

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UMA TORRE DE DESTILAÇÃO DE  
MISTURA BINÁRIA

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SAN  
TA CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM  
ENGENHARIA.

ALDO JOÃO DE SOUSA

FLORIANÓPOLIS-SC, 04 DE OUTUBRO DE 1979.

SIMULAÇÃO DINÂMICA DE UMA TORRE DE DESTILAÇÃO DE  
MISTURA BINÁRIA

ALDO JOÃO DE SOUSA

ESTA DISSERTAÇÃO FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
" MESTRE EM ENGENHARIA "

ESPECIALIDADE: ENGENHARIA MECÂNICA; ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: TERMOTÉC  
NICA, E APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUA -  
ÇÃO .



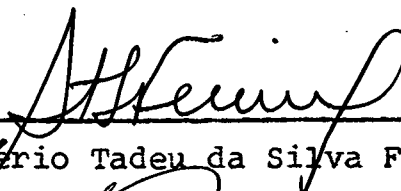
---

Prof. Antônio Fábio Carvalho da  
Silva, M.Sc. - Orientador

---

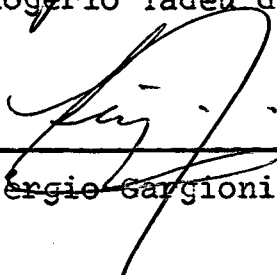
Prof. Arno Blass, Ph.D.  
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:



---

Prof. Rogério Tadeu da Silva Ferreira, Ph.D.



---

Prof. Sérgio Gargioni, M.Sc.

---

Prof. Arno Bollmann, M.Sc.

À Telma,  
minha esposa e  
aos nossos filhos,  
André e Maria Elisa.

## AGRADECIMENTOS

Quase três anos de boa convivência junto aos amigos da Universidade Federal de Santa Catarina, particularmente da Engenharia Mecânica, são suficientes para deixar registrado neste modesto trabalho os meus agradecimentos e a satisfação por tê-los conhecidos. E dentre os amigos da Termodinâmica deixo registrado o meu agradecimento especial ao Prof. ANTÔNIO FÁBIO CARVALHO DA SILVA, amigo de longos anos e orientador deste trabalho.

Aos integrantes da banca examinadora, Professores ROGÉRIO TADEU DA SILVA FERREIRA, SÉRGIO GARGIONI e ARNO BOLLMANN o meu agradecimento pela leitura minuciosa e sugestões, que não aconteceram somente nesta fase de confecção do trabalho de tese, mas durante todo o nosso tempo de convívio na UFSC.

Finalmente agradeço à CAPES que tão sabiamente tem dispendido ajuda financeira ao curso de Pós-graduação em Engenharia Mecânica da UFSC e ao corpo docente deste Departamento, sem o qual este trabalho não existiria.

## ÍNDICE

## CAPÍTULO 1

Introdução ..... 1

## CAPÍTULO 2

O modelo Físico ..... 4

## CAPÍTULO 3

O modelo matemático ..... 19

## CAPÍTULO 4

Resultados ..... 36

## CAPÍTULO 5

Conclusões ..... 58

Apêndice 1: Propriedades termodinâmicas da mistura água - amônia ..... 61

Apêndice 2: Forma da equação de comporta usada na simulação ... 64

Apêndice 3: Discretização das equações ..... 66

## R E S U M O

O objetivo deste trabalho é o estudo dinâmico de uma torre de destilação de mistura binária. Este estudo é aplicado especificamente a uma torre que operará com a mistura água - amônia.

Estuda-se o comportamento das diversas variáveis do sistema ao longo do tempo conforme se perturba a condição de operação do regime permanente com diversos sinais de entrada.

O modelo matemático proposto é discretizado e o método de Newton - Raphson é usado na solução.

## A B S T R A C T

This work aim at the dynamic study of a destilla -  
tion tower with a binary mixture. This study specifically applied  
to the case of a tower operating with a aqua - amonnia mixture.

The effect on the system variables, when the stea-  
dy state operating conditions are disturbed by a series o f input  
signals, is considered.

The proposed mathematical model is discretized and  
the Newton - Raphson method is used to obtain the solutions.

## S I M B O L O G I A

$M, N$	número que identifica um estágio da torre
$F$	fluxo de massa de alimentação na fase líquida, lbm/min
$f$	fluxo de massa de alimentação na fase vapor, lbm/min
$X_F$	concentração do componente mais volátil no fluxo $F$ , lbm/lbm de mistura
$Y_f$	concentração do componente mais volátil no fluxo $f$ , lbm/lbm de mistura
$h_{l_F}$	entalpia específica do fluxo $F$ , Btu/lbm de mistura
$h_{v_f}$	entalpia específica do fluxo $f$ , Btu/lbm de mistura
$q$	taxa de calor fornecida ou retirada da torre, Btu/min
$L_N$	fluxo de mistura na fase líquida deixando o estágio $N$ , lbm/min
$L_{N-1}$	fluxo de mistura chegando no estágio $N$ , lbm/min
$V_N$	fluxo de mistura na fase vapor deixando o estágio $N$ , lbm/min
$V_{N-1}$	fluxo de mistura na fase vapor chegando no estágio $N$ , lbm/min
$X_N$	concentração do componente mais volátil no fluxo $L_N$ , lbm/lbm de mistura
$Y_N$	concentração do componente mais volátil no fluxo $V_N$ , lbm/lbm de mistura
$h_{l_N}$	entalpia específica do fluxo $L_N$ , Btu/lbm de mistura
$h_{v_N}$	entalpia específica do fluxo $V_N$ , Btu/lbm de mistura
$D$	fluxo de produto destilado na fase líquida, lbm/min
$X_D$	concentração do componente mais volátil no fluxo $D$ , lbm/lbm de mistura



$L_n^+$	massa de mistura acumulada no estágio N - fase líquida, lbm
$h_{1D}$	entalpia específica do fluxo D, Btu/lbm
$L_C^+$	massa de mistura acumulada no reservatório de condensado - fase líquida, lbm
B	fluxo de produto de fundo, lbm/min
$X_B$	concentração do componente mais volátil no fluxo B, lbm/lbm de mistura
$h_{1B}$	entalpia específica do fluxo B, Btu/lbm
$q_C$	taxa de calor retirada no condensador de refluxo, Btu/min
$q_G$	taxa de calor fornecida ao gerador de vapor, Btu/min
$L_C$	fluxo de mistura saindo do condensador de refluxo na fase líquida, lbm/min
$X_C$	concentração do componente mais volátil no fluxo $L_C$ , lbm/lbm de mistura
$h_{1C}$	entalpia específica do fluxo $L_C$ , Btu/lbm
$V_C$	fluxo de mistura saindo do condensador de refluxo na fase vapor, lbm/min
$Y_C$	concentração do componente mais volátil no fluxo $V_C$ , lbm/lbm de mistura
$h_{vC}$	entalpia específica do fluxo $V_C$ , Btu/lbm
P	pressão, psia
EMV	eficiência Murphree da fase vapor

### Índices

c	refere-se ao condensador de refluxo e seu reservatório
G	refere-se ao gerador de vapor
B	refere-se ao produto de fundo
D	refere-se ao produto destilado
F	refere-se ao fluxo de alimentação

### Superescritos

(+)	refere-se à massa de mistura na fase líquida acumulada
-----	--

em qualquer ponto da torre

(\*) refere-se à condição de equilíbrio entre as fases líquida e vapor

t tempo, min

t+1 tempo posterior, min

## 1 - I N T R O D U Ç Ã O

Este trabalho consiste na simulação dinâmica de uma torre de destilação da mistura binária água-amônia e está inserido numa linha de pesquisa iniciada em 1974, no Departamento de Engenharia Mecânica da UFSC, especificamente na área de Termotécnica. Decidiu-se estudar dois sistemas de refrigeração por absorção: um que operasse com a mistura água - amônia e outro com a mistura brometo de lítio - água. O sistema que opera com a mistura água - amônia utiliza a amônia como fluido refrigerante e opera com pressões positivas em todo o ciclo.

Nestes sistemas se comprime uma mistura líquida e a variação do volume específico torna-se irrisória quando comparada com aquela experimentada pelo vapor nos sistemas convencionais que utilizam a compressão mecânica de vapor. Apesar do trabalho de compressão ser ínfimo, a separação dos componentes da mistura é feita às custas de calor. Como este calor é maior que o trabalho equivalente utilizado no acionamento do compressor, a viabilidade dos sistemas de refrigeração por absorção depende da disponibilidade de calor a baixos custos.

O projeto de uma pequena central de refrigeração por absorção de 5 TR, coordenada por Ferreira (1), foi desenvolvido na UFSC e encontra-se em fase de construção. Nesta mesma área, Vianna (2), fez a simulação digital do sistema água - amô -

nia. Silva et al (3) fizeram um estudo visando a aplicação deste sistema para caminhões frigoríficos, usando o calor residual dos gases de escape. McCune et al (4) fizeram a simulação digital para torres de destilação onde se comparava o comportamento desta operando com diversos sistemas de controle. Boynton (5) estudou a aplicabilidade do método de Newton - Raphson para se determinar o número de estágios de uma torre de destilação. Thorogood (6) estudou os aspectos qualitativos da teoria de destilação. Apesar de o estudo na área de destilação já datar de longo tempo, principalmente para a obtenção de álcool e petróleo não foi encontrado nenhum estudo específico para a destilação da mistura água - amônia.

O objetivo deste trabalho pode ser resumido nos seguintes itens:

- a. desenvolvimento de um programa de computador que permita simular uma torre de destilação de mistura binária operando em regime permanente. Com isto consegue-se determinar as condições reinantes em todos os estágios da torre, sem a necessidade de recorrer a métodos puramente gráficos.
- b. conhecidas as condições de operação em regime permanente, introduzir distúrbios no sistema e analisar o seu comportamento ao longo do tempo, até que um novo regime permanente seja atingido.

Equações de balanço de massa, equações de balanço de energia, equações descrevendo os fluxos ao longo da torre, equações de eficiência dos estágios formam o modelo matemático que visa representar o comportamento físico do sistema proposto. Um sistema de equações não - lineares é obtido, discretizado e o método de Newton - Raphson é usado para resolvê-lo. Respostas de diversos tipos de variáveis de interesse são obtidas ao longo do tempo e os resultados que permitem visualizar tal comportamento

são mostrados no final do trabalho.

## 2 - O M O D E L O F Í S I C O

2.1 - Esquema de um sistema de refrigeração por absorção.

Na Fig.1 é apresentado um esquema simplificado de um sistema de refrigeração por absorção com seus diversos componentes.

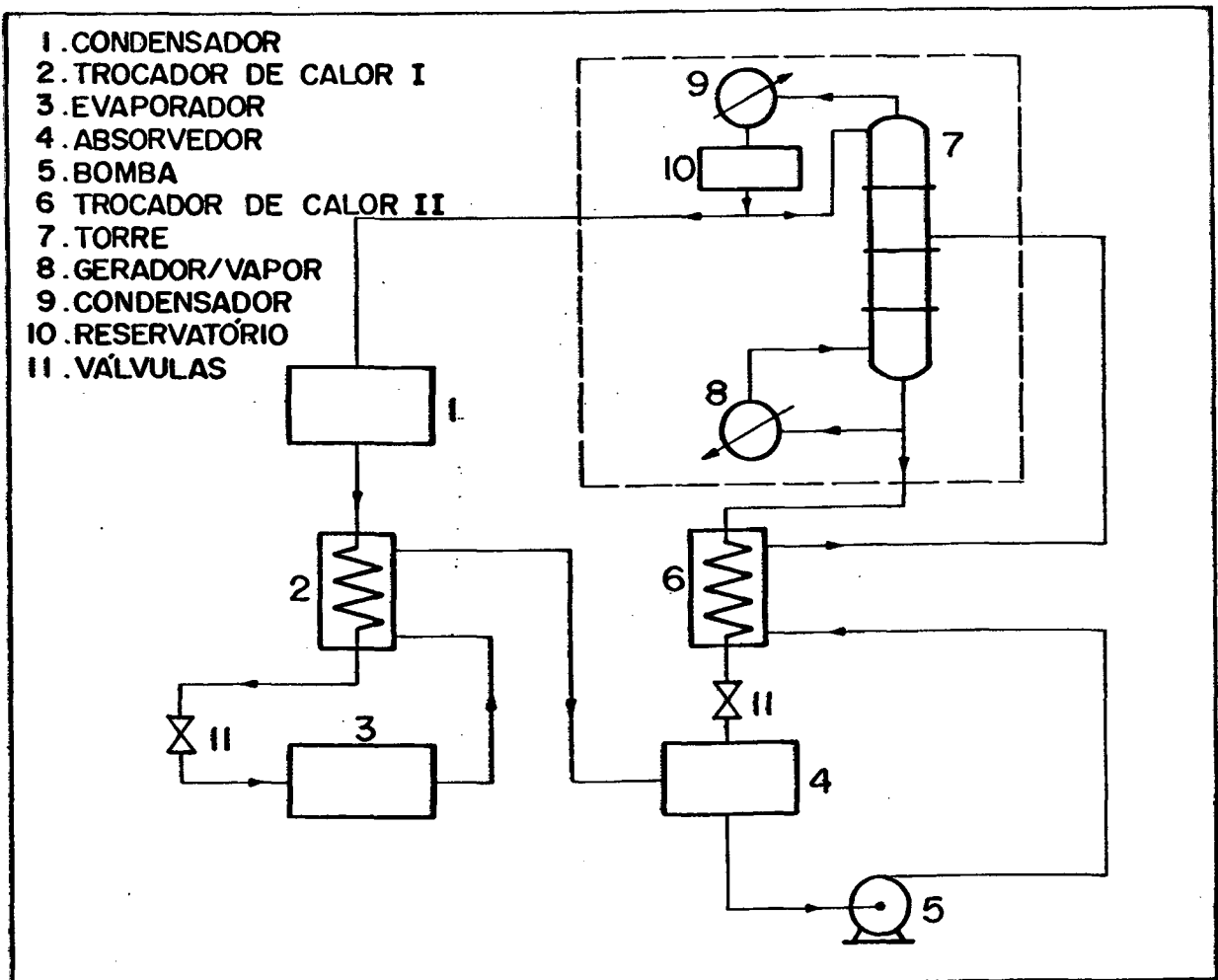


Fig.1 - Sistema de refrigeração por absorção água - amônia

O produto destilado que deixa a torre é constituído basicamente de amônia. Esta mistura circula pelo condensador, trocador de calor I, válvula de expansão, evaporador e ao entrar no absorvedor a amônia será absorvida pela mistura pobre em amônia. Assim uma mistura água - amônia será bombeada até a torre de destilação, passando antes pelo trocador de calor II. A mistura fraca em amônia, saindo do fundo da torre, retorna ao absorvedor, que se encontra na faixa de baixa pressão. A função dos trocadores de calor I e II é a de melhorar a performance do ciclo. Destaca-se na Fig.1, dentro da linha tracejada, os componentes do sistema que será estudado neste trabalho. A descrição detalhada do ciclo pode ser encontrada em Threlkeld (7).

A destilação aqui estudada é fundamentalmente a separação de um componente denominado mais volátil de uma mistura binária. Com o aquecimento da mistura, as bolhas de vapor desprezadas são mais ricas de componente mais volátil. Com isto se consegue na fase vapor uma mistura com concentrações daquelas que se encontram na fase líquida remanescente. Com a condensação posterior do vapor pode-se conseguir uma separação de componentes da mistura. Este processo pode ser conseguido em um simples alambique. A vantagem de se utilizar a torre de destilação reside no facto de se colocar as fases líquido e vapor em contato maior, facilitando assim a troca por difusão dos componentes da mistura e obtendo um produto destilado mais puro. O vapor passa pelos vários estágios da torre, num fluxo ascendente, que inicia-se no gerador de vapor e termina no condensador de refluxo. Em cada estágio os processos de vaporização e liquefação estão ocorrendo. Como existe mistura na fase líquida acumulada sobre as bandejas, parte do vapor, proveniente do estágio imediatamente abaixo é condensado. No processo de condensação o componente menos volátil se condensa em maior quantidade e este calor latente de condensação é utilizado para evaporar o componente mais volátil que seguirá para o estágio imediatamente acima. Desta forma, à medida que o vapor sobe e

le se torna mais rico em componente mais volátil e o líquido que desce para o fundo torna-se cada vez mais pobre deste componente. O condensador de refluxo tem como finalidade condensar, total ou parcialmente, o vapor que atinge o topo da torre. Parte deste condensado, rico em componente mais volátil, é reinjetado na torre e inicia seu movimento descendente até que o fundo da torre seja atingido. A mistura que atinge o fundo da torre no estado líquido é rica em componente menos volátil. Uma parcela desta mistura é vaporizada no gerador de vapor e o restante é encaminhado para o absorvedor. Um estudo mais detalhado sobre torre de destilação pode ser encontrado em McCabe et al (8) e Plank (9).

O esquema de uma torre de destilação é apresentado na Fig.2. Esta pode apresentar variados tipos de construção interna. Escolheu-se para este estudo uma torre constituída por pratos ou bandejas. Nestas bandejas são fixados os borbulhadores por onde passará o vapor. Estes borbulhadores têm a finalidade de dispersar a massa de vapor no líquido que se encontra acumulado sobre a bandeja.

Como não serão discutidos neste trabalho os aspectos intrínsecos da difusão que ocorrem sobre cada bandeja, será admitido que o líquido que deixa um estágio N genérico apresenta uma concentração do componente mais volátil igual àquela do líquido que se encontra sobre a bandeja. Para facilitar a nomenclatura, uma hipótese que será apresentada quando da modelação matemática, é inserida neste ponto. Esta hipótese consiste em desprezar a massa de vapor que se acumula em cada estágio da torre, massa esta que comparada com a mistura líquida que também encontra-se acumulada é bastante pequena.

Na Fig.1 estão mostradas as diversas comunicações da torre com o exterior, tais como, a entrada para a alimentação, a saída do produto de topo e saída para o produto de fundo.



