $CSB(I) = 0.0277 * ((DH * 1000) ** 2 * (SIGMA(I) * 1000 / RHOL(I))) ** 0.125 *$
 $\& (RHOG(I) / RHOL(I)) ** 0.1 * (TS / HL(I)) ** 0.5$
 $F(I) = 1 / (1 + 1.4 * ((RHOL(I) - RHOG(I)) / RHOG(I)) ** 0.5)$
 $C1(I) = 0.445 * (1 - F(I)) * (SIGMA(I) * 1000 / (RHOL(I) - RHOG(I))) ** 0.25$
 $\& -1.4 * (QL(I) / AA)$
 $C2(I) = 0.356 * (1 - F(I)) * (SIGMA(I) * 1000 / (RHOL(I) - RHOG(I))) ** 0.25$
- C VELOCIDADE DE INUNDAÇÃO - LOCKETT
 $UF(I) = CSB(I) * (SIGMA(I) / 0.02) ** 0.2 *$
 $\& ((RHOL(I) - RHOG(I)) / RHOG(I)) ** 0.5 * (FAP(I) / 0.1) ** 0.44$
- C FATOR DE INUNDAÇÃO
 $FF(I) = US(I) / UF(I)$
- C FASE LÍQUIDA
- C ZONA 1
- C FRAÇÃO DE FUROS PASSANDO VAPOR, PRADO 1990
- C $XF(I) = 1 - 1836.97 * UH(I) ** -1.602 * (QL1(I) / LW(I)) ** 0.524 * HW ** 0.292$
- C FIGURA 5-6 (PRADO, 1987)
- C $XF(I) = 0.90$
- C SEGUNDO GARCIA 1999, PG 183, FLC=0, XF=1,0
 $XF(I) = 1.0$
- C DIÂMETRO DO JET
 $DJ(I) = 1.1 * DH + 0.25 * HL(I)$
- C VELOCIDADE DO JET COM "XF" AO INVES DE (1-FLC)
 $UJ(I) = (UH(I) * DH ** 2) / (XF(I) * DJ(I) ** 2)$

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   REYNOLDS NO FURO - LOCKETT(1979)
    REH(I)=DH*UH(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   ALTURA DO JET - GARCIA 2000
    HJ(I)=1.1E-3*DH**0.2*REH(I)**0.46

C   TEMPO RESIDÊNCIA ZONA 1
    TG1(I)=HJ(I)/UJ(I)

C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
    FTM(I) = (RHOL(I)*MG(I)*DL**0.5)/
    & (3.1416**0.5*RHOG(I)*ML(I))

C   NTUL ZONA 1
    NL1(I) = (8*FTM(I)*TG1(I)**0.5)/DJ(I)

C   ZONA 2
C   DIÂMETRO DAS BOLHAS
C   DIÂMETRO DE BOLHAS PEQUENAS (GARCIA 2000)
    DBS(I)=3.34/(UA(I)*9.8)**0.4*(SIGMA(I)/RHOL(I))**0.6*
    & (MIL(I)/MIG(I))**0.1

C   DIÂMETRO DE BOLHAS GRANDES (GARCIA 2000) AO INVÉS DE
    DBL(I)=DBS(I)*(0.83+41.5*(SIGMA(I)**0.6*
    & (MIL(I)/RHOG(I))**0.1))

C   DIÂMETRO MÉDIO SAUTER DAS BOLHAS (GARCIA 2000) NOVA CORREL.
C   FATOR DE CORREÇÃO
    IF (SIGMA(I) .GT. 5E-3) THEN
        SIGCSB(I)=1
    ELSE
        SIGCSB(I)=3*SIGMA(I)**0.6
    ENDIF

    IF (MIL(I) .GT. 0.6E-3) THEN
        MILCSB(I)=4.13*MIL(I)**1.5
    ELSE
        MILCSB(I)=1
    ENDIF

C   COMO HW > 0,0254 ENTÃO HWCSB=1.0
    FI3(I)= 1.0 * MILCSB(I) * SIGCSB(I)

C   CÁLCULO DE DBLS E DBSS
    DBLS(I)=FI3(I)*0.605*DH**0.84*UH(I)**0.18/((QL1(I)/LW(I))**0.07)
    DBSS(I)=FI3(I)*0.660*DH**0.84*UH(I)**0.085/((QL1(I)/LW(I))**0.08)