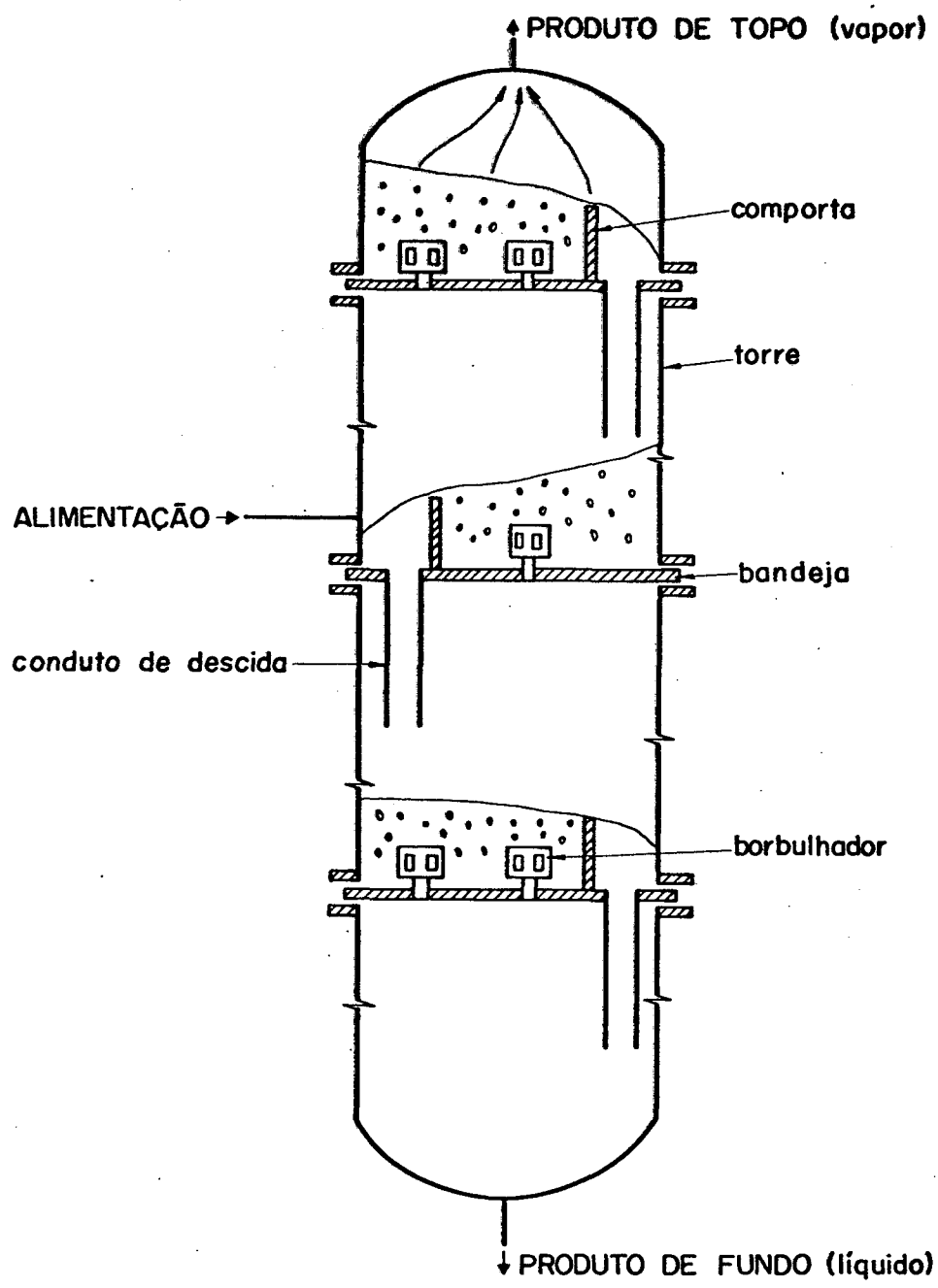


Fig.2 - Torre de destilação

Mostra-se na Fig.3 um esquema de um estágio ge  
nérico da torre, com a respectiva nomenclatura que será usada da -  
qui por diante.

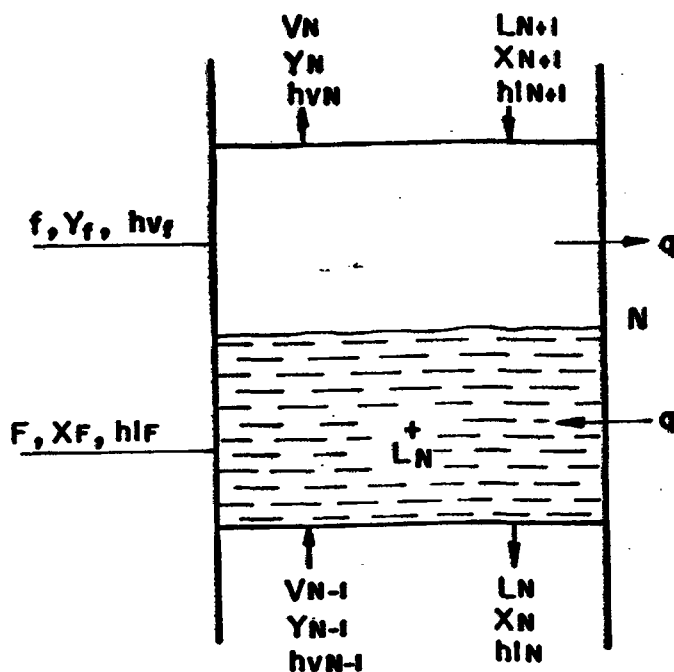


Fig.3 - Estágio genérico da torre de destilação

- $N$  - número que identifica o estágio
- $F$  - fluxo de massa de alimentação na fase líquida
- $f$  - fluxo de massa de alimentação na fase vapor
- $Y_f$  - concentração do componente mais volátil no fluxo de alimentação ( fase vapor )
- $X_f$  - concentração do componente mais volátil no fluxo de alimentação ( fase líquida )
- $h_{vf}$  - entalpia específica no fluxo de alimentação ( fase vapor )
- $h_{lf}$  - entalpia específica no fluxo de alimentação ( fase líquida )
- $q$  - taxa de calor que entra ou sai do estágio número  $N$
- $L_{N+1}$  - fluxo de líquido que chega no estágio  $N$  proveniente do estágio  $N+1$

- $X_{N+1}$  - concentração do componente mais volátil no fluxo  $L_{N+1}$   
 $h_{L_{N+1}}$  - entalpia específica do fluxo  $L_{N+1}$   
 $V_N$  - fluxo de vapor que deixa o estágio N  
 $Y_N$  - concentração do componente mais volátil no fluxo  $V_N$   
 $h_{V_N}$  - entalpia específica do fluxo  $V_N$   
 $L_N^+$  - massa de mistura acumulada no estágio N ( fase líquida )  
 $L_N$  - fluxo de mistura que deixa o estágio N ( fase líquida )  
 $X_N$  - concentração do componente mais volátil no fluxo  $L_N$   
 $h_{L_N}$  - entalpia específica do fluxo  $L_N$   
 $V_{N-1}$  - fluxo de mistura que deixa o estágio N ( fase vapor )  
 $Y_{N-1}$  - concentração do componente mais volátil no fluxo  $V_{N-1}$   
 $h_{V_{N-1}}$  - entalpia específica do fluxo  $V_{N-1}$

Para complementar a nomenclatura apresentada na Fig.3, apresenta-se na Fig.4 um esquema completo de uma torre genérica, onde os seguintes termos são usados:

- $D$  - fluxo de líquido saindo do reservatório de condensado como produto destilado  
 $X_D$  - concentração do componente mais volátil no fluxo D  
 $h_{D}$  - entalpia específica do fluxo D  
 $L_c^+$  - massa de mistura na fase líquida, acumulada no reservatório de condensado  
 $L_{M+2}$  - fluxo de líquido que retorna à torre como refluxo  
 $X_{M+2}$  - concentração do componente mais volátil no fluxo  $L_{M+2}$   
 $q_c$  - taxa de retirada de calor no condensador  
 $V_o$  - fluxo de vapor que entra na torre devido à vaporização no gerador de vapor  
 $Y_o$  - concentração do componente mais volátil no fluxo  $V_o$   
 $h_{V_o}$  - entalpia específica do fluxo  $V_o$   
 $B$  - fluxo de líquido que deixa a torre como produto de

fundo que irá para o absorvedor

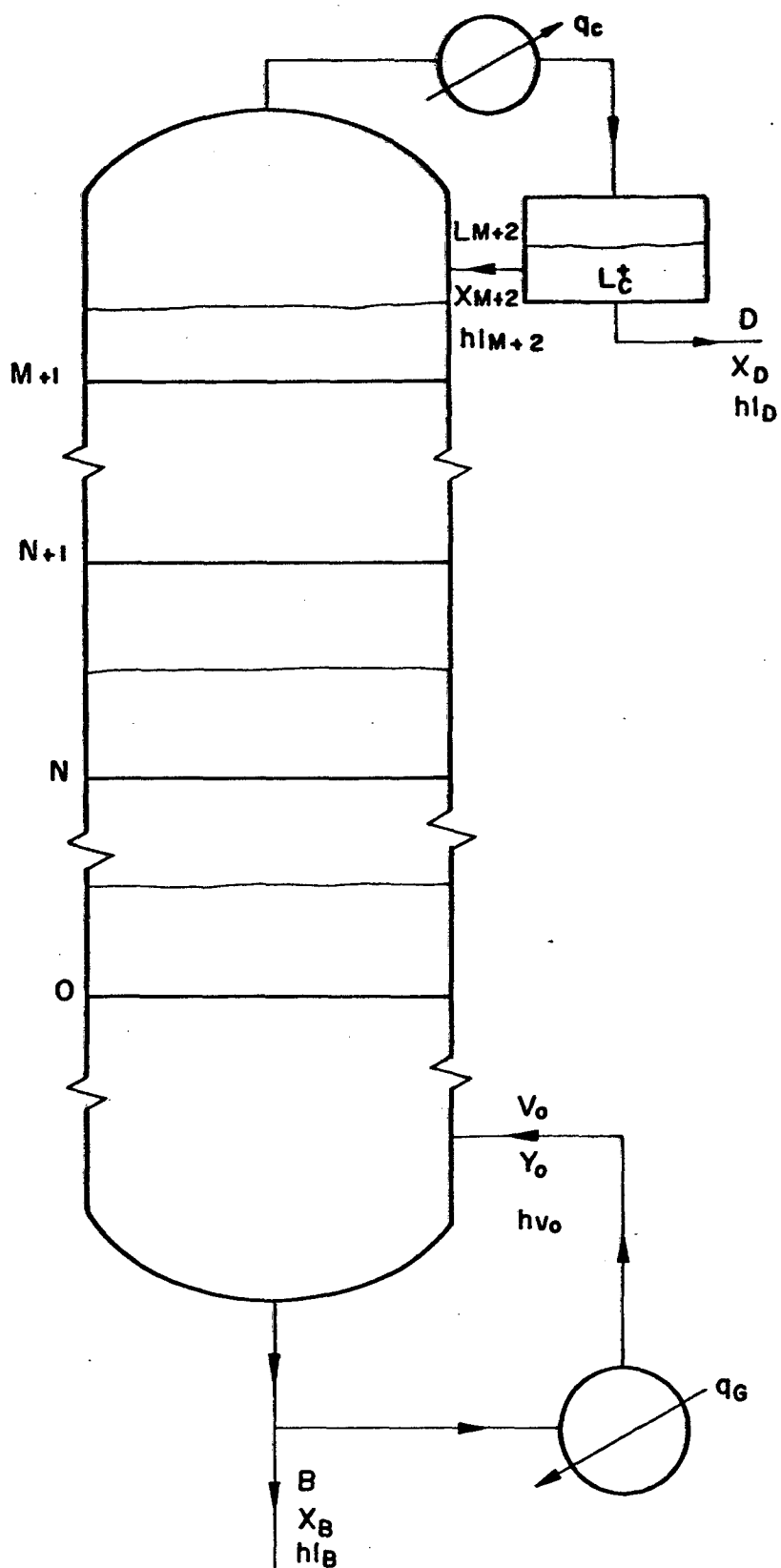


Fig.4 - Esquema da torre

- $X_B$  - concentração do componente mais volátil no fluxo B  
 $hl_B$  - entalpia específica do fluxo B  
 $q_G$  - taxa de fornecimento de calor no gerador de vapor

## 2.2 - Reservatório de condensado

O reservatório de condensado é colocado na simulação como um acessório do condensador de refluxo quando se deseja estudar um condensador como sendo um equipamento que não acumula massa, ou seja, opera simplesmente como um dispositivo de troca de calor. Todo o acúmulo de massa que pode ocorrer dentro do condensador é analisado dentro do reservatório de condensado. Este reservatório é admitido estar isolado termicamente do meio ambiente. Chama-se de condensador total aquele que condensa todo o vapor que nele é admitido, caso contrário o condensador é chamado de parcial. A Fig.5 mostra o esquema de um reservatório de condensado que opera com um condensador total.

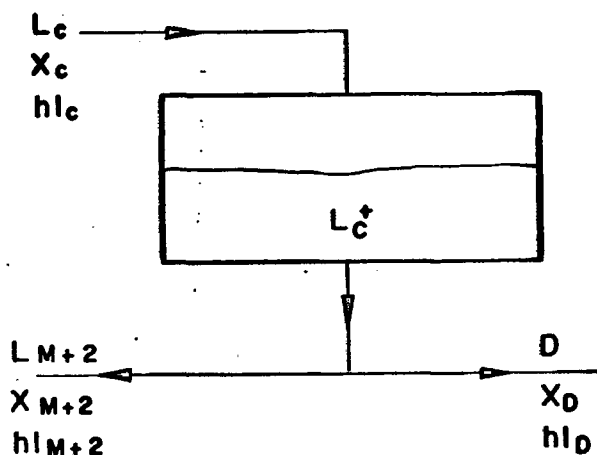


Fig.5 - Reservatório de condensado para condensador total

Caso o condensador utilizado seja do tipo parcial, um fluxo de massa constituído de líquido e vapor chega no

reservatório de condensado. O líquido que sai pelo fundo do reservatório é reinjetado na torre e o fluxo de vapor é condensado em outro condensador usado no ciclo de refrigeração. Um esquema para este tipo de reservatório de condensado é mostrado na Fig.6 .

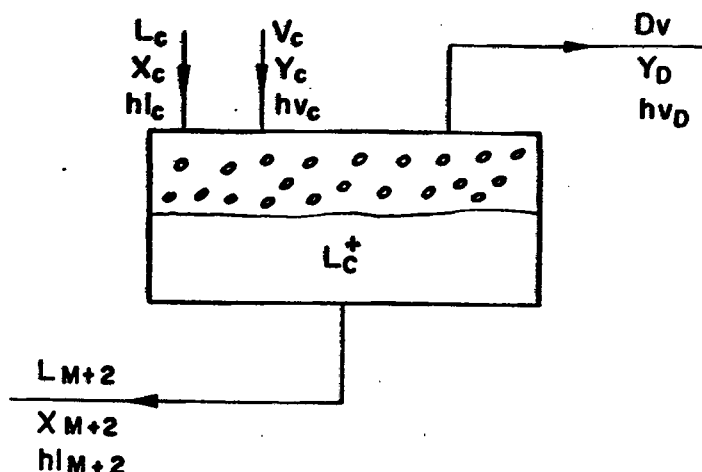


Fig.6 - Reservatório de condensado para condensador parcial

### 2.3 - Condensador de refluxo

O condensador de refluxo, nesta simulação, é considerado como um dispositivo de troca de calor com acúmulo de massa negligenciado durante o transiente e que apresenta respostas térmicas instantâneas. O esquema do condensador parcial é mostrado na Fig.7 .

Este tipo de condensador é chamado de parcial porque não condensa toda a massa de mistura na fase vapor que nele entra. No esquema da Fig.7 mostra-se o fluxo de vapor chegando (fluxo  $V_{M+1}$ ) e os fluxos de vapor e líquido saindo (respectivamente fluxos  $V_c$  e  $L_c$ ).

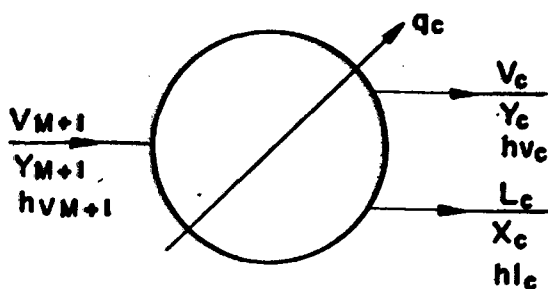


Fig.7 - Condensador parcial

Se o condensador usado for do tipo total dele sairá somente um fluxo de mistura na fase líquida, como mostra a Fig.8 .

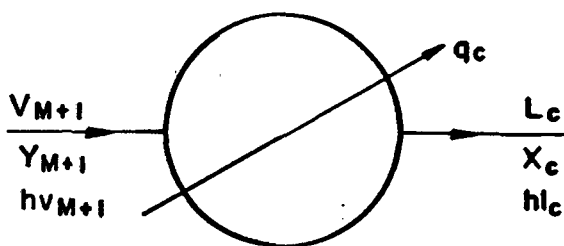


Fig.8 - Condensador total

#### 2.4 - Estágio de topo

A Fig.9 a apresenta o esquema de um estágio de topo, que nada mais é que um estágio simplificado comparado àquele mostrado na Fig.3 . Aqui não existe alimentação proveniente de uma bomba mas existe alimentação proveniente do reservatório de condensado. Deste estágio sairá o fluxo de vapor  $V_{M+1}$  que será in troduzido no condensador de refluxo. Se a torre estiver isolada

termicamente do meio ambiente não haverá retirada ou entrada de calor.

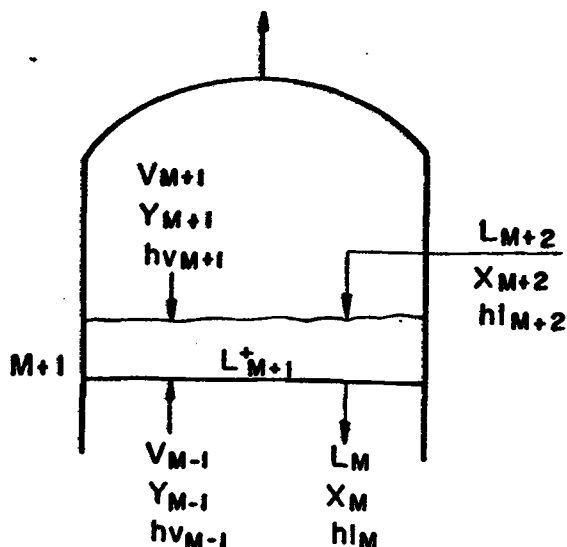


Fig.9 - Estágio de topo

Todos os estágios compreendidos entre o topo e o estágio de alimentação apresentam esquemas semelhantes ao mostrado na Fig.3 .

### 2.5 - Estágio de alimentação

O esquema do estágio de alimentação em sua forma geral é apresentado na Fig.10, admitindo-se que o fluxo de alimentação seja uma mistura constituída das fases líquido e vapor e que a torre esteja isolada termicamente do exterior.

Se a alimentação da torre for constituída de uma mistura somente na fase líquida, o termo do fluxo de vapor não aparece.

Os estágios compreendidos entre o de alimentação e o de fundo não trocam massa com o exterior da torre e seguem assim a regra geral apresentada na Fig.3 .



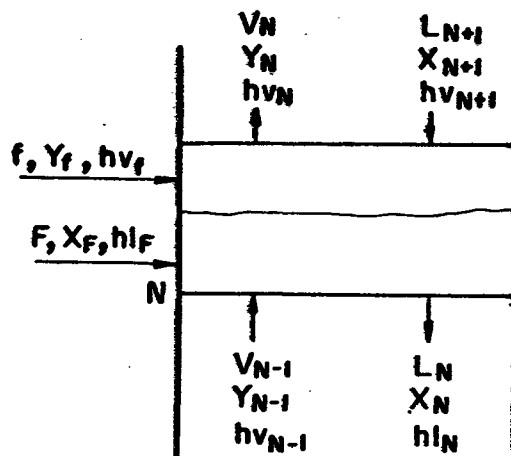


Fig. 10 - Estágio de alimentação

## 2.6 - Estágio de fundo

Este estágio, semelhantemente aos estágios de topo e de alimentação troca massa com o exterior da torre através do fluxo de fundo, como mostra a Fig.11 . Parte deste fluxo de mistura na fase líquida, pobre em componente mais volátil, irá para o absorvedor e o restante para o gerador de vapor.

O fluxo de mistura na fase líquida que irá para o absorvedor está indicado na Fig.11 como fluxo B de concentração de componente mais volátil  $X_B$ . A parcela restante do fluxo  $L_0$  que deixou o fundo da torre se dirige para o gerador e deste se - rá injetado na torre o fluxo de vapor  $V_0$  com concentração de componente mais volátil  $Y_0$ .

Como mostra o esquema o fluxo de vapor  $V_0$  não entra em contato com a massa de líquido  $L_0^+$  que se encontra acumulado no fundo da torre. Este estágio é considerado ser apenas acumulador de massa e não constituirá na simulação em um estágio de

equilíbrio.

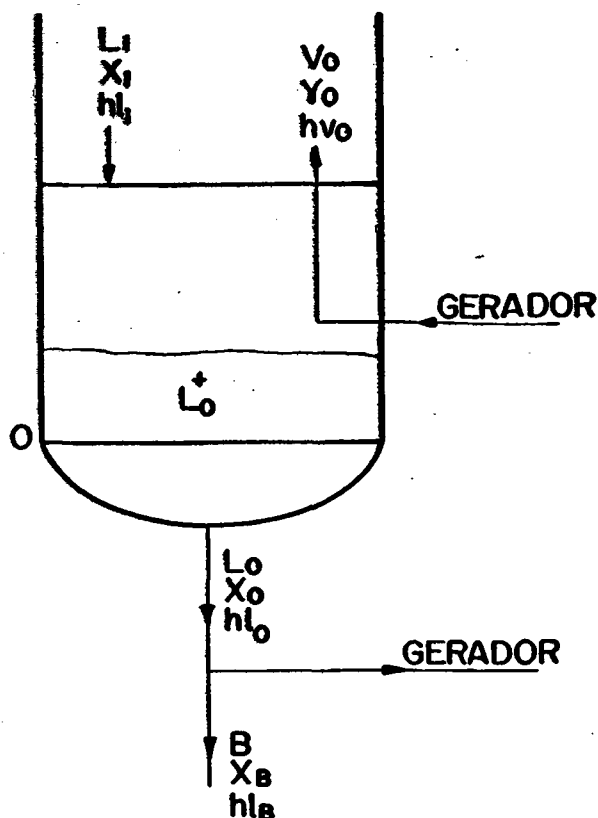


Fig.11 - Estágio de fundo

Analogamente ao condensador que se encontra no topo da torre, o gerador de vapor é considerado na simulação como sendo um dispositivo de troca de calor, com resposta instantânea durante o transiente. Nele também não se considera o acúmulo de massa que possa ocorrer, durante o transiente. Qualquer acúmulo de massa será feito no estágio de fundo. As definições de gerador total e parcial são análogas àquelas apresentadas quando se definiu condensador total e parcial. Quando todo o líquido que nele chega for vaporizado diz-se que o gerador é do tipo total. Caso contrário diz-se que ele é parcial. A Fig.12 mostra o esquema de um gerador de vapor parcial. A parcela de produto de fundo vaporizada iniciará seu movimento ascendente, passando de estágio em estágio até atingir o estágio de topo, onde deve

rã ser constituído basicamente pelo componente mais volátil (nes-  
te trabalho refere-se à amônia, pois na mistura estudada ela é  
o componente mais volátil) .

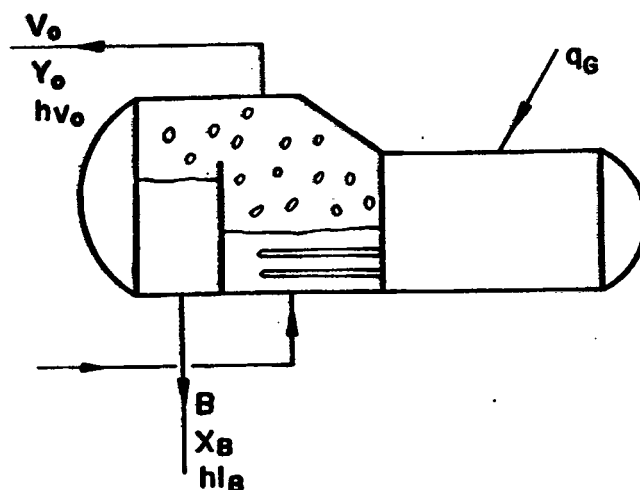


Fig.12 - Gerador de vapor parcial

A Fig.13 apresenta um gerador de vapor tipo total  
tal.

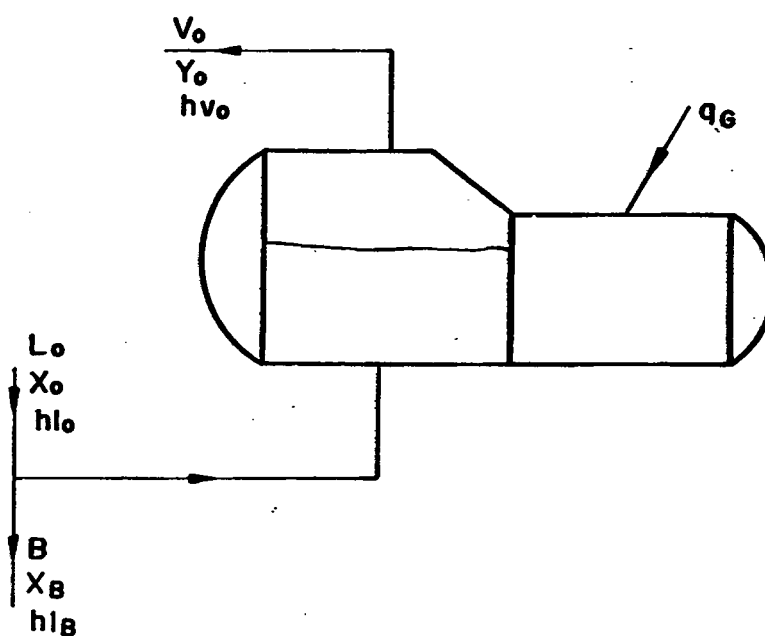


Fig.13 - Gerador de vapor total

As considerações gerais acerca do sistema que será utilizado na simulação deste trabalho foram apresentadas neste capítulo com a finalidade de permitir um entendimento do funcionamento físico do mesmo e facilitar o entendimento das equações que constituirão o modelo matemático a ser apresentado no Capítulo 3 .

O modelo matemático proposto não fica restringido pelo uso de qualquer combinação dos componentes do sistema físico, bastando somente que se escreva as equações convenientes para cada caso.

### 3 - M O D E L O M A T E M Á T I C O

#### 3.1 - Estrutura geral do modelo matemático

A estrutura geral de um modelo matemático para um processo que envolve transferência de calor e massa é constituído por:

- Equações de equilíbrio
- Equações de balanço de massa de mistura
- Equações de balanço de massa dos componentes da mistura
- Equações de balanço de energia
- Equações descrevendo o comportamento hidrodinâmico dos fluxos
- Equações de difusão

Se o processo deve ser analisado dinamicamente entrarão ainda:

- Equações de contorno
- Equações de condições iniciais

Como o sistema em estudo é a torre de destilação apresenta-se a seguir as hipóteses assumidas quando da estruturação do modelo matemático:

1. A torre encontra-se isolada termicamente do meio ambiente;
2. A eficiência de todos os estágios será baseada na eficiência Murphree da fase vapor admitida constante e igual para todos os estágios da torre;

3. A massa de vapor acumulada em cada estágio é negligenciada;
4. A pressão é igual para todos os estágios da torre, para o condensador e para o gerador de vapor;
5. O fluxo de líquido que deixa cada estágio e a massa de líquido acumulada sobre as bandejas apresentam igual concentração;
6. O fluxo de líquido que deixa cada estágio é calculado através de uma equação tipo equação de comporta ( Apêndice 2 ) ;

### 3.2 - Discussão sobre as hipóteses apresentadas

Admitir que a torre encontra-se isolada termicamente do meio ambiente não constitui uma restrição ao modelo proposto. Desde que se conheça a temperatura de cada estágio a cada instante pode-se determinar o fluxo de calor que sai pelas paredes da torre. Esta parcela de energia perdida entraria no balanço de energia que se faz em cada estágio. Desprezar a massa de vapor que se acumula em cada estágio, constitui numa hipótese razoável, pois esta massa de vapor, quando comparada à massa de líquido que se encontra sobre cada bandeja, é realmente irrisória. A pressão é admitida constante. Admiti-la constante e igual para toda a torre, para o condensador de refluxo e para o gerador de vapor não constitui uma hipótese que restringe o modelo. Conhecidas tais pressões, estas poderiam ser especificadas e introduzidas nas equações convenientes, que definem as propriedades termodinâmicas da mistura água - amônia. A eficiência do estágio é uma relação que define a capacidade que tem uma bandeja de levar as fases líquido e vapor ao estado de equilíbrio. Se a mistura na fa

se líquido que deixa a bandeja estiver em equilíbrio com a mistura na fase vapor que também está deixando esta bandeja, diz - se que o estágio apresenta uma eficiência Murphree de 100%. Para torres de pequeno porte, devido ao grande contato que existe entre as fases sobre a bandeja, a eficiência é elevada. Em torres de grande porte isto já não acontece. A eficiência varia de estágio para estágio e sobre cada bandeja tal eficiência pode variar ponto a ponto. Escolheu-se equações de comporta para se medir os fluxos de mistura na fase líquida pois este seria o método mais conveniente para torres de bandejas, devido aos aspectos inerentes à sua construção. Como os borbulhadores obrigatoriamente devem ficar imersos no líquido acumulado sobre as bandejas, uma comporta é colocada para desempenhar esta finalidade. Assim pode-se medir o fluxo que escorre da bandeja utilizando equações tipo comporta, onde tem - se o fluxo em função da crista de líquido sobre a comporta, ou o fluxo em função da massa acumulada sobre a própria bandeja, desde que se admita que a massa acumulada é a soma de duas parcelas; uma que vai da superfície da bandeja até a altura da comporta e outra que vai da altura da comporta até a altura da crista que passa por sobre a comporta.

### 3.3 - Características da torre escolhida para simulação

A torre escolhida para simulação apresenta as seguintes características:

- a. Opera com condensador de refluxo e gerador de vapor tipo total;
- b. É composta pelo estágio de topo, estágio de alimentação, estágio de fundo e dois estágios adicionais - um entre o estágio de topo e alimentação e outro entre o estágio de alimentação e o de fundo.

O condensador de refluxo e o gerador de vapor

poderiam ter sido escolhidos de qualquer tipo, pois o modelo matemático não é limitado por tais escolhas. Caso se queira mudar qualquer um destes basta que se escreva equações dos diversos balanços envolvidos de maneira fisicamente coerentes.

Os estágios de topo, de alimentação e de fundo marcam presença obrigatória no sistema, pois estes são estágios que apresentam comunicação com o exterior da torre. Os dois estágios de número 1 e 3, mostrados na Fig.14, foram escolhidos por serem estágios específicos do interior da torre e simplesmente foi colocado um para cada seção ( topo e fundo ). Esta escolha tem por finalidade dar um caráter geral à análise. Qualquer acréscimo no número de estágios intermediários não tráz informações físicas adicionais. Cada novo estágio adicionado tráz consigo um número de equações e incógnitas que não afeta o fechamento do modelo. Além disso, à medida que o vapor torna-se mais rico em amônia, a dificuldade de obter-se vapor ainda mais rico é cada vez mais difícil, como pode-se notar num diagrama de equilíbrio da mistura. Assim a crescentar um número maior de estágios não implica em produto destilado puro em amônia. Manteve-se um compromisso com o tempo de computação, pois mesmo sabendo-se, a priori, que o método iterativo é de convergência rápida a complexidade do problema e sua respectiva solução consumiria um elevado tempo de computação.

3.4 - São as seguintes as variáveis do problema, conforme apresentadas na Fig.14.

a. Condensador total e o reservatório de condensado

a.1 -  $q_c$

a.2 -  $D$

a.3 -  $X_D$

a.4 -  $h_{l_D}$

a.5 -  $P_c$

a.6 -  $L_c^+$



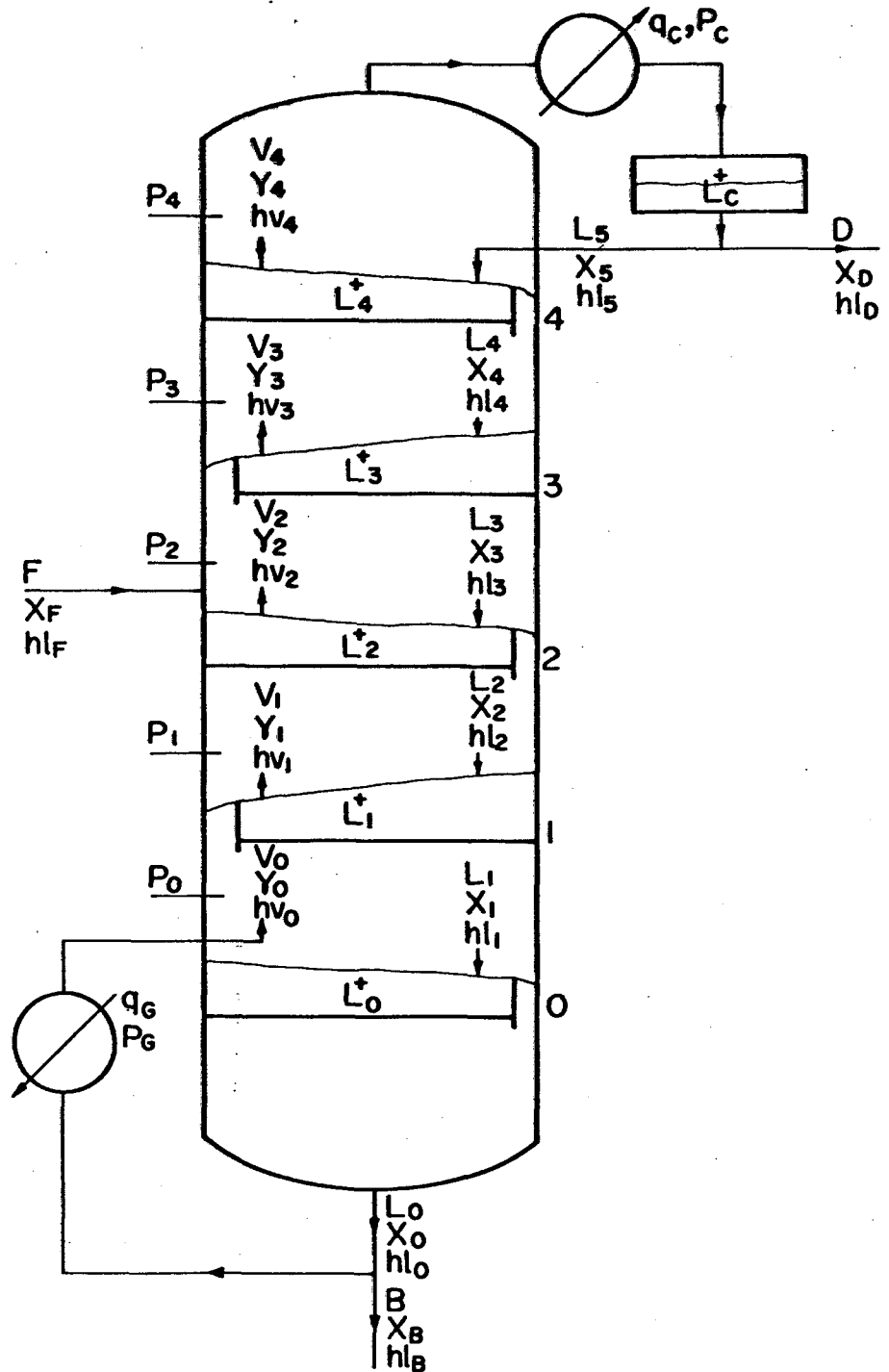


Fig.14 - Torre escolhida para a simulação

## b. Estágio 4

- b.1 -  $V_4$
- b.2 -  $Y_4$
- b.3 -  $h\nu_4$
- b.4 -  $L_5$
- b.5 -  $X_5$
- b.6 -  $hl_5$
- b.7 -  $L_4^+$
- b.8 -  $P_4$
- b.9 -  $EMV_4$