C   VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS - GARCIA 2000
C   NÚMERO DE EOTVOS
    EO(I) = 9.8*(RHOL(I)-RHOG(I))*DBS(I)**2/SIGMA(I)
    EO1(I) = 9.8*(RHOL(I)-RHOG(I))*DBSS(I)**2/SIGMA(I)

C   NÚMERO DE MORTON
    MO(I) = 9.81*MIL(I)**4*(RHOL(I)-RHOG(I))/(RHOL(I)**2*
    & SIGMA(I)**3)

C   CONSTANTE H
    H(I)=4/3*EO(I)*MO(I)**-0.149*(MIL(I)/9.12E-4)**-0.14
    H1(I)=4/3*EO1(I)*MO(I)**-0.149*(MIL(I)/9.12E-4)**-0.14

    IF (H(I) .GT. 59.3) THEN
        J(I)=3.42*H(I)**0.441
    ELSE
        J(I)=0.94*H(I)**0.757
    ENDIF

    IF (H1(I) .GT. 59.3) THEN
        J1(I)=3.42*H1(I)**0.441
    ELSE
        J1(I)=0.94*H1(I)**0.757
    ENDIF

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   VELOC. TERMINAL DAS BOLHAS PEQ NAS ZONAS 2 E 4 (GARCIA 2000)
USB(I)=MIL(I)/(RHOL(I)*DBS(I))*MO(I)**-0.149*(J(I)-0.857)

C   VELOCIDADE TERMINAL DAS BOLHAS DBSS NA ZONAS 5 (GARCIA 2000)
UBSS(I)=MIL(I)/(RHOL(I)*DBSS(I))*MO(I)**-0.149*(J1(I)-0.857)

C   FRAÇÃO DE BOLHAS PEQUENAS NA ESPUMA (GARCIA 2000)
C   PROP. DO AR E DA ÁGUA SIMULADOS NO ASPEN À 1 ATM E 25°C
AJ(I) = 1 - 0.463*(SIGMA(I)/0.07282)**0.6*
& (MIL(I)/9.12E-4*1.845E-5/MIG(I))**
& 0.1*(994.7/RHOL(I))**0.6*(1.183/RHOG(I))**0.1

C   NÃO FOI INCLUÍDA CORREÇÃO DE AJ QUANDO MIL>0.6E-3 E SIGMA<50E-3

C   VELOCIDADE DE SUBIDA DAS BOLHAS GRANDES (PRADO 1990)
ULB(I) = US(I)/((1 - AJ(I))*E(I)) - USB(I)*AJ(I)/(1-AJ(I))

C   TEMPO DE RESIDÊNCIA -
C   VERIFICAR SE HF > HJ SENÃO FAZER (HF-HJ) = HF
IF (HF(I) .GT. HJ(I)) THEN
  TG2S(I) = (HF(I)-HJ(I))/USB(I)
  TG2L(I) = (HF(I)-HJ(I))/ULB(I)
ELSE
  TG2S(I) = HF(I)/USB(I)
  TG2L(I) = HF(I)/ULB(I)
ENDIF

C   NUT ZONA 2
NL2S(I) = 12*FTM(I)*TG2S(I)**0.5/DBS(I)
NL2L(I) = 12*FTM(I)*TG2L(I)**0.5/DBL(I)

C   ZONA 3
C   TEMPO DE RESIDÊNCIA
ULB3(I) = US(I)/E(I)
TG3(I) = DBLS(I)/ULB3(I)

C   NUT ZONA 3
NL3(I) = 12*FTM(I)*TG3(I)**0.5/DBLS(I)

C   ZONA 4
C   TEMPO DE RESIDÊNCIA
C   VERIFICAR SE HF > DBLS SENÃO FAZER (HF-DBLS) = HF
IF (HF(I) .GT. DBLS(I)) THEN
  TG4S(I) = (HF(I)-DBLS(I))/USB(I)
  TG4L(I) = (HF(I)-DBLS(I))/ULB(I)
ELSE
  TG4S(I) = HF(I)/USB(I)
  TG4L(I) = HF(I)/ULB(I)
ENDIF