## c. Estágio 3

- c.1 -  $V_3$
- c.2 -  $Y_3$
- c.3 -  $h\nu_3$
- c.4 -  $L_4$
- c.5 -  $X_4$
- c.6 -  $hl_4$
- c.7 -  $L_3^+$
- c.8 -  $P_3$
- c.9 -  $EMV_3$

## d. Estágio 2

- d.1 -  $V_2$
- d.2 -  $Y_2$
- d.3 -  $h\nu_2$
- d.4 -  $L_3$
- d.5 -  $X_3$
- d.6 -  $hl_3$
- d.7 -  $L_2^+$
- d.8 -  $F$
- d.9 -  $X_F$
- d.10 -  $hl_F$
- d.11 -  $P_2$
- d.12 -  $EMV_2$

## e. Estágio 1

- e.1 -  $V_1$
- e.2 -  $Y_1$
- e.3 -  $h_{v_1}$
- e.4 -  $L_2$
- e.5 -  $X_2$
- e.6 -  $h_{l_2}$
- e.7 -  $L_1^+$
- e.8 -  $P_1$
- e.9 -  $EMV_1$

## f. Estágio 0

- f.1 -  $V_0$
- f.2 -  $Y_0$
- f.3 -  $h_{v_0}$
- f.4 -  $L_1$
- f.5 -  $X_1$
- f.6 -  $h_{l_1}$
- f.7 -  $L_0^+$
- f.8 -  $P_0$

## g. Gerador de vapor

- g.1 -  $q_G$
- g.2 -  $B$
- g.3 -  $X_B$
- g.4 -  $h_{l_B}$
- g.5 -  $L_0$
- g.6 -  $X_0$
- g.7 -  $h_{l_0}$
- g.8 -  $P_G$

Tem-se assim um total de 61 variáveis integrantes deste sistema, onde não aparece  $EMV_0$  porque este não constitui na simulação um estágio semelhante aos de número 1, 2, 3 e 4. As fases líquido e vapor não entram em contato sobre a bandeja

do estágio de número  $0$ . Este estágio é colocado simplesmente para fixar a comporta que medirá o fluxo  $L_0$  e para promover o acúmulo de massa que pode ocorrer no gerador de vapor.

Como nas hipóteses já apresentadas admitiu-se eficiência Murphree igual e constante para todos os estágios,  $EMV_1$ ,  $EMV_2$ ,  $EMV_3$  e  $EMV_4$ , podem ser tratadas como uma constante a ser introduzida no programa de computação. A presente simulação adota pressões constantes em todos os estágios. Apesar da pressão ser admitida igual será tratada como uma variável para que se tenha a flexibilidade de verificar a sensibilidade do sistema em relação a este parâmetro. Uma inspeção na Fig.14 mostra que  $X_5 = X_D$ ;  $hl_5 = hl_D$ ;  $X_0 = X_B$  e  $hl_B = hl_0$  e pelo fato do gerador de vapor ser do tipo total  $Y_0 = X_0$ . Por tais motivos uma nova lista de variáveis é apresentada, excluindo-se as incógnitas  $EMV_1$ ,  $EMV_2$ ,  $EMV_3$  e  $EMV_4$ , as pressões atuantes no sistema (torre, gerador de vapor e condensador de refluxo) e as variáveis  $X_0$ ,  $X_5$ ,  $hl_5$  e  $hl_0$ .

### 3.5 - Nova lista de variáveis

01. $V_4$	24. $X_F$
02. $V_3$	25. $Y_4$
03. $V_2$	26. $Y_3$
04. $V_1$	27. $Y_2$
05. $V_0$	28. $Y_1$
06. $L_5$	29. $B$
07. $L_4$	30. $D$
08. $L_3$	31. $F$
09. $L_2$	32. $P$
10. $L_1$	33. $q_G$
11. $L_0$	34. $q_C$
12. $L_4^+$	35. $hl_D$
13. $L_3^+$	36. $hl_4$

14. $L_2^+$	37. $hl_3$
15. $L_1^+$	38. $hl_2$
16. $L_0^+$	39. $hl_1$
17. $L_C^+$	40. $hl_F$
18. $X_D$	41. $hl_B$
19. $X_4$	42. $hv_4$
20. $X_3$	43. $hv_3$
21. $X_2$	44. $hv_2$
22. $X_1$	45. $hv_1$
23. $X_B$	46. $hv_0$

### 3.6 Equações constitutivas do modelo matemático

a. Equações da conservação da massa de mistura nos estágios da torre:

$$\frac{dL_4^+}{dt} = (L_5 - L_4) + (v_3 - v_4) \quad (1)$$

$$\frac{dL_3^+}{dt} = (L_4 - L_3) + (v_2 - v_3) \quad (2)$$

$$\frac{dL_2^+}{dt} = (L_3 - L_2) + (v_1 - v_2) \quad (3)$$

$$\frac{dL_1^+}{dt} = (L_2 - L_1) + (v_0 - v_1) \quad (4)$$

$$\frac{dL_0^+}{dt} = (L_1 - L_0) \quad (5)$$

b. Equação da conservação da massa de mistura passando no gerador de vapor:

$$L_0 = B + V_0 \quad (6)$$

c. Equação da conservação da massa de mistura no conjunto condensador/reservatório de condensado:

$$\frac{dL_c^+}{dt} = V_4 - L_5 - D \quad (7)$$

d. Equações da conservação da massa do componente mais volátil ( amônia ) nos estágios da torre:

$$\frac{d(L_4^+ X_4)}{dt} = ( L_5 X_5 - L_4 X_4 ) + ( V_3 Y_3 - V_4 Y_4 ) \quad (8)$$

ou ainda:

$$\frac{d(L_4^+ X_4)}{dt} = ( L_5 X_D - L_4 X_4 ) + ( V_3 Y_3 - V_4 Y_4 ) \quad (8)$$

( pelo fato de  $X_5 = X_D$  )

$$\frac{d(L_3^+ X_3)}{dt} = ( L_4 X_4 - L_3 X_3 ) + ( V_2 Y_2 - V_3 Y_3 ) \quad (9)$$

$$\frac{d(L_2^+ X_2)}{dt} = ( L_3 X_3 - L_2 X_2 ) + ( V_1 Y_1 - V_2 Y_2 ) + V X_F \quad (10)$$

$$\frac{d(L_1^+ X_1)}{dt} = ( L_2 X_2 - L_1 X_1 ) + ( V_0 Y_0 - V_1 Y_1 ) \quad (11)$$

ou ainda:

$$\frac{d(L_1^+ X_1)}{dt} = ( L_2 X_2 - L_1 X_1 ) + ( V_0 X_B - V_1 Y_1 )$$

( pelo fato de  $Y_0 = X_B$  )

$$\frac{d(L_0^+ X_0)}{dt} = L_1 X_1 - L_0 X_0 \quad (12)$$

ou ainda:

$$\frac{d(L_0^+ X_B)}{dt} = L_1 X_1 - L_0 X_B$$

e. Equação da conservação da massa do componente mais volátil no conjunto condensador de refluxo - reservatório de condensado:

$$\frac{d(L_C^+ X_D)}{dt} = V_4 Y_4 - L_5 X_D - DX_D \quad (13)$$

f. Equações do fluxo de líquido deixando os estágios da torre:

Como comentado anteriormente, estes fluxos são calculados através de equações de comporta. Mede-se estes fluxos em função da massa de mistura na fase líquida que se encontra acumulada sobre as bandejas da torre.

$$L_4 = f_1 ( L_4^+ ) \quad (14)$$

$$L_3 = f_2 ( L_3^+ ) \quad (15)$$

$$L_2 = f_3 ( L_2^+ ) \quad (16)$$

$$L_1 = f_4 ( L_1^+ ) \quad (17)$$

$$L_0 = f_5 ( L_0^+ ) \quad (18)$$

g. Equações da eficiência dos estágios 1, 2, 3 e 4 :

A eficiência do estágio é um quantificador das trocas de energia e massa que ocorrem sobre a bandeja. Uma eficiência elevada significa que o estágio da torre está colocando as fases líquido e vapor em contato íntimo, fazendo com que estas fases aproximem-se ao máximo da condição de equilíbrio. A eficiência Murphree, baseada na fase vapor é uma relação entre as concentrações do componente mais volátil na fase vapor, antes e depois do estágio, como apresentado nas equações (19) a (22),  $Y_N$  sendo o valor da concentração do componente mais volátil no fluxo de vapor que deixa o estágio N ( valor real ),  $Y_{N-1}$  a concentração do componente mais volátil no fluxo de vapor que chega no estágio N ( valor re

al ) e  $Y_N^*$  é a concentração do componente mais volátil no fluxo de vapor que deixa o estágio N, caso o estágio N fosse um estágio ideal. O estágio ideal é aquele que coloca os fluxos de líquido e vapor que deixam o estágio N no estado de equilíbrio. Pela regra de fases no estado de saturação, o estado de equilíbrio pode ser fixado pela pressão e pela temperatura. Dados P e T as concentrações do componente mais volátil nas fases líquido e vapor ficam automaticamente amarradas. O lugar geométrico representado por tais pontos num diagrama concentração - concentração ( X e Y ) denomina-se curva de equilíbrio. Como já comentado, a eficiência dos estágios será admitida constante e igual para todos os estágios.

$$EMV_4 = \frac{Y_4 - Y_3}{Y_4^* - Y_3} \quad (19)$$

$$EMV_3 = \frac{Y_3 - Y_2}{Y_3^* - Y_2} \quad (20)$$

$$EMV_2 = \frac{Y_2 - Y_1}{Y_2^* - Y_1} \quad (21)$$

$$EMV_1 = \frac{Y_1 - Y_0}{Y_1^* - Y_0} = \frac{Y_1 - X_B}{Y_1^* - X_B} \quad (22)$$

h. Equações do balanço de energia para o conjunto condensador de refluxo - reservatório de condensado:

Estes balanços de energia são feitos admitindo-se que o reservatório de condensado encontra-se isolado termicamente do meio ambiente. Como neste são envolvidas as propriedades termodinâmicas da mistura água - amônia, admite-se que tanto os fluxos de líquido como os de vapor encontram-se no estado de saturação.

$$\frac{d(L_C^+ h_{1D})}{dt} = V_4 h_{v4} - L_5 h_{l5} - D h_{1D} - q_C \quad (23)$$



$$\text{ou } \frac{d(L_C^+ h l_D)}{dt} = V_4 h v_4 - L_5 h l_D - D h l_D - q_C$$

( pois  $h l_5 = h l_D$  )

i. Equações do balanço de energia nos estágios da torre:

Nestas equações, novamente as propriedades termodinâmicas da mistura água - amônia são envolvidas e admite-se que todos os fluxos são saturados. Caso os estágios da torre apresentassem eficiência 100%, os fluxos de líquido e vapor deixariam o estágio no estado de equilíbrio. Como não será admitida eficiência de 100% para os estágios, a hipótese de se admitir os fluxos de líquido e vapor como sendo saturados, não constitui numa incoerência. Os fluxos podem ser saturados, cada um deles encontrando-se à mesma pressão, mas não à mesma temperatura. Se o tempo de contato entre as fases fosse suficientemente longo para que as fases entrassem em equilíbrio ter-se-ia então a mesma pressão e a mesma temperatura. Pode-se então afirmar que líquido deixando ou chegando no estágio encontra-se no estado de saturação, não implicando com isto que ele tenha que estar em equilíbrio com o vapor que chega ou sai do estágio.

$$\frac{d(L_4^+ h l_4)}{dt} = (L_5 h l_5 - L_4 h l_4) + (V_3 h v_3 - V_4 h v_4) \quad (24)$$

$$\frac{d(L_3^+ h l_3)}{dt} = (L_4 h l_4 - L_3 h l_3) + (V_2 h v_2 - V_3 h v_3) \quad (25)$$

$$\frac{d(L_2^+ h l_2)}{dt} = (L_3 h l_3 - L_2 h l_2) + (V_1 h v_1 - V_2 h v_2) \quad (26)$$

$$\frac{d(L_1^+ h l_1)}{dt} = (L_2 h l_2 - L_1 h l_1) + (V_0 h v_0 - V_1 h v_1) \quad (27)$$

$$\frac{d(L_0^+ h l_0)}{dt} = (L_1 h l_1 - L_0 h l_0) \quad (28)$$

$$\text{ou } \frac{d(L_0^+ hl_B)}{dt} = L_1 hl_1 - L_0 hl_B$$

( pelo fato de  $hl_0 = hl_B$  )

j. Equação do balanço de energia no gerador de vapor:

O vapor que deixa o gerador de vapor é admitido estar no seu estado de saturação.

$$L_0 hl_0 + q_G = V_0 hv_0 + Bhl_B \quad (29)$$

$$\text{ou } L_0 hl_B + q_G = V_0 hv_0 + Bhl_B$$

( pelo fato de  $hl_0 = hl_B$  )

k. Equações que definem as entalpias específicas da mistura nas fases líquido e vapor nos seus respectivos estados de saturação.

Apresenta-se aqui somente a forma das funções que calculam as entalpias específicas da mistura água - amônia. No apêndice são apresentados os polinômios utilizados na simulação.

$$hl_D = f_6 ( X_D , T_D ) \quad (30)$$

$$hl_4 = f_7 ( X_4 , T_4 ) \quad (31)$$

$$hl_3 = f_8 ( X_3 , T_3 ) \quad (32)$$

$$hl_2 = f_9 ( X_2 , T_2 ) \quad (33)$$

$$hl_1 = f_{10} ( X_1 , T_1 ) \quad (34)$$

$$hl_F = f_{11} ( X_F , T_F ) \quad (35)$$

$$hv_4 = f_{12} ( Y_4 , TV_4 ) \quad (36)$$

$$hv_3 = f_{13} ( Y_3 , TV_3 ) \quad (37)$$

$$hv_2 = f_{14} ( Y_2 , TV_2 ) \quad (38)$$

$$hv_1 = f_{15} ( Y_1 , TV_1 ) \quad (39)$$

$$hv_0 = f_{16} ( Y_0 , TV_0 ) \quad (40)$$

Tem-se assim para este modelo um sistema de 46 incógnitas e 40 equações. A simulação do regime permanente é feita fixando-se um número bem definido de variáveis que caracteriza uma torre de destilação como um sistema termodinâmico peculiar. Estas variáveis que dão à torre uma característica particular podem ser vistas em McCune et al (4). Nesta simulação foram escolhidas as seguintes variáveis:  $q_G$ ,  $F$ ,  $X_F$ ,  $P$ ,  $D$  e  $L_C^+$ . Fixando-se este grupo de 6 variáveis, as 40 demais satisfarão as equações da conservação da massa de mistura, da massa do componente mais volátil ( a massa do componente menos volátil fica automaticamente amarrada pois a mistura é binária ), as equações da conservação da energia para todos os componentes do sistema, equações de fluxo de massa de estágio em estágio, equações da eficiência dos estágios e os estados termodinâmicos da mistura. O sistema de equações apresentadas ficará assim com 46 equações e 46 incógnitas.

Destas equações, 40 já foram apresentadas e as 6 restantes são equações de controle usadas para amarrar as variáveis de interesse ( ou variá-las conforme o interesse) caracterizando assim uma determinada imposição de condições de funcionamento da torre.

A simulação em regime transiente consiste em fixar certas variáveis e variar outras. Esta variação foi feita, por exemplo, introduzindo-se no instante inicial um acréscimo percentual no fluxo de alimentação ( em forma de degrau ) e se verificou o comportamento das demais variáveis que não se encontram amarradas.

Pode-se introduzir variações tanto no fluxo de alimentação, como na concentração do componente mais volátil neste fluxo. A pressão de funcionamento da torre pode também ser variada e verificar a influência desta sobre as demais variáveis e assim por diante. Os resultados de algumas manipulações feitas são apresentados no capítulo seguinte.

Não se pode escolher aleatoriamente o grupo de variáveis que serão fixadas e/ou variadas. Por exemplo, na simulação do regime transiente se o fluxo de alimentação  $F$  sair da condição do regime permanente (introduzindo-se nele um determinado acréscimo), caso o fluxo de mistura que deixa a torre como produto de fundo seja fixado, deve-se deixar que a massa de produto destilado varie livremente, pois caso contrário estar-se-ia simulando o inundamento da torre e sua capacidade volumétrica não foi definida. Este exemplo, apesar de simples, pode ser estendido para as equações de energia e conservação da massa do componente mais volátil. A representação do funcionamento de uma torre pode ser bem visualizado através dos métodos gráficos de McCabe-Thiele e Ponchon - Savarit que se encontram claramente explicados em Smith - (11) .

### 3.6 - Algoritmo usado

Quando o regime permanente está sendo simulado não se introduz variação alguma nas variáveis controláveis do sistema . Quando a simulação em regime transiente é feita, manipula-se com as variáveis externas sem incorrer em incoerência de ordem física. Em ambas as simulações tem-se um sistema de 46 equações e 46 incógnitas para ser resolvido. As equações de conservação da massa do componente mais volátil são equações diferenciais ordinárias não lineares, as equações de comporta são também não lineares, as propriedades termodinâmicas da mistura são expressas em forma polinomial e assim por diante. Este sistema de equações que deverá ser

resolvido simultaneamente, é não-linear, e todas as variáveis envolvidas variarão ao longo do tempo, até que um novo regime permanente seja atingido. Por isto o método de Newton-Raphson foi escolhido para resolver este sistema de equações não-lineares, à medida que se caminha no tempo. O algoritmo empregado pode ser resumido nos seguintes itens:

- a. A torre está operando em regime permanente, onde todas as variáveis que definem este regime são conhecidas;
- b. Um sinal externo é introduzido no sistema afetando assim as condições de operação estabelecidas pelo funcionamento em regime permanente;
- c. A cada intervalo de tempo o método de Newton - Raphson é usado para resolver o sistema de equações não-lineares e o incremento a ser feito a cada uma das variáveis é fornecido após a iteração;
- d. Este processo de marcha, onde o método de Newton - Raphson é usado em cada estação acrescentando os incrementos às variáveis, é continuado até que se obtenha uma nova condição de operação da torre, que será um novo regime permanente.

O tratamento dado a todas as equações, que permitiu o uso do método de Newton-Raphson, baseou-se na discretização das equações. A técnica usada é apresentada no Apêndice 3 do trabalho.

## 4. RESULTADOS

### 4.1 - Simulação do regime permanente

A simulação do regime permanente é tratada como um caso particular do regime transiente. O mesmo programa de computador é usado em ambas as simulações. A operação do sistema deve satisfazer às 40 equações listadas no capítulo anterior e outras 6 equações que fixam o valor da pressão de operação da torre, a massa de mistura na fase líquida acumulada no reservatório de condensado, a massa de mistura que entra na torre como alimentação, a concentração do componente mais volátil nesse fluxo de alimentação, a massa de produto destilado e a taxa de calor fornecida ao gerador de vapor. Através do método gráfico pode-se avaliar o valor das 40 variáveis restantes e assim assumir valores iniciais e iterar até que a condição de regime permanente seja satisfeita. Quando os valores das 40 variáveis obedecerem a condição imposta pelo sistema de equações já apresentado, deixando de variar com o tempo diz-se que o regime permanente foi atingido, ou seja, quando as 40 variáveis ( 46 apresentadas na lista do capítulo anterior menos as 6 apresentadas neste parágrafo ) apresentarem uma diferença percentual de 0,1% quando calculadas nos instantes  $t+1$  e  $t$ . Na simulação do regime transiente se conhece no instante inicial o valor das 46 variáveis, sendo estes valores aqueles obtidos na simulação do regime permanente e certos sinais são impostos neste instante inicial. Analisa-se então o comportamento da torre ao longo do tem -

po até que uma nova condição de regime permanente seja atingida. Foram adotadas as seguintes restrições para se fazer a simulação do regime permanente:

- Pressão de operação	250 psia
- Taxa de calor fornecida ao gerador de vapor	17.587,08 Btu/min
- Fluxo de alimentação da torre	27,58 lbm/min
- Concentração da amônia neste fluxo	0,4225 lbm/lbm
- Fluxo de produto destilado	10,0 lbm/min

Impostas estas restrições apresenta-se no quadro 1 o valor admitido para cada uma das 46 variáveis e o valor calculado pelo programa:

Quadro 1 - Simulação do regime permanente

	Variável	Valor admitido para a simulação do regime permanente	Valor calculado quando se estabelece o regime permanente	Unidade
01	B	17,58	17,58	lbm/min
02	L <sub>0</sub>	39,56	39,48	lbm/min
03	L <sub>1</sub>	39,56	39,48	lbm/min
04	L <sub>2</sub>	39,56	39,08	lbm/min
05	L <sub>3</sub>	11,98	9,60	lbm/min
06	L <sub>4</sub>	11,98	12,78	lbm/min
07	V <sub>0</sub>	21,98	19,50	lbm/min
08	V <sub>1</sub>	21,98	19,60	lbm/min
09	V <sub>2</sub>	21,98	19,60	lbm/min
10	V <sub>3</sub>	21,98	22,78	lbm/min
11	V <sub>4</sub>	21,98	25,93	lbm/min

12	$L_0^+$	3,725	3,724	lbm
13	$L_1^+$	3,725	3,724	lbm
14	$L_2^+$	3,725	3,865	lbm
15	$L_3^+$	3,199	3,139	lbm
16	$L_4^+$	3,199	3,218	lbm
17	$L_C$	3,199	3,199	lbm
18	$X_B$	0,1125	0,1170	lbm/lbm
19	$X_1$	0,1125	0,1168	lbm/lbm
20	$X_2$	0,2725	0,2689	lbm/lbm
21	$X_3$	0,4975	0,4611	lbm/lbm
22	$X_4$	0,8400	0,8401	lbm/lbm
23	$X_D$	0,9700	0,9677	lbm/lbm
24	$Y_1$	0,4000	0,4066	lbm/lbm
25	$Y_2$	0,7150	0,7167	lbm/lbm
26	$Y_3$	0,9025	0,8951	lbm/lbm
27	$Y_4$	0,9700	0,9676	lbm/lbm
28	$hl_B$	290,77	287,28	Btu/lbm
29	$hl_1$	290,77	287,41	Btu/lbm
30	$hl_2$	173,58	175,92	Btu/lbm
31	$hl_F$	91,05	91,03	Btu/lbm
32	$hl_3$	63,75	75,75	Btu/lbm
33	$hl_4$	54,40	54,54	Btu/lbm
34	$hl_D$	83,50	82,98	Btu/lbm
35	$hv_1$	719,23	976,96	Btu/lbm
36	$hv_2$	616,89	803,88	Btu/lbm
37	$hv_3$	569,99	689,64	Btu/lbm
38	$hv_4$	766,77	630,15	Btu/lbm
39	$hv_0$	1 100,00	1 090,42	Btu/lbm
40	$q_C$	10 376,54	14 191,10	Btu/min
41	P	250,00	250,00	psia
42	$L_5$	11,98	15,93	lbm/min
43	D	10,00	10,00	lbm/min
44	F	27,58	27,58	lbm/min



45	$x_F$	0,4225	0,4225	lbm/lbm
46	$q_G$	17 587,08	17 587,08	Btu/min

#### 4.2 - Simulação do regime transiente

As condições para a simulação do regime transiente são as apresentadas no quadro 1. Vários testes foram feitos onde se procurou analisar tanto o comportamento da torre de destilação conforme impunha sobre ela diversos sinais de entrada como a precisão destes resultados. Estes sinais foram selecionados imaginando-se que a torre em estudo vá operar no sistema de refrigeração por absorção, onde o fluxo de alimentação, a taxa de calor fornecida ao gerador de vapor, o fluxo de produto destilado, o fluxo de produto de fundo e as respectivas concentrações de amônia nestes fluxos bem como a pressão de operação da torre constituem parâmetros de grande importância quando se deseja prover o ciclo de refrigeração por absorção de boas condições de funcionamento.

##### 4.2.1 - Influência do incremento de tempo usado nas equações discretizadas

Nesta primeira análise de resultados deseja-se saber qual é a influência do incremento de tempo usado nas equações discretizadas, sobre a informação que se obtém de cada variável. Como as equações foram discretizadas espera-se que este parâmetro do modelo matemático influencie nas respostas dinâmicas das variáveis. Espera-se que uma solução mais refinada ou precisa é obtida quando se usa incrementos de tempo cada vez menores. Mas na simulação digital deve-se manter um compromisso entre a precisão desejada versus custo/hora máquina. Conforme se usasse um incremento de tempo ou outro foi notado que o número de iterações necessárias na solução do sistema de equações não-lineares pelo método

todo de Newton-Raphson não variava significativamente. Logo é fácil concluir que para se atingir uma nova condição de regime permanente após a introdução de um sinal na torre, usando-se incrementos de tempo menores será consumido um tempo de computação maior. Testando o programa no computador IBM-360/40 para o incremento de tempo de 0,05 minuto gasta-se 6 horas de computação, enquanto para um incremento de 1 minuto gasta-se 1 hora ( nas mesmas condições de teste, realizado com um acréscimo no fluxo de alimentação de 10% ).

Para se testar a influência do incremento de tempo sobre a informação obtida para cada variável foi adotado o seguinte procedimento:

- a. A condição inicial é fornecida pelos valores apresentados no quadro 1, com a torre operando em regime permanente;
- b. Perturba-se o regime permanente, acrescentado 10% ao fluxo de alimentação, mantendo-se fixas a pressão, a taxa de calor fornecida ao gerador de vapor, o fluxo de produto destilado, a concentração de amônia no fluxo de alimentação e a massa de mistura acumulada no reservatório de condensado;
- c. Apresenta-se em forma gráfica o acréscimo percentual sofrendo por aquelas variáveis que apresentaram maior discrepâncias num dado instante, plotando-se na abscissa o tempo em minutos e na ordenada o acréscimo percentual, tomando-se como base a condição do regime permanente. Em cada gráfico é mostrado o tipo de sinal imposto ao sistema ( por exemplo,  $ACREF = 10\%$ , quando a variável  $F$  é acrescentada de 10% );
- d. Para se analisar a distorção na informação em um mesmo instante, toma-se como base a informação obtida usando-se o menor incremento de tempo, supondo que esta seja a que mais se aproxima da solução exata.

1º caso: Análise da variável B, cujo valor no regime permanente é de 17,58 lbm/min.

No quadro 2 mostra-se os resultados obtidos para a variável B ao longo do tempo para diversos incrementos de tempo.

Quadro 2 - Comportamento da variável B

Tempo ( min )	Incrementos ( min )			
	0,05	0,10	0,20	0,40
0,05	18,76			
0,10	19,65	19,34		
0,15	20,08			
0,20	20,25	20,08	19,78	
0,25	20,31			
0,30	20,33	20,28		
0,35	20,33			
0,40	20,33	20,32	20,25	20,04

No instante  $t=0,2$  minuto, conforme se use incrementos de tempo de 0,05 , 0,10 ou 0,20 minuto tem-se uma discrepância na informação, comparada com aquela fornecida pelo incremento igual a 0,05 minuto de:

$$\frac{20,08 - 20,25}{20,25} \times 100 = - 0,84\%$$

Para o incremento de tempo de 0,10 minuto e

$$\frac{19,78 - 20,25}{20,25} \times 100 = - 2,32\%$$

para o incremento de tempo de 0,20 minuto.

No instante  $t = 0,4$  minuto pode-se fazer a mesma comparação conforme se use incrementos de tempo iguais a 0,05 , 0,10 , 0,20 e 0,40 minuto e comparar a discrepância na informação. toman -

do-se novamente como base o incremento igual a 0,05 minuto:

$$\frac{20,32 - 20,33}{20,33} \times 100 = - 0,05 \%$$

para o incremento de tempo igual a 0,20 minuto e

$$\frac{20,04 - 20,33}{20,33} \times 100 = - 1,42\%$$

para o incremento de tempo igual a 0,40 minuto.

É mostrado na figura 15 o comportamento da variável B durante o tansiente. Para diversos incrementos de tempo usados no programa de computação a nova condição de regime permanente é sempre obtida independente do incremento de tempo usado e esta nova condição de regime permanente é estabelecida com um mesmo acrésimo percentual na variável B independente do incremento usado, pois o processo iterativo só cessaria quando se atingisse a diferença de 0,1% nos instantes t+1 e t nos valores das 40 variáveis, como já foi dito.

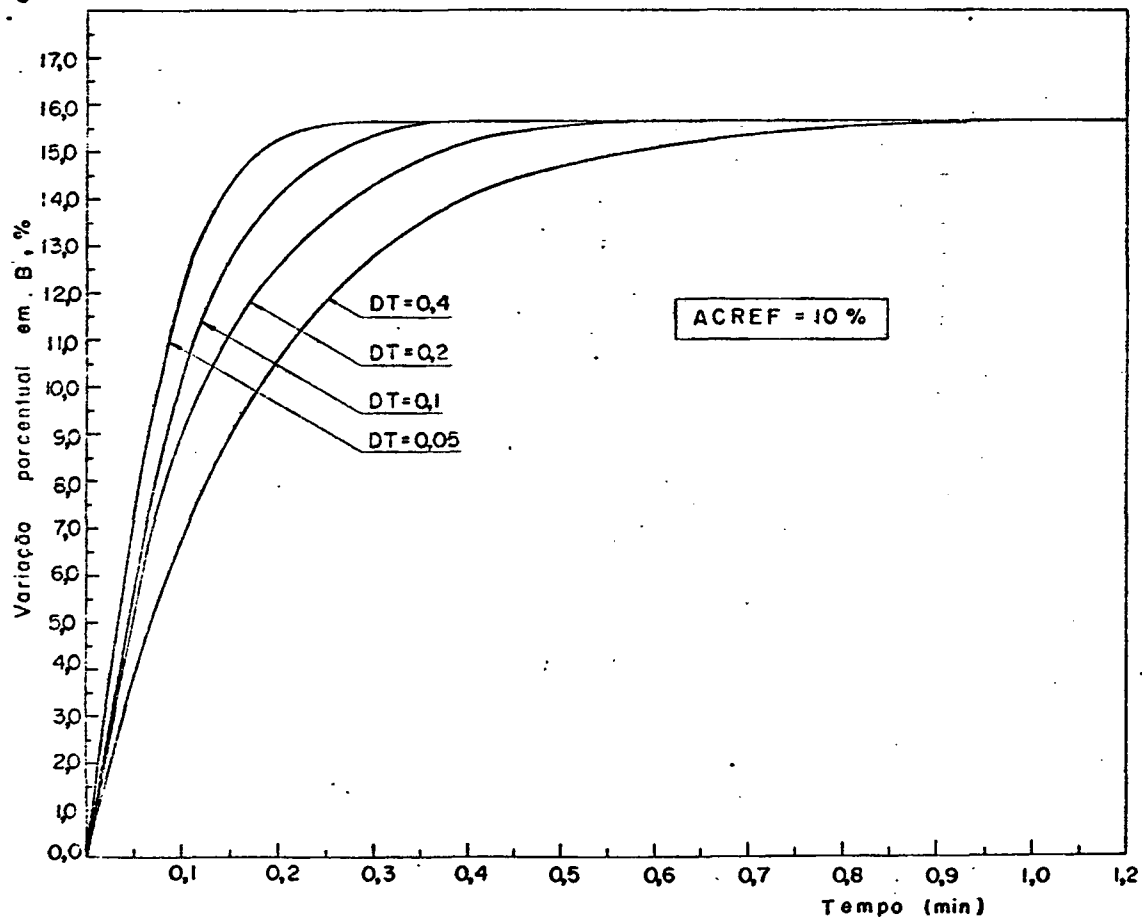


Fig.15 - Comportamento da Variável B

2º caso: Análise da variável  $X_B$ , cujo valor no regime permanente é de 0,1170 lbm/lbm

No quadro 3 apresenta-se os valores obtidos na simulação para os instantes julgados de maior interesse, quando se dá enfoque à análise da discrepância do sinal conforme se use diferentes incrementos de tempo.

Quadro 3 - Variável  $X_B$

Tempo ( min )	Incrementos ( min )			
	0,05	0,10	0,20	0,40
0,05	0,1179			
0,10	0,1196	0,1197		
0,15	0,1214			
0,20	0,1233	0,1230	0,1227	
0,25	0,1249			
0,30	0,1264	0,1260		
0,35	0,1278			
0,40	0,1289	0,1285	0,1278	0,1269

Tomando o incremento de 0,05 minuto como base nota-se que a medida que se usa incrementos maiores a informação num mesmo instante torna-se mais afastada. Estas diferenças ocorrem mais fortemente nos instantes iniciais e tendem a zero conforme o tempo passa. Este fato pode ser claramente mostrado com a apresentação das figuras 16, 17, 18 e 19, onde são mostrados o comportamento das variáveis  $X_B$  e  $X_2$ . Isto acontece porque independentemente do tamanho do incremento de tempo usado a nova condição de regime permanente é sempre atingida.

A variável  $X_B$  representa a concentração do componente mais volátil no fluxo de mistura na fase líquida que deixa a torre como produto de fundo e  $X_2$  esta mesma concentração no fluxo  $L_2$ .

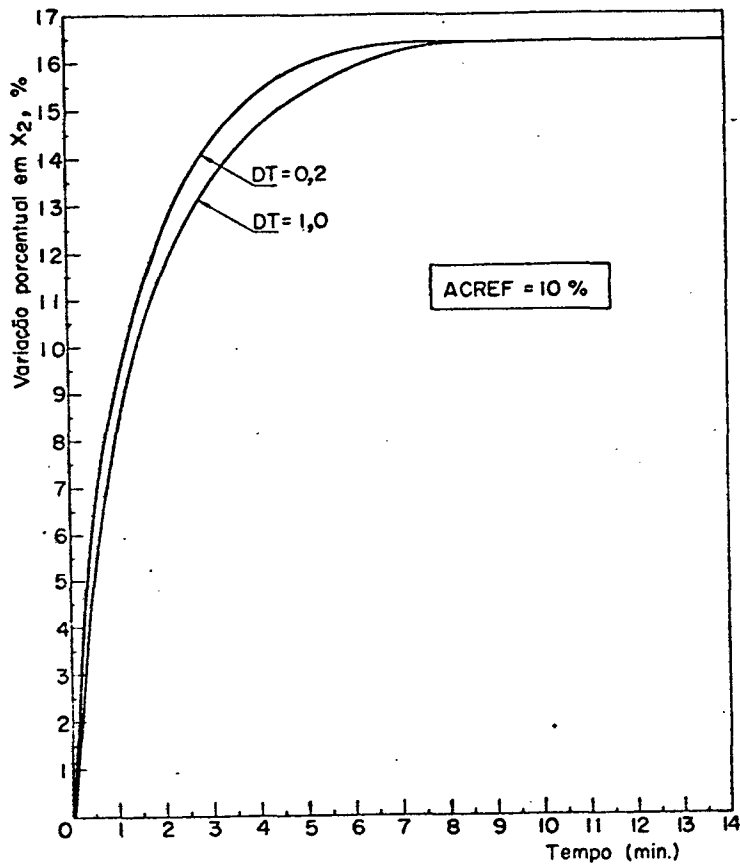


Fig.16 - Comportamento da variável  $X_2$  conforme se use incrementos de tempo iguais a 0,2 ou 1,0 minuto.