C   NUT ZONA 4
NL4S(I)=12*FTM(I)*TG4S(I)**0.5/DBS(I)
NL4L(I)=12*FTM(I)*TG4L(I)**0.5/DBL(I)

C   ZONA 5
TG5(I)=HF(I)/ULB3(I)
NL5(I)=12*FTM(I)*TG5(I)**0.5/DBSS(I)

C   ESTIMATIVA DA QUANTIDADE DE FUROS EM REGIME JET

C   FJ (PRADO, 1990)
UA0(I)=0.1*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*HW**0.132*
& DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0.27
UA100(I)=1.1*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*HW**0.132*
& DH**0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0.27
FJ1(I)=(UA(I)-UA0(I))/(UA100(I)-UA0(I))

C   FJ (PRADO, 1987)
UATP(I)=(0.04302*RHOG(I)**-0.5*RHOL(I)**0.692*SIGMA(I)**0.06*
& FAP(I)**0.25*(QL1(I)/LW(I))**0.05*DH**0.1)

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

UA0P(I)=10.38*HW**0.132*DH**-.0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0
UA100P(I)=114*HW**0.132*DH**-.0.26*FAP(I)**0.992*(QL1(I)/LW(I))**0

FJP(I)=(UA(I)*DH**0.27/(103.65*FAP(I)*(HW**0.5*(QL1(I)/LW(I))**
& 0.27))-0.1

C   CONSIDERANDO FJ=60% QDO UA=UATP TRANSIÇÃO (PRADO, 1987)
C   FJ(I)=UA(I)*0.60/UATP(I)

C   FJ (PRADO, 1990)
C   FJ(I)= FJ1(I)

C   FJ (PRADO, 1987)
C   FJ(I)= FJP(I)

C   CONSTANTES FSB E FLB
FSB=165.65*DH**1.32*FAP(I)**1.33
FLB(I)=1-FJ(I)-FSB

C   CALCULO DA EFICIENCIA DA FASE LÍQUIDA

C   EFICIENCIA FASE LÍQUIDA TODO PRATO
NLFI(I)=NL1(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL2S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL2L(i)))))
NLFLB(i)= NL3(i)-DLOG(1-(AJ(i)*(1-DEXP(-NL4S(i)))+
& (1-AJ(i))*(1-DEXP(-NL4L(i)))))

EL(I)=(FJ(I)*(1-DEXP(-NLFI(I)))+FLB(I)
& *(1-DEXP(-NLFLB(I)))+ FSB*(1-DEXP(-NL5(I)))

C   FASE GÁS
C   FATOR DA EQUAÇÃO GERAL DE UNIDADES DE TM
FTMG(I)=(ML(I)*RHOG(I))/(MG(I)*RHOL(I))

C   ZONA1
C   REYNOLDS NO JET
REJ(I)=UJ(I)*DJ(I)*RHOG(I)/MIG(I)

C   SCHIMIDT NA FASE GÁS
SCG(I)=MIG(I)/(RHOG(I)*DG)

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
KG1(I)=0.046*(DG/DJ(I))*REJ(I)**0.96*SCG(I)**0.44

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
KL1(I)=1.13*(DL/TG1(I))**0.5

C   NTU ZONA 1
NG1(I)=FTMG(I)*KG1(I)*NL1(I)/KL1(I)

C   ZONA 2,3,4,5
PEG2S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
PEG2L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
PEG3(I)=DBLS(I)*ULB3(I)/DG
PEG4S(I)=DBS(I)*USB(I)/DG
PEG4L(I)=DBL(I)*ULB(I)/DG
PEG5(I)=DBSS(I)*UBSS(I)/DG

IF (PEG2S(I) .GT. 200) THEN
  SH2S(I)=17.9
ELSE
  SH2S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2S(I))-
& 5.640*(DLOG10(PEG2S(I)))**2
ENDIF

IF (PEG2L(I) .GT. 200) THEN
  SH2L(I)=17.9
ELSE
  SH2L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG2L(I))-
& 5.640*(DLOG10(PEG2L(I)))**2
ENDIF

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

      IF (PEG3(I) .GT. 200) THEN
        SH3(I)=17.9
      ELSE
        SH3(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG3(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG3(I)))**2
      ENDIF

      IF (PEG4S(I) .GT. 200) THEN
        SH4S(I)=17.9
      ELSE
        SH4S(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4S(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4S(I)))**2
      ENDIF

      IF (PEG4L(I) .GT. 200) THEN
        SH4L(I)=17.9
      ELSE
        SH4L(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG4L(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG4L(I)))**2
      ENDIF

      IF (PEG5(I) .GT. 200) THEN
        SH5(I)=17.9
      ELSE
        SH5(I)=-11.878+25.879*DLOG10(PEG5(I))-
&      5.640*(DLOG10(PEG5(I)))**2
      ENDIF

C   COEFICIENTE DE TM NO GÁS
      KG2S(I)=SH2S(I)*DG/DBS(I)
      KG2L(I)=SH2L(I)*DG/DBL(I)
      KG3(I)=SH3(I)*DG/DBLS(I)
      KG4S(I)=SH4S(I)*DG/DBS(I)
      KG4L(I)=SH4L(I)*DG/DBL(I)
      KG5(I)=SH5(I)*DG/DBSS(I)

C   COEFICIENTE DE TM NO LÍQUIDO
      KL2S(I)=1.13*(DL/TG2S(I))**0.5
      KL2L(I)=1.13*(DL/TG2L(I))**0.5
      KL3(I)=1.13*(DL/TG3(I))**0.5
      KL4S(I)=1.13*(DL/TG4S(I))**0.5
      KL4L(I)=1.13*(DL/TG4L(I))**0.5
      KL5(I)=1.13*(DL/TG5(I))**0.5

C   NUT ZONAS 2,3,4 E 5
      NG2S(I)=FTMG(I)*KG2S(I)*NL2S(I)/KL2S(I)
      NG2L(I)=FTMG(I)*KG2L(I)*NL2L(I)/KL2L(I)
      NG3(I)=FTMG(I)*KG3(I)*NL3(I)/KL3(I)
      NG4S(I)=FTMG(I)*KG4S(I)*NL4S(I)/KL4S(I)
      NG4L(I)=FTMG(I)*KG4L(I)*NL4L(I)/KL4L(I)
      NG5(I)=FTMG(I)*KG5(I)*NL5(I)/KL5(I)

C   CÁLCULO DA EFICIÊNCIA NA FASE GÁS

C   EFICIÊNCIA NA FASE GÁS TODO PRATO

      NGFJ(I)=NG1(I)-DLOG(1-(AJ(I)*(1-DEXP(-NG2S(I)))+
& (1-AJ(I))*(1-DEXP(-NG2L(I))))))
      NGFLB(I)= NG3(I)-DLOG(1-(AJ(I)*(1-DEXP(-NG4S(I)))+
& (1-AJ(I))*(1-DEXP(-NG4L(I))))))

      EG(I)=(FJ(I)*(1-DEXP(-NGFJ(I)))+FLB(I)
& *(1-DEXP(-NGFLB(I)))+FSB*(1-DEXP(-NG5(I))))

C   MÉTODO DE O'CONNELL

      KBD(I)=Y(IL+(I-1)*IC)/X(IL+(I-1)*IC)
      KCI(I)=Y(IH+(I-1)*IC)/X(IH+(I-1)*IC)

      VOLA(I)= KBD(I)/KCI(I)

      EC(I)=(9.05*((MIL(I)*VOLA(I)))**0.245)/100

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```

C   MÉTODO DE CHAN E FAIR (1984)

C   TEMPO DE RESIDENCIA DO VAPOR
TG(I)=((1-ALPH(I))*HL(I))/(ALPH(I)*UA(I))

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE VAPOR
NG(I)=(10300-8670*FF(I))*FF(I)*SQRT(DG/HL1(I))*TG(I)

C   TEMPO DE RESIDENCIA DO LIQUIDO
TL(I)=HL(I)*Z*LW(I)/QL1(I)

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA DA FASE LIQUIDA
NL(I)=19700*DL**0.5*(0.4*FS(I)+0.17)*TL(I)

C   NUMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA GLOBAL
NOG(I)=1/((LAMB(I)/NL(I))+(1/NG(I)))

C   EFICIENCIA DE PONTO
EG1(I)=1-EXP(-NOG(I))