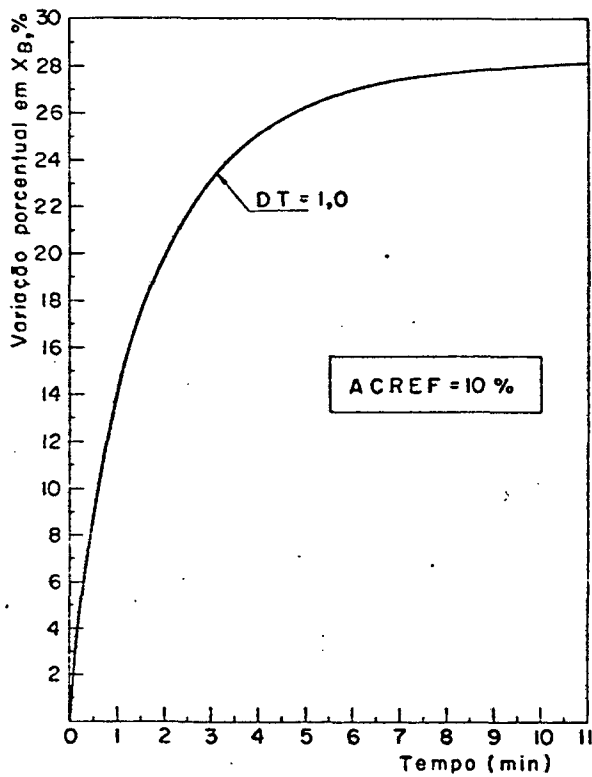


Fig.17 - Comportamento da variável  $X_B$  para incremento de tempo igual a 1,0 minuto.

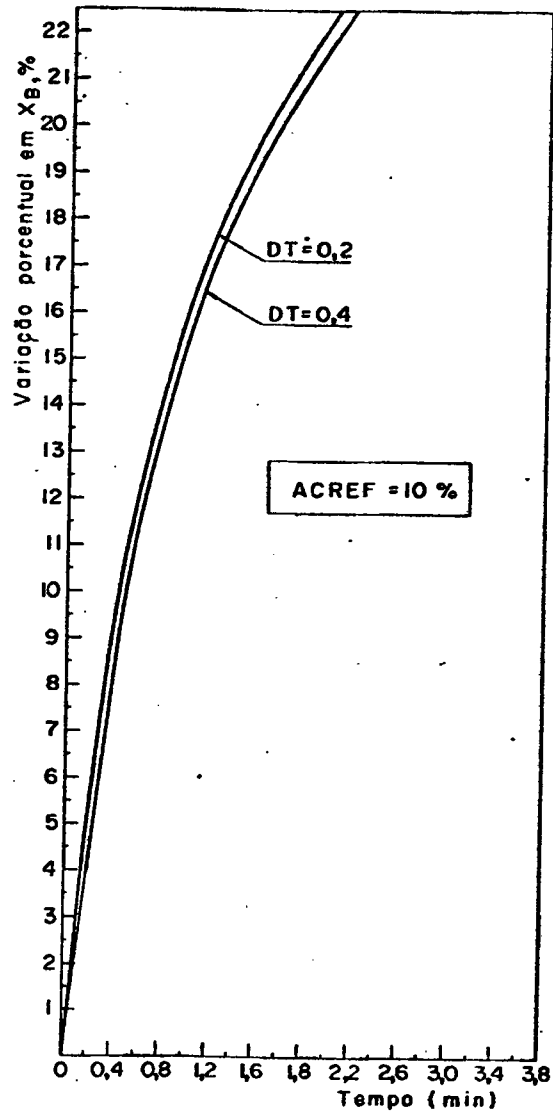


Fig.18 - Comportamento da variável  $X_B$  para incrementos de tempo iguais a 0,2 e 0,4 minuto

Estas variáveis estão sendo apresentadas porque foram estas que apresentaram maior discrepância na resposta obtida na simulação dentre todo aquele grupamento listado no capítulo anterior. Principalmente no início da contagem do tempo os desvios verificados são os maiores. Nenhuma oscilação no modelo matemático foi verificada durante o processo iterativo.

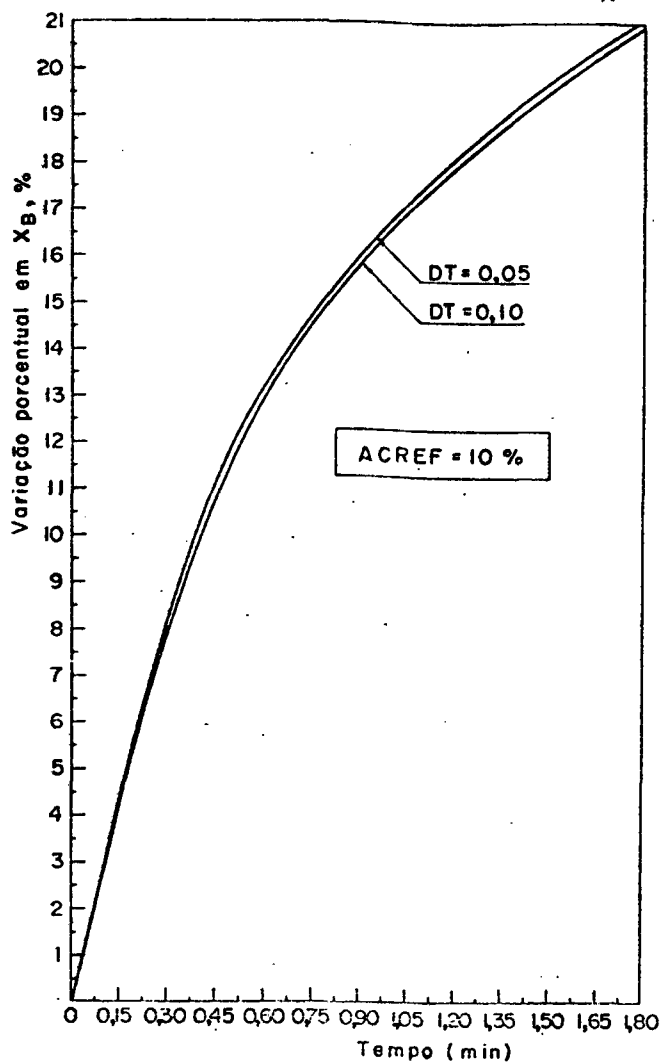


Fig.19 - Comportamento da variável  $X_B$  para incrementos de tempo iguais a 0,05 e 0,10 minuto.

#### 4.3 - Resultados obtidos na simulação transiente para vários sinais introduzidos na torre de destilação.

Apresentados os resultados que mostraram a influência de se usar um incremento de tempo ou outro no programa de computação, mostra-se nos itens seguintes o comportamento de diversas variáveis, conforme se introduz no sistema diversos tipos de sinais. Na apresentação destes resultados o seguinte procedimento é adotado:

- a. O incremento de tempo para todos os casos apresentados é igual a 0,4 minuto;



- b. Na abscissa dos gráficos é plotado o tempo em minutos e na ordenada o acréscimo percentual sofrido pela variável ao longo do tempo, tomando-se como base o seu valor na condição de regime permanente apresentado no quadro 1 ;
- c. Em cada gráfico é mostrado o tipo de sinal que foi introduzido de forma abreviada ( tal como : ACREXF : representando um acréscimo na variável  $X_F$ , ACREP: representando um acréscimo na variável P e assim por diante. )

#### 4.3.1 - Acréscimo na concentração da amônia no fluxo de alimentação de 20%.

Mostra-se nas figuras 20, 21 e 22 a influência do acréscimo da concentração da amônia no fluxo de alimentação sobre as concentrações dos fluxos de líquido e vapor. Tanto o fluxo de líquido como o de vapor tornam-se mais ricos em amônia pelo fato de se alimentar a torre com fluxos mais ricos em amônia, como era esperado, mesmo mantendo a pressão do sistema e a taxa de calor fornecida ao gerador de vapor constantes. A nova condição de regime permanente apresentará fluxos mais ricos deste componente.

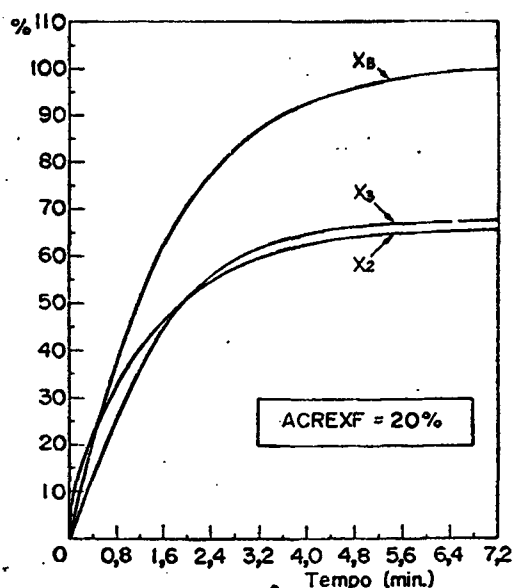


Fig. 20 - Variáveis  $X_B$ ,  $X_3$  e  $X_2$

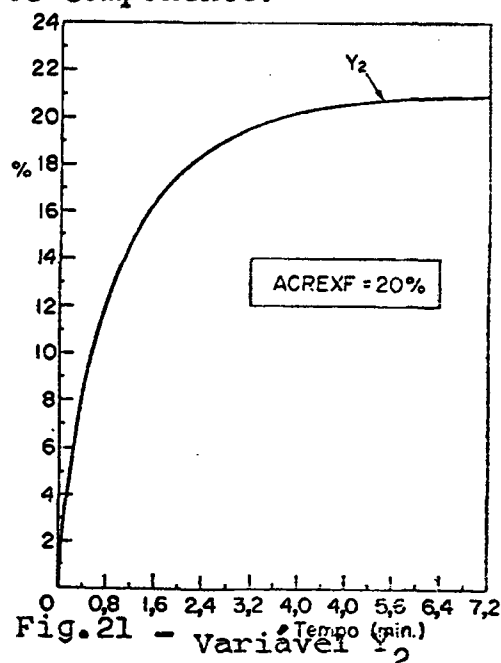


Fig. 21 - Variável  $Y_2$

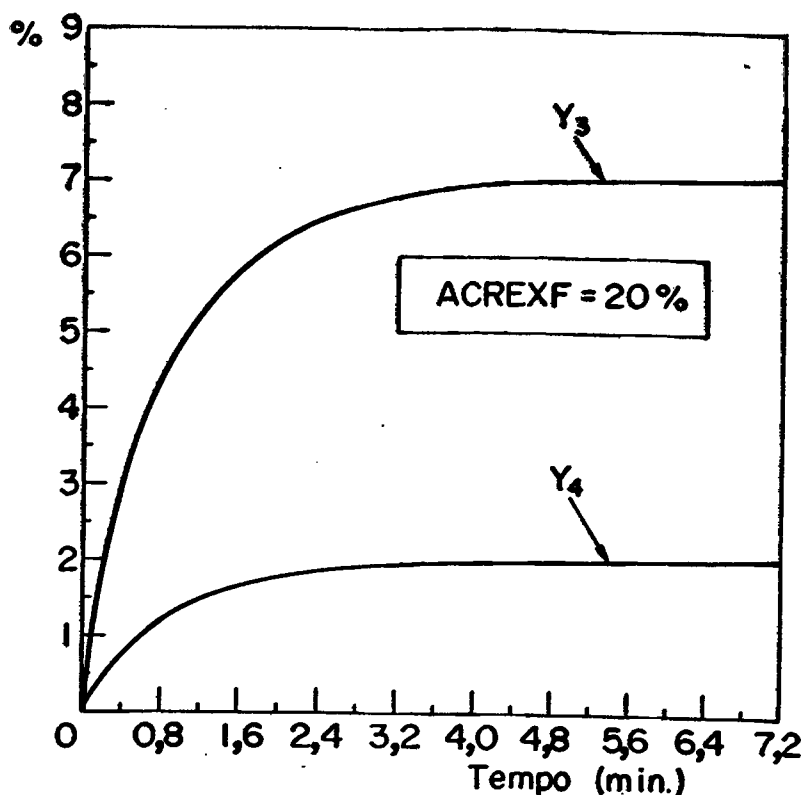


Fig.22 - Comportamento das variáveis  $Y_3$  e  $Y_4$  para um enriquecimento na concentração do fluxo de alimentação em 20% .

#### 4.3.2 - Decréscimo da concentração de amônia no fluxo de alimentação de 20% .

Mostra-se nas figuras 23, 24 e 25 a influência de se empobrecer o fluxo de alimentação da torre do componente mais volátil ( amônia ) .A nova condição de regime permanente, contrariamente ao item anterior, se estabelece com fluxos empobrecidos deste componente.

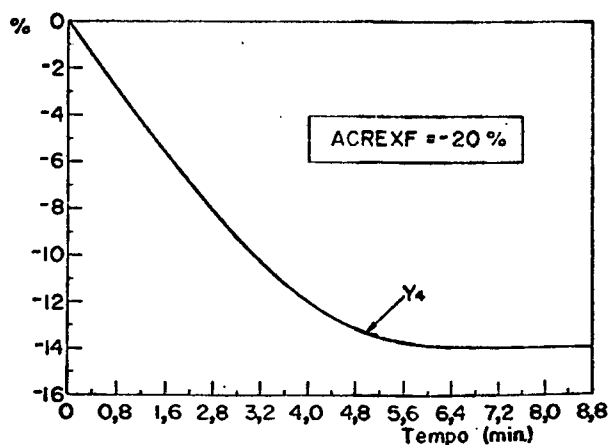


Fig.23 - Comportamento da variável  $Y_4$  para um empobrecimento em  $X_F$  de 20% .

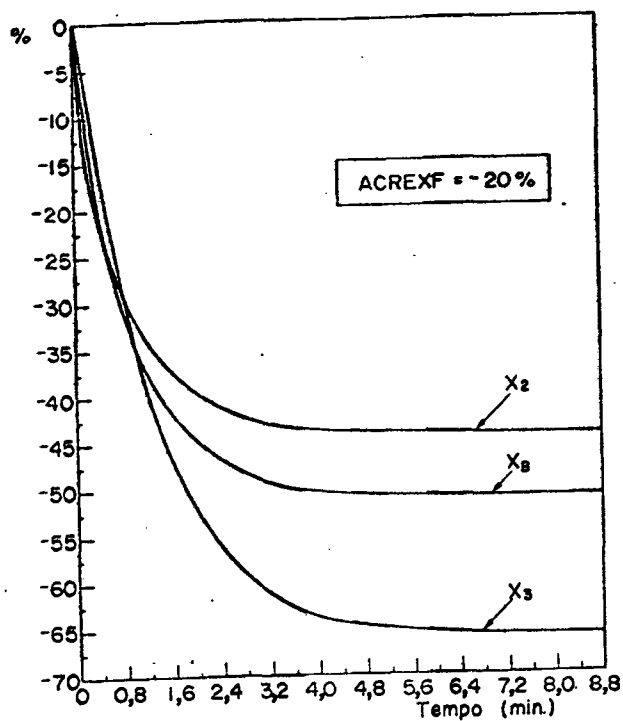


Fig. 24 - Comportamento das variáveis  $X_2$ ,  $X_E$  e  $X_3$ .

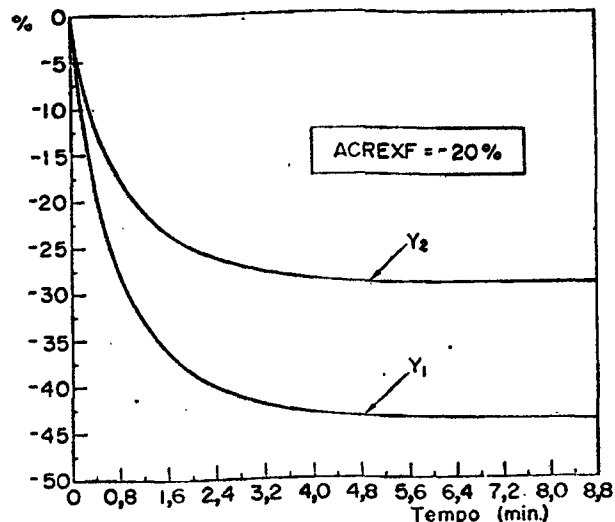


Fig. 25 - Comportamento das variáveis  $Y_2$  e  $Y_1$ .

#### 4.3.3 - Influência da variação da pressão do sistema.

Apresenta-se os resultados obtidos para acréscimo e decréscimo na pressão de operação da torre. Os resultados apresentados nas figuras 26 e 27 foram obtidos variando-se a pressão de 20% e -20% respectivamente. A informação substancial que as figuras estão a mostrar é que a pressão sendo variada desta ordem não afeta as concentrações dos fluxos de líquido e de vapor de forma exagerada.

A maior variação verificada dentre todas as curvas mostradas tanto na figura 26 como na figura 27 foi notada no fluxo  $L_3$  onde sua concentração  $X_3$  sofreu um acréscimo percentual de 7,5% comparado com o valor que ele apresentava na condição de regime permanente anterior.

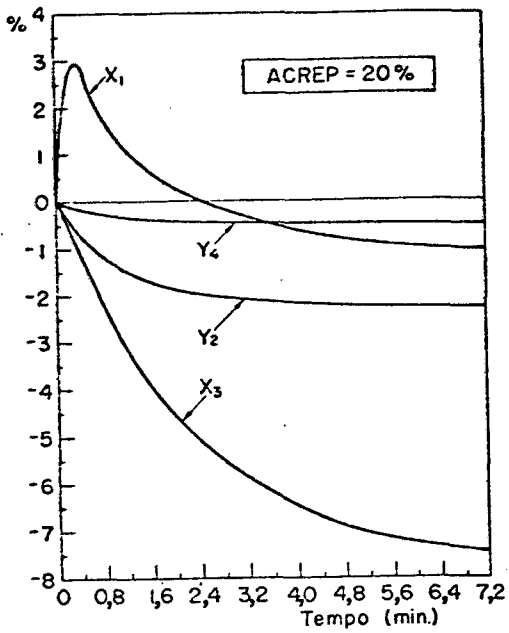


Fig.26 - Influência nas diversas concentrações da torre para um acréscimo na pressão de 20%

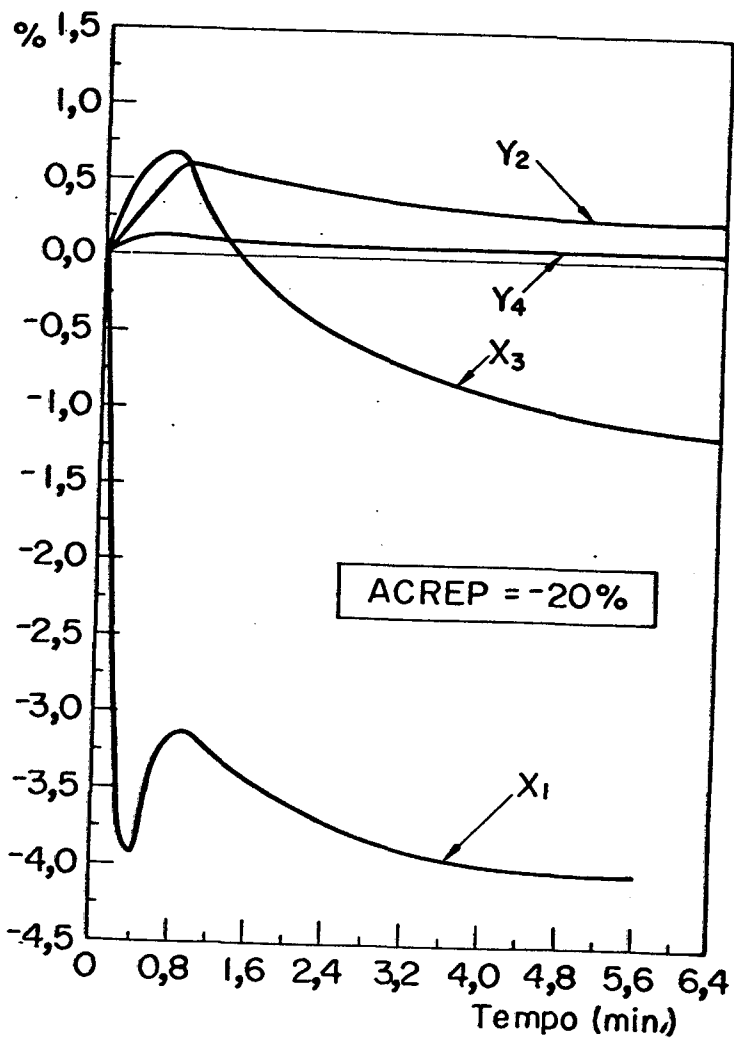


Fig.27 - Influência nas diversas concentrações da torre para um decréscimo na pressão de 20% .

#### 4.3.4 - Influência da variação da taxa de calor fornecida ao gerador de vapor.

O primeiro teste foi feito acrescentando-se um incremento a esta taxa de calor de 50%. Como o fluxo de alimentação (F) e o fluxo de produto destilado (D) foram mantidos constantes, o fluxo de fundo (B) fica automaticamente amarrado. Assim a influência deverá ser verificada somente nos fluxos internos à torre. Como os fluxos de vapor e líquido se processam em sentidos opostos, para que seja respeitados o princípio da conservação da massa, deverá ocorrer acréscimos tanto nos fluxos de vapor como nos fluxos de líquido. Isto é mostrado na figura 28.

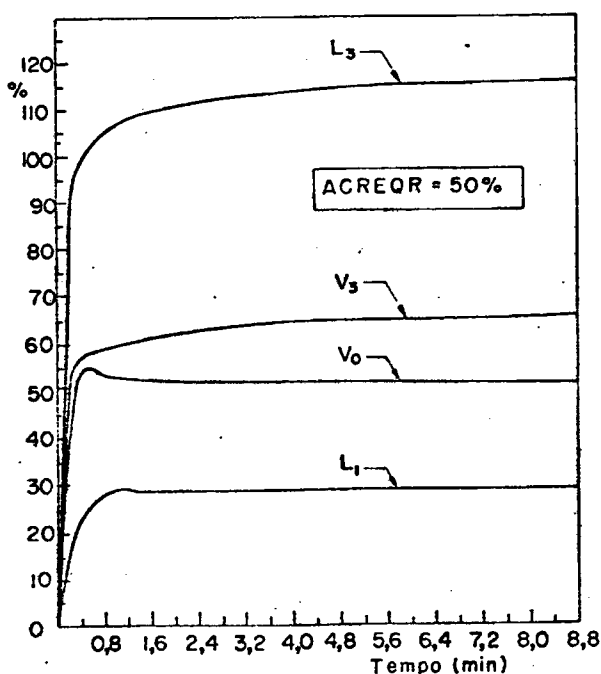


Fig.28 - Comportamento dos fluxos internos da torre.

Uma maior solicitação é requerida no condensador de refluxo, mostrada na figura 30 e o fluxo de vapor que saía pelo topo da torre apresentou um acréscimo percentual pouco sensível na nova condição de regime permanente, conforme a Fig.29 mostra, levando-se em consideração que a taxa de calor fornecida pelo gerador de vapor apresentou uma elevação substancial.

As figuras 29 e 30 mostram o comportamento das concentrações de amônia nos fluxos  $V_4$ ,  $L_3$  e  $L_1$  durante o transiente,

comprovando assim que a nova condição de regime permanente não apresentará produto de topo mais rico em amônia somente com a elevação da taxa de calor fornecida ao gerador de vapor.

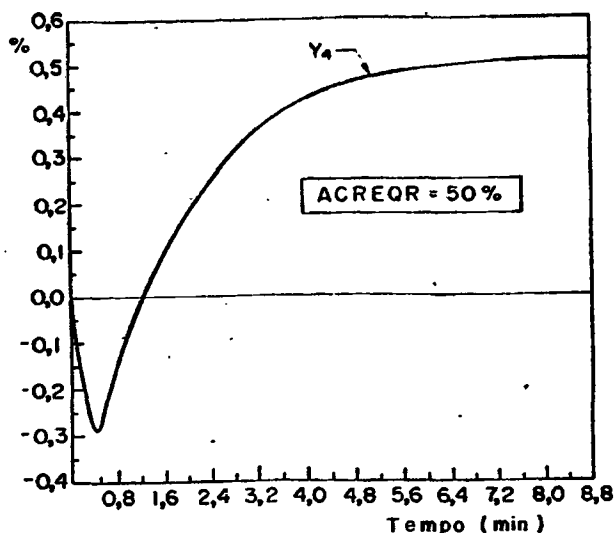


Fig. 29 - Comportamento da variável  $Y_4$ .

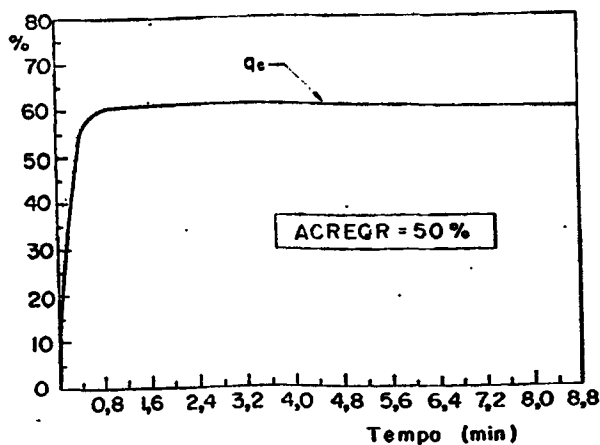


Fig. 30 - Comportamento da variável  $q_c$ .

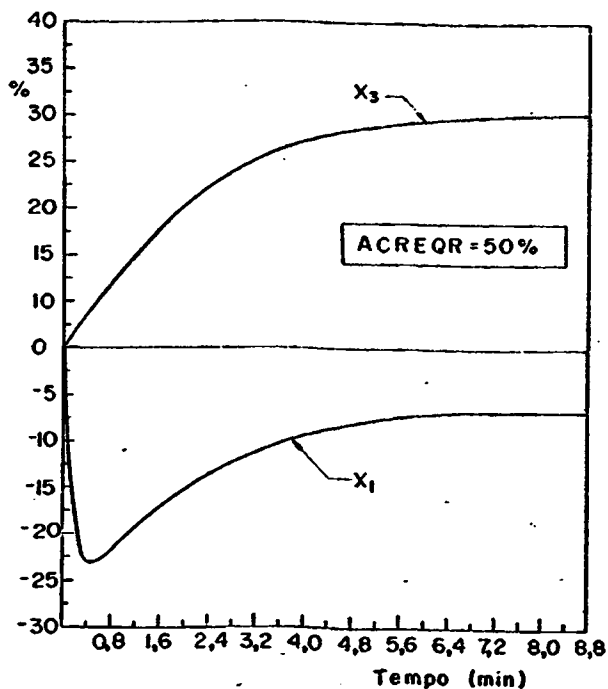


Fig. 31 - Comportamento da variável  $X_3$  e da variável  $X_1$ .

Diminuindo a taxa de calor fornecida ao gerador de vapor em 20% o argumento adotado no parágrafo anterior é endossado pela apresentação das figuras 32, 33 e 34: os fluxos de líquido e vapor internos são diminuídos ( não na mesma proporção porque o sinal, apesar de contrário, não tem a mesma intensidade), a taxa de calor retirada do condensador de refluxo é diminuída e novamente não é notada a variação sensível na concentração da amônia no fluxo de vapor que atinge o topo da torre ( $Y_4$ ).

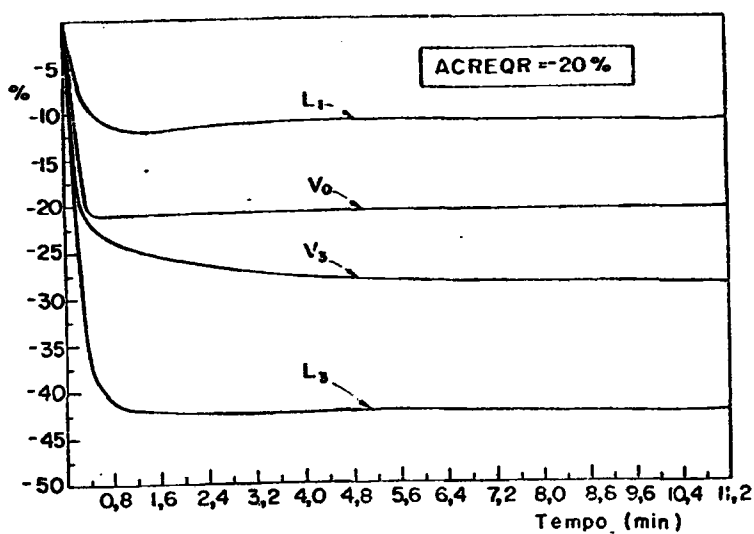


Fig.32 - Influência da diminuição da taxa de calor do gerador de vapor nos fluxos internos.

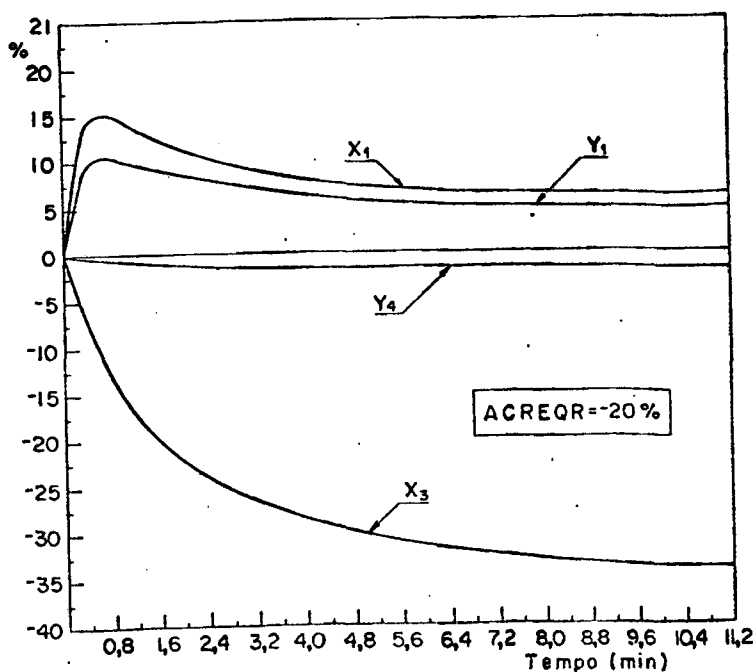


Fig.33 - Influência da diminuição da taxa de calor fornecida ao gerador de vapor sobre as concentrações .

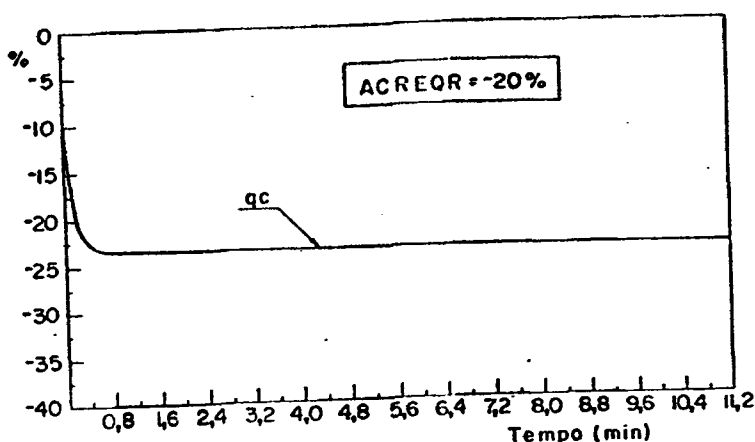


Fig.34 - Influência sobre a taxa de retirada de calor no condensador de refluxo.

#### 4.3.5 - Influência de impor sobre o sistema sinais de grande magnitude.

Para se verificar o comportamento da técnica utilizada na simulação foi introduzido um tipo de sinal que se espera, não aconteça na prática, em condições normais de operação. O objetivo deste teste é verificar se a convergência do problema, com o algoritmo usado, não seria afetado. O tipo de sinal escolhido consistiu em aumentar o fluxo de alimentação da torre de 100%: a figura 35 mostra o comportamento das variáveis  $B$  e  $L_3$ . Como o fluxo de alimentação é fornecido à torre no estado de líquido saturado, o fluxo de fundo ( $B$ ) sofreu um acréscimo percentual elevado e o fluxo  $L_3$ , que se encontra acima da alimentação sofreu menor influência uma vez que o calor do gerador de vapor manteve-se constante. Os fluxos de líquido e vapor que se encontram abaixo da alimentação quanto à composição de amônia (Fig.36) foram enriquecidos. Novamente o fluxo de vapor que atinge o topo da torre ( $V_4$ ) é pouco afetado como mostra a Fig.37. No estágio de alimentação verificase o maior acúmulo de massa na nova condição de regime permanente sendo este resultado apresentado na Fig.38. O modelo matemático apresentou o mesmo comportamento ao longo das iterações, não se ve-



rificando, mesmo com um sinal deste tipo, nenhum tipo de oscilação.

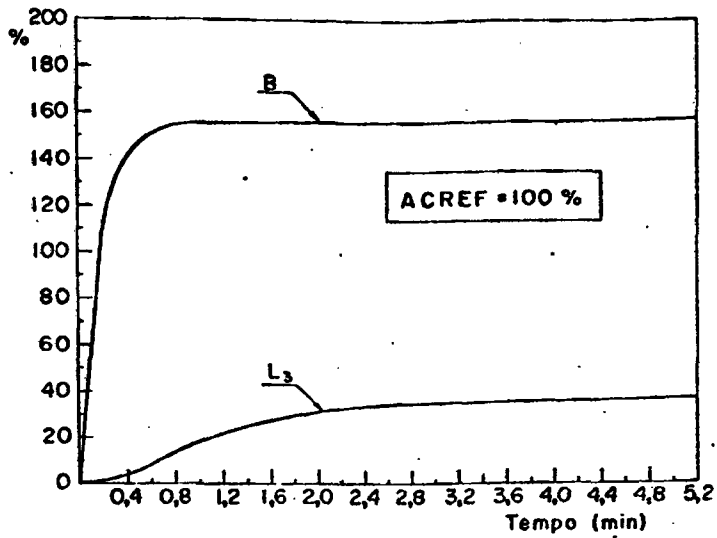


Fig. 35 - Comportamento das variáveis B e  $L_3$ .

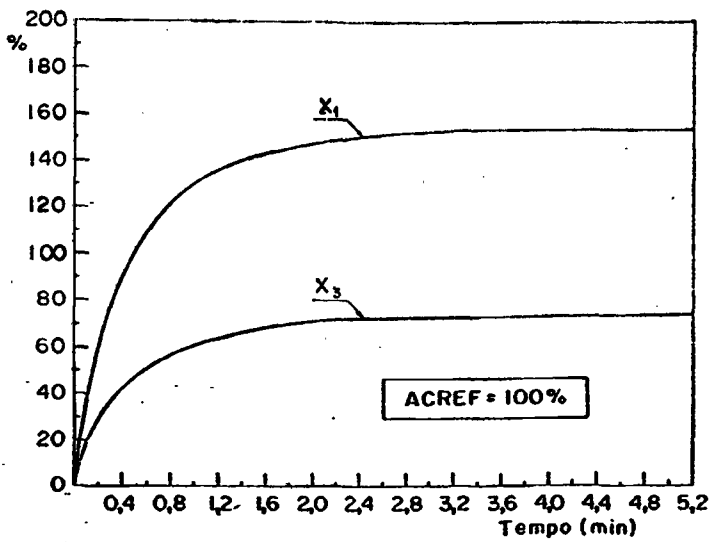


Fig. 36 - Comportamento das concentrações nos fluxos de líquido.