C   MODELO DE MISTURA(EG PARA EMV)

C   DIFUSIVIDADE TURBULENTA, MOLNAR (1974)
DE(I)=(0.0005+0.01285*UA(I)+6.32*QL1(I)/LW(I)+0.312*HW)**2

C   VERIFICAÇÃO DO PRATO PAR E IMPAR

C   NÚMERO DE PECLET, LOCKETT corrigido

    PE(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
    & *(1-(LW(I)/D)**2)**0.5
    PE1(I)=(ML(I)/2/MWL(I))*D/(LW(I)*HL1(I)*(RHOL(I)/MWL(I))*DE(I))
    & *(1-(LW(I)/D)**2)**0.5

    IF (PE(I) .GT. 20) THEN
C   CÁLCULO DE EMV PARA PLUG FLOW
EMV(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG(I)*A1AA)-1)/LAMB(I)
    ELSE
C   FATOR N
N(I)=(PE(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*A1AA*EG(I)/PE(I)))-1)
C   CÁLCULO DE N+PE=CTET
CTET(I)=N(I)+PE(I)
C   CÁLCULO DE EMV PARA MISTURA PARCIAL
EMVI(I)=EG(I)*((1-EXP(-CTET(I)))/(CTET(I)*
    & (1+CTET(I)/N(I)))+
    & (EXP(N(I))-1)/N(I)*(1+N(I)/CTET(I)))
    EMV(I) = EMVI(I)*A1AA

    ENDIF

    IF (PE1(I) .GT. 20) THEN
C   CÁLCULO DE EMV1 PARA PLUG FLOW
EMV1(I)=(DEXP(LAMB(I)*EG1(I)*A1AA)-1)/LAMB(I)
    ELSE
C   FATOR N1
N1(I)=(PE1(I)/2)*(SQRT(1+(4*LAMB(I)*A1AA*EG1(I)/PE1(I)))-1)
C   CÁLCULO DE N1+PE1=T1
CTET1(I)=N1(I)+PE1(I)
C   CÁLCULO DE EMV1 PARA MISTURA PARCIAL
EMV1I(I)=EG1(I)*((1-EXP(-CTET1(I)))/(CTET1(I)*
    & (1+CTET1(I)/N1(I)))+
    & (EXP(N1(I))-1)/N1(I)*(1+N1(I)/CTET1(I)))
    EMV1(I) = EMV1I(I)*A1AA

    END IF

    HB(I)=HL(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL(I))**0.5*
    & (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)
    HB1(I)=HL1(I)*(265*(UA(I)/(9.81*HL1(I))**0.5*
    & (RHOG(I)/RHOL(I))**0.5)**1.7+1)

```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```
LE(I)=1E-8*(HB(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2
LE1(I)=1E-8*(HB1(I)/TS)**3*(UH(I)/(QL(I)/AA))**2
```

- C EFICIÊNCIA APARENTE A PARTIR DA EFIC. DRY, COLBURN (1936)

```
EMVA(I)=EMV(I)/(1+LE(I)*EMV(I))
EMVA1(I)=EMV1(I)/(1+LE1(I)*EMV1(I))
```

- C ESTIMATIVA DE WEEPING (LOCKETT PG. 115)
 FRH(I)=UH(I)*(RHOG(I)/(9.81*HL(I)*(RHOL(I))))**0.5
 WEEP(I)=0.020*FRH(I)**-1-0.030

- C CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (CHAN = EMVA1(I))
 EFI(I) =EMVA1(I)

- C CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (GARCIA=EMVA(I))
 EFIG(I) = EMVA(I)

- C CÁLCULO DA EFICIÊNCIA (OCONNEL= EC(I))
 EFIC(I) = EC(I)

- C EFICIÊNCIA GLOBAL
 EOG(I)=DLOG(1+EMVA(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
 EOG3(I)=DLOG(1+EG(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
 EOG4(I)=DLOG(1+EMVA1(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
 EOG5(I)=DLOG(1+EG1(I)*(LAMB(I)-1))/DLOG(LAMB(I))
 EOG6(I)=EC(I)

```
SUM1 = SUM1 + FS(I)
FSAVG = SUM1/(NP-1)
```

```
SUM2 = SUM2 + LAMB(I)
LAMBVG = SUM2/(NP-1)
```

```
SUM = SUM + EOG(I)
EOGC = SUM/(NP-1)
```

```
SUM3 = SUM3+ EOG3(I)
EOGC3 = SUM3/(NP-1)
```

```
SUM4 = SUM4 + EOG4(I)
EOGC4 = SUM4/(NP-1)
```

```
SUM5 = SUM5 + EOG5(I)
EOGC5 = SUM5/(NP-1)
```

```
SUM6 = SUM6 + EOG6(I)
EOGC6 = SUM6/(NP-1)
```

```
SUM7 = SUM7 + WEEP(I)
WEEPVG = SUM7/(NP-1)
```

```
SUM8 = SUM8 + FF(I)
FFAVG = SUM8/(NP-1)
```

```
SUM9 = SUM9 + FJ(I)
FJAVG = SUM9/(NP-1)
```

```
SUM10 = SUM10 + FJ1(I)
FJ1AVG = SUM10/(NP-1)
```

```
END DO
```

- C CÁLCULO DA EFICIÊNCIA GLOBAL POR SEÇÕES

```
SUM = 0.0
DO I = 2, NF-1
  SUM = SUM + EOG(I)
END DO
EOGC1 = SUM/(NF-2)
```

```
SUM = 0.0
DO I = NF, NP
```

Apêndice B – Programas Fortran 77

```
SUM = SUM + EOG(I)
END DO
EOGC2 = SUM/(NP-NF+1)
```

```
C  VARIÁVEIS DE SAÍDA
M51=M(51)
LAMB51=LAMB(51)
```

```
C  ZONA 1-LÍQUIDO
US51=US(51)
UA51=UA(51)
FP51=FP(51)
FS51=FS(51)
UH51=UH(51)
HL51=HL(51)
HL151=HL1(51)
HL251=HL2(51)
E51=E(51)
HF51=HF(51)
CSB51=CSB(51)
F51=F(51)
C151=C1(51)
C251=C2(51)
UF51=UF(51)
UF20=UF(20)
VO51=VO(51)
FAP51=FAP(51)
FF51=FF(51)
XF51=XF(51)
DJ51=DJ(51)
UJ51=UJ(51)
REH51=REH(51)
HJ51=HJ(51)
NL151=NL1(51)
```

```
C  ZONA 2 LÍQUIDO
DBS51=DBS(51)
DBL51=DBL(51)
J51=J(51)
USB51=USB(51)
AJ51=AJ(51)
ULB51=ULB(51)
UBSS51=UBSS(51)
NL2S51=NL2S(51)
NL2L51=NL2L(51)
```

```
C  ZONA 3 LÍQUIDO
FI351=FI3(51)
DBLS51=DBLS(51)
DBSS51=DBSS(51)
NL351=NL3(51)
```

```
C  ZONA 4 LÍQUIDO
NL4S51=NL4S(51)
NL4L51=NL4L(51)
```

```
C  ZONA 5 LÍQUIDO
NL551=NL5(51)
```

```
UA051=UA0(51)
UA1051=UA100(51)
FJ51=FJ(51)
FJ151=FJ1(51)
UATP51=UATP(51)
UA0P51=UA0P(51)
UA1P51=UA100P(51)
```

FJP51=FJP(51)
 RHOG51=RHOG(51)
 RHOL51=RHOL(51)
 QG51=QG(51)
 QL51=QL(51)
 FLB51=FLB(51)
 EL51=EL(51)

C FASE GÁS

NG151=NG1(51)
 NG2S51=NG2S(51)
 NG2L51=NG2L(51)
 NG351=NG3(51)
 NG4S51=NG4S(51)
 NG4L51=NG4L(51)
 NG551=NG5(51)
 NGFJ51=NGFJ(51)
 NGFL51=NGFLB(51)

EG51=EG(51)
 PE51=PE(51)
 EMV51=EMV(51)
 LE51=LE(51)
 EMVA51=EMVA(51)
 FRH51=FRH(51)

EOG51=EOG(51)

C TEMPOS

TG151=TG1(51)
 TG2S51=TG2S(51)
 TG2L51=TG2L(51)
 TG351=TG3(51)
 TG4S51=TG4S(51)
 TG4L51=TG4L(51)
 TG551=TG5(51)

C MÉTODO DE CHAN E FAIR

NG51=NG(51)
 NL51=NL(51)
 EG151=EG1(51)
 PE151=PE1(51)
 EMV151=EMV1(51)
 LE151=LE1(51)
 EMVA15=EMVA1(51)

EF2=EFI(2)
 EF3=EFI(3)
 EF4=EFI(4)
 EF5=EFI(5)
 EF6=EFI(6)
 EF7=EFI(7)
 EF8=EFI(8)
 EF9=EFI(9)
 EF10=EFI(10)
 EF11=EFI(11)
 EF12=EFI(12)
 EF13=EFI(13)
 EF14=EFI(14)
 EF15=EFI(15)
 EF16=EFI(16)
 EF17=EFI(17)
 EF18=EFI(18)
 EF19=EFI(19)
 EF20=EFI(20)
 EF21=EFI(21)
 EF22=EFI(22)
 EF23=EFI(23)

Apêndice B – Programas Fortran 77

EF24=EFI(24)
EF25=EFI(25)
EF26=EFI(26)
EF27=EFI(27)
EF28=EFI(28)
EF29=EFI(29)
EF30=EFI(30)
EF31=EFI(31)
EF32=EFI(32)
EF33=EFI(33)
EF34=EFI(34)
EF35=EFI(35)
EF36=EFI(36)
EF37=EFI(37)
EF38=EFI(38)
EF39=EFI(39)
EF40=EFI(40)
EF41=EFI(41)
EF42=EFI(42)
EF43=EFI(43)
EF44=EFI(44)
EF45=EFI(45)
EF46=EFI(46)
EF47=EFI(47)
EF48=EFI(48)
EF49=EFI(49)
EF50=EFI(50)
EF51=EFI(51)
EF52=EFI(52)
EF53=EFI(53)
EF54=EFI(54)
EF55=EFI(55)
EF56=EFI(56)
EF57=EFI(57)
EF58=EFI(58)
EF59=EFI(59)
EF60=EFI(60)
EF61=EFI(61)
EF62=EFI(62)
EF63=EFI(63)
EF64=EFI(64)
EF65=EFI(65)
EF66=EFI(66)
EF67=EFI(67)
EF68=EFI(68)
EF69=EFI(69)
EF70=EFI(70)
EF71=EFI(71)
EF72=EFI(72)
EF73=EFI(73)
EF74=EFI(74)
EF75=EFI(75)
EF76=EFI(76)
EF77=EFI(77)
EF78=EFI(78)
EF79=EFI(79)
EF80=EFI(80)
EF81=EFI(81)
EF82=EFI(82)
EF83=EFI(83)
EF84=EFI(84)
EF85=EFI(85)
EF86=EFI(86)

C MÉTODO DE OCONNEL

EF2C=EFIC(2)
EF3C=EFIC(3)
EF4C=EFIC(4)
EF5C=EFIC(5)
EF6C=EFIC(6)
EF7C=EFIC(7)
EF8C=EFIC(8)

EF9C=EFIC(9)
EF10C=EFIC(10)
EF11C=EFIC(11)
EF12C=EFIC(12)
EF13C=EFIC(13)
EF14C=EFIC(14)
EF15C=EFIC(15)
EF16C=EFIC(16)
EF17C=EFIC(17)
EF18C=EFIC(18)
EF19C=EFIC(19)
EF20C=EFIC(20)
EF21C=EFIC(21)
EF22C=EFIC(22)
EF23C=EFIC(23)
EF24C=EFIC(24)
EF25C=EFIC(25)
EF26C=EFIC(26)
EF27C=EFIC(27)
EF28C=EFIC(28)
EF29C=EFIC(29)
EF30C=EFIC(30)
EF31C=EFIC(31)
EF32C=EFIC(32)
EF33C=EFIC(33)
EF34C=EFIC(34)
EF35C=EFIC(35)
EF36C=EFIC(36)
EF37C=EFIC(37)
EF38C=EFIC(38)
EF39C=EFIC(39)
EF40C=EFIC(40)
EF41C=EFIC(41)
EF42C=EFIC(42)
EF43C=EFIC(43)
EF44C=EFIC(44)
EF45C=EFIC(45)
EF46C=EFIC(46)
EF47C=EFIC(47)
EF48C=EFIC(48)
EF49C=EFIC(49)
EF50C=EFIC(50)
EF51C=EFIC(51)
EF52C=EFIC(52)
EF53C=EFIC(53)
EF54C=EFIC(54)
EF55C=EFIC(55)
EF56C=EFIC(56)
EF57C=EFIC(57)
EF58C=EFIC(58)
EF59C=EFIC(59)
EF60C=EFIC(60)
EF61C=EFIC(61)
EF62C=EFIC(62)
EF63C=EFIC(63)
EF64C=EFIC(64)
EF65C=EFIC(65)
EF66C=EFIC(66)
EF67C=EFIC(67)
EF68C=EFIC(68)
EF69C=EFIC(69)
EF70C=EFIC(70)
EF71C=EFIC(71)
EF72C=EFIC(72)
EF73C=EFIC(73)
EF74C=EFIC(74)
EF75C=EFIC(75)
EF76C=EFIC(76)
EF77C=EFIC(77)
EF78C=EFIC(78)
EF79C=EFIC(79)
EF80C=EFIC(80)
EF81C=EFIC(81)

Apêndice B – Programas Fortran 77

EF82C=EFIC(82)
EF83C=EFIC(83)
EF84C=EFIC(84)
EF85C=EFIC(85)
EF86C=EFIC(86)

C MÉTODO DE GARCIA

EF2G=EFIG(2)
EF3G=EFIG(3)
EF4G=EFIG(4)
EF5G=EFIG(5)
EF6G=EFIG(6)
EF7G=EFIG(7)
EF8G=EFIG(8)
EF9G=EFIG(9)
EF10G=EFIG(10)
EF11G=EFIG(11)
EF12G=EFIG(12)
EF13G=EFIG(13)
EF14G=EFIG(14)
EF15G=EFIG(15)
EF16G=EFIG(16)
EF17G=EFIG(17)
EF18G=EFIG(18)
EF19G=EFIG(19)
EF20G=EFIG(20)
EF21G=EFIG(21)
EF22G=EFIG(22)
EF23G=EFIG(23)
EF24G=EFIG(24)
EF25G=EFIG(25)
EF26G=EFIG(26)
EF27G=EFIG(27)
EF28G=EFIG(28)
EF29G=EFIG(29)
EF30G=EFIG(30)
EF31G=EFIG(31)
EF32G=EFIG(32)
EF33G=EFIG(33)
EF34G=EFIG(34)
EF35G=EFIG(35)
EF36G=EFIG(36)
EF37G=EFIG(37)
EF38G=EFIG(38)
EF39G=EFIG(39)
EF40G=EFIG(40)
EF41G=EFIG(41)
EF42G=EFIG(42)
EF43G=EFIG(43)
EF44G=EFIG(44)
EF45G=EFIG(45)
EF46G=EFIG(46)
EF47G=EFIG(47)
EF48G=EFIG(48)
EF49G=EFIG(49)
EF50G=EFIG(50)
EF51G=EFIG(51)
EF52G=EFIG(52)
EF53G=EFIG(53)
EF54G=EFIG(54)
EF55G=EFIG(55)
EF56G=EFIG(56)
EF57G=EFIG(57)
EF58G=EFIG(58)
EF59G=EFIG(59)
EF60G=EFIG(60)
EF61G=EFIG(61)
EF62G=EFIG(62)
EF63G=EFIG(63)
EF64G=EFIG(64)
EF65G=EFIG(65)
EF66G=EFIG(66)

EF67G=EFIG(67)
EF68G=EFIG(68)
EF69G=EFIG(69)
EF70G=EFIG(70)
EF71G=EFIG(71)
EF72G=EFIG(72)
EF73G=EFIG(73)
EF74G=EFIG(74)
EF75G=EFIG(75)
EF76G=EFIG(76)
EF77G=EFIG(77)
EF78G=EFIG(78)
EF79G=EFIG(79)
EF80G=EFIG(80)
EF81G=EFIG(81)
EF82G=EFIG(82)
EF83G=EFIG(83)
EF84G=EFIG(84)
EF85G=EFIG(85)
EF86G=EFIG(86)

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)