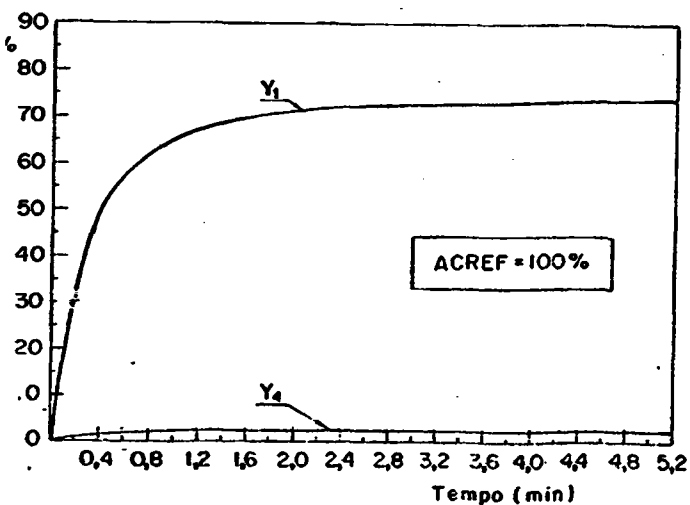


Fig. 37 - Influência nas concentrações dos fluxos de vapor.

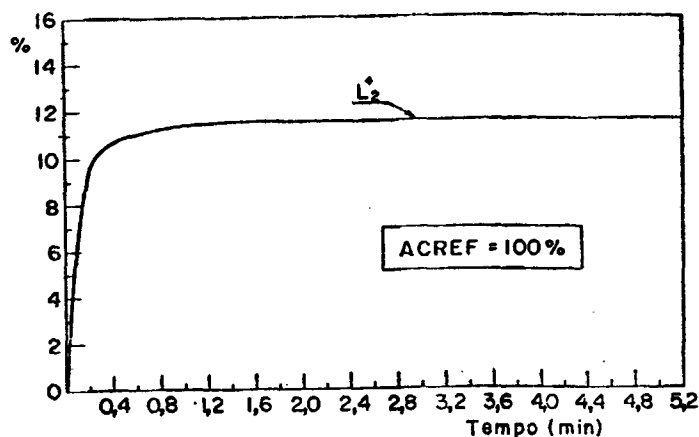


Fig.38 - Massa acumulada no estágio 2 no novo regime permanente.

#### 4.3.6 - Testes para sinais de entrada combinados.

Controla-se agora a torre com o seguinte procedimento, forçando que parte do fluxo de alimentação seja elevado até o condensador de refluxo:

- |  |                    |
|--|--------------------|
| - Fluxo de alimentação                                     | mantido constante  |
| - Concentração da amônia neste fluxo                       | acrescido de 20%   |
| - Taxa de calor fornecida ao gerador de vapor              | acrescida de 20%   |
| - Pressão de operação da torre                             | mantida constante  |
| - Fluxo de produto de fundo                                | acrescido de 20%   |
| - Massa de mistura acumulada no reservatório de condensado | mantida constante. |

Nota-se que o fluxo do produto destilado que até aqui era mantido constante agora foi liberado. Os resultados obtidos mostram que o fluxo do produto destilado é realmente acrescido e que uma maior solicitação é verificada na taxa de calor retirada

do condensador de refluxo ( Fig.39 ) e ainda mais, que este tipo de artifício não implica obrigatoriamente em enriquecimento dos fluxos de vapor e líquido que escoam em sentidos opostos dentro da torre como mostram as figuras 40 e 41 .

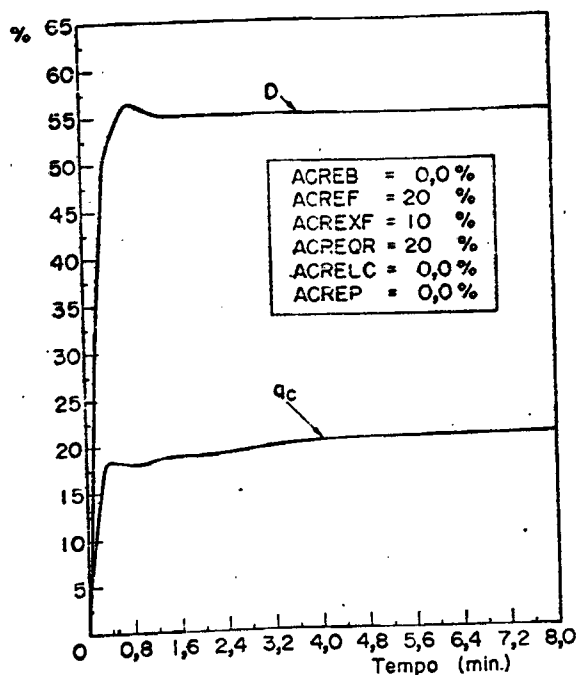


Fig.39 - Comportamento das variáveis  $D$  e  $q_c$  .

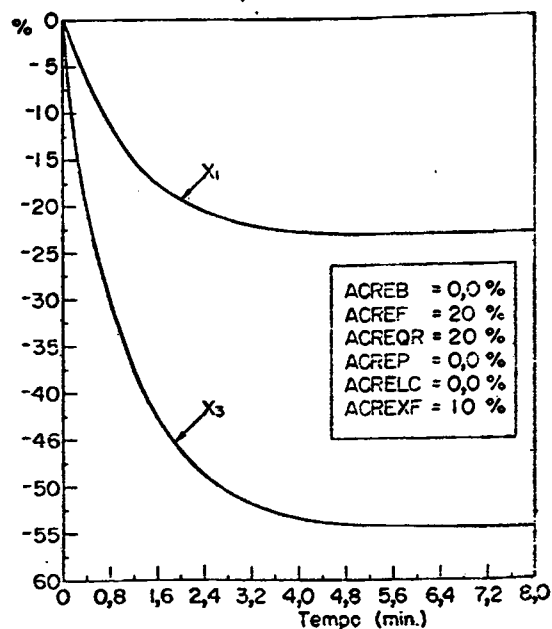
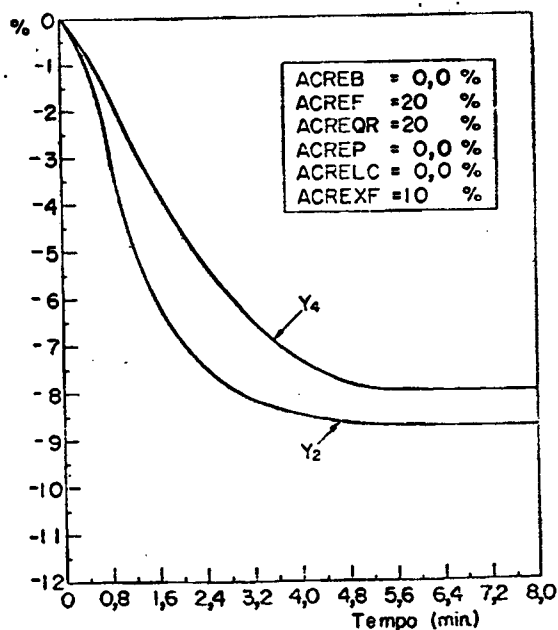


Fig.40 - Comportamento das variáveis  $X_1$  e  $X_3$  .



-Fig.41 - Comportamento das variáveis  $Y_4$  e  $Y_2$  .

## 5. CONCLUSÕES

- 5.1 - Quanto à modelação matemática proposta, procurando representar um fenômeno físico de grande complexidade como o processo de destilação de mistura binária, pode-se concluir que as informações obtidas, dentro das limitações impostas pelas hipóteses assumidas é satisfatória. O problema se torna mais complexo, se se desejar estudar os processos de transferência de massa e energia que ocorre em cada estágio da torre e por isto foi admitida uma determinada eficiência para cada estágio. Somente o estudo do processo de transferência de massa e energia em um único estágio, justifica um estudo de grande profundidade.
- 5.2 - Admitindo-se que as hipóteses assumidas sejam compatíveis com a realidade física do fenômeno estudado, a modelação matemática usada é de grande utilidade na análise do processo de destilação da mistura água - amônia e o modelo adotado pode ser estendido para outras misturas binárias, desde que se conheça suas propriedades termodinâmicas.
- 5.3 - Quanto à convergência do método, em nenhum caso testado notou-se qualquer problema de oscilação. O problema da convergência para um novo regime permanente não está limitado pelas equações constitutivas do modelo matemático, mas sim pelo algoritmo usado para resolvê-lo. Desde que as limitações inerentes ao próprio algoritmo (principalmente quanto aos valores iniciais), sejam respeitadas, espera-se que

o comportamento da simulação apresente resultados semelhantes.

- 5.4 - Como este estudo foi feito visando a aplicação do programa para se estudar uma torre de destilação que será utilizada num sistema de refrigeração por absorção, de um modo geral pode-se concluir que a concentração do produto destilado não é comprometida com os diversos sinais que serviram de teste ao sistema.
- 5.5 - O tamanho do incremento de tempo que se usou nas discretizações, em toda a faixa testada não distorceu as informações dinâmicas do sistema de forma relevante. Essas discrepâncias de ordem puramente matemática não devem ser analisadas isoladamente. Erros são introduzidos nas informações das propriedades termodinâmicas fornecidas ao programa de computação ao se usar polinômios ajustados em lugar de tabelas das propriedades da mistura. Acima disso, deve-se discutir com profundidade até que ponto as hipóteses assumidas são coerentes com a fenomenologia física do problema.
- 5.6 - O uso de torres de destilação para separar componentes de uma mistura não possibilita a obtenção de componentes 100% puros. A pureza do produto destilado se torna maior quanto maior for o número de estágios usados. A simulação digital veio confirmar este fato, pois desde que se estude uma torre com número de estágios fixos a priori, não se consegue elevar de forma significativa esta pureza.
- 5.7 - O estudo feito pode ser classificado como um passo inicial dentro do vasto e complicado processo de destilação. A simulação digital constitui numa ferramenta altamente valiosa para se analisar este tipo de processo.

- 5.8 - Para se chegar a estes resultados apresentados no capítulo 4 foram desenvolvidos 3 programas, partindo-se de hipóteses mais modestas até se atingir este estágio de complexidade. Foram estudadas as hipóteses do método de McCabe - Thiele para se estudar o regime permanente desta torre escolhida neste trabalho, concluindo-se que aquelas hipóteses, se aplicadas à mistura água - amônia não produzirão bons resultados.
- 5.9 - Como sugestão, deixa-se em aberto, para trabalhos futuros, o estudo de um sistema de controle a ser usado na torre de destilação a ser empregada no ciclo de refrigeração por absorção, com base nos resultados e informações que este programa oferece. Apesar de ter sido apresentado resultados e informações de forma gráfica para poucas variáveis, tem-se a cada instante informações de todas as 46 variáveis constituintes do sistema de equações.

## A P Ê N D I C E 1

## PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DA MISTURA ÁGUA-AMÔNIA

Jain & Gable (10) ajustaram polinômios para as curvas de saturação da mistura água - amônia baseados nas tabelas do IGT - Institute of Gas Technology (12). Os polinômios utilizam a pressão de saturação e a concentração do componente mais volátil na fase líquida como variáveis independentes.

Os polinômios ajustados são:

$$T = P_1 (X, P)$$

$$h_l = P_2 (X, T)$$

$$Y = P_3 (X, P)$$

$$h_v = P_4 (Y, T)$$

onde:

T - Temperatura de saturação

$h_l$  - Entalpia específica da mistura na fase líquida

Y - Concentração do componente mais volátil na fase vapor

X - Concentração do componente mais volátil na fase líquida

P - Pressão de saturação

$h_v$  - Entalpia específica da mistura na fase vapor.

Para as faixas de pressão comumente usadas na torre de destilação, que opera com a mistura água - amônia, Jain & Gable apresentam os seguintes polinômios:

$$T = ((((-240,11X + 346,31)X - 27,120)X + 166,94)X - 535,76)X + (0,038839 - 0,18053 E-03 P)X.P + 305,04 + (0,44631) - 0,24284 E-03) P$$

$$h1 = (((561,86X - 1929,6)X + 2343,3)X - 824,41)X - 103,48)X - 76,824 + 1,12703T$$

$$Y = 1,0 - (1,0 - X)^R$$

onde:

$$R = (((10,749X - 17,869)X + 4,0279)X - 1,3086)X + 2,5622E-03.P.X)X - 4,256E-03.P + 7,1588$$

$$hv = (((-1342,65Y + 2954,4)Y - 2485,3)Y + 391,37)Y + 1080,0 + 8,370E-09.T^4 + (((-3,7752E-05.T + 0,027252)T - 5,9429)T) (1,0 - Y)^2 - 3,1313$$

Esses polinômios foram usados no trabalho para se expressar as propriedades termodinâmicas da mistura, onde se admitiu condições de saturação.

O polinômio  $h1 = P_2(X,T)$  e  $hv = P_4(Y,T)$  foram usados nas equações (30) até (40), descritas no capítulo 3.

A temperatura de saturação não foi colocada como variável, sendo calculada quando necessária. Como a eficiência adotada para os estágios foi 70% e não 100%, o líquido e o vapor que deixam cada estágio não estão em equilíbrio. Por este fato deve-se calcular o valor da temperatura do "líquido" que se encontra em equilíbrio com este vapor. A temperatura do vapor não é a mesma do líquido. Logo deve-se procurar um líquido que estaria em equilíbrio com este vapor, calcular esta temperatura de saturação do vapor, para depois calcular  $hv = P_4(Y,T)$ . Este procedimento foi adotado nas equações que calculam a entalpia de saturação dos fluxos de vapor.

Ainda pelo fato de se adotar eficiência nos está -



gios igual a 70%, nas equações (20), (21), (22) e (23), tem-se:

$$0,70 = \frac{Y_N - Y_{N-1}}{Y_N^* - Y_{N-1}}$$

ou  $0,70Y_N^* + 0,30Y_{N-1} = Y_N$

e nestas equações de eficiência colocou-se  $Y_N^*$  função de  $X_N$ , usando o polinômio  $Y = P_3 (X, P)$ .

Para se calcular a entalpia da mistura na fase líquida, no estado de saturação, determinou-se diretamente a temperatura com o polinômio  $T = P_1 (X, P)$  e com o valor de  $T$  calculou-se  $h_l = P_2 (X, T)$ .

## A P Ê N D I C E 2

## FORMA DA EQUAÇÃO DE COMPORTA USADA NA SIMULAÇÃO

Foi adaptada a equação de Francis citada em Smith (11), à página 486, colocando-se  $L_N = f(L_N^+)$ , ou seja, os flusos de líquido em função da massa acumulada sobre cada bandeja. A equação de Francis apresentada por Smith (12) apresenta a forma:

$$h_{ow} = 0,48 (q/l_w)^{2/3}$$

onde:

$q$  - vazão em GPM

$h_{ow}$  - Altura de líquido sobre a comporta

$l_w$  - Comprimento da comporta em polegadas.

A torre escolhida para estudo tem:

$h_w$  - 3,0 pol

$l_w$  - 2,6 pol

Área da bandeja - 44,65 pol<sup>2</sup>

onde:  $h_w$  é a altura da comporta.

Admitindo-se uma densidade média da mistura água - amônia, na fase líquida, igual a 35,69 lbm/pé<sup>3</sup> e admitindo-se que a massa acumulada sobre a bandeja seja igual à massa que vai da superfície da bandeja até a altura da comporta, mais a massa que se encontra acima da comporta, pode-se desenvolver uma expressão para o fluxo de líquido em lbm/min função da massa acumulada ( $L^+$ ) sobre a bandeja expressa em lbm. Esta equação apresenta a seguinte forma:

$$L_N = 37,296(1,0844L_N^+ - 3,0)^{3/2}$$

## A P Ê N D I C E 3

## DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

A técnica aplicada foi a seguinte:

- a - Equações do balanço de massa de mistura ( equações (1) a (5) do capítulo 3 ) apresentadas na forma:

$$\frac{dL_N^+}{dt} = L_{N+1} - L_N + V_{N-1} - V_N$$

discretizando obtém-se:

$$\frac{L_N^{t+1}}{t} = L_{N+1}^t + \Delta L_{N+1}^{t+1} - L_N^t - \Delta L_N^{t+1} + V_{N-1}^t + \Delta V_{N-1}^{t+1} - V_N^t - \Delta V_N^{t+1}$$

- b - Equação (6):

$$L_0 = B + V_0$$

discretizando tem-se:

$$L_0^t + \Delta L_0^{t+1} = B^t + \Delta B^{t+1} + V_0^t + \Delta V_0^{t+1}$$

- c - Equações do balanço de massa do componente mais volátil ( equações (8) a (13) ) apresentadas na forma:

$$\frac{d(L_N^+ X_N)}{dt} = L_{N+1} X_{N+1} - L_N X_N + V_{N-1} Y_{N-1} - V_N Y_N$$

discretizando obtém-se:

$$\begin{aligned}
& (L_N^{+t} + \Delta L_N^{+t+1}) (X_N^t + \Delta X_N^{t+1}) = \\
& (L_{N+1}^t + \Delta L_{N+1}^{t+1}) (X_{N+1}^t + \Delta X_{N+1}^{t+1}) - \\
& (L_N^t + \Delta L_N^t) (X_N^t + \Delta X_N^{t+1}) + \\
& (V_{N-1}^t + \Delta V_{N-1}^{t+1}) (Y_{N-1}^t + \Delta Y_{N-1}^{t+1}) - \\
& (V_N^t + \Delta V_N^{t+1}) (Y_N^t + \Delta Y_N^{t+1})
\end{aligned}$$

d - Equações de comporta ( equações (14) a (18) ) apresentadas na forma:

$$L_N = 37,296(1,0844L_N^+ - 3,0)^{3/2}$$

discretizando obtêm-se:

$$L_N^t + \Delta L_N^{t+1} = 37,296( 1,0844(L_N^{+t} + \Delta L_N^{+t+1}) - 3,0)^{3/2}$$

e - Equações de eficiência Murphree dos estágios ( equações (19) a (22) ) apresentadas na forma:

$$EMV_N = \frac{Y_N - Y_{N-1}}{Y_N^* - Y_{N-1}}$$

como a EMV foi admitida igual a 70% para todos os estágios, tem-se:

$$0,70Y_N^* + 0,30Y_{N-1} = Y_N$$

$Y_N^*$  foi substituído por  $X_N$  como justificado no Apêndice 1 , ou seja,  $Y_N^* = P_3(X_N, P)$ . No polinômio  $P_3(X_N, P)$  colocou-se  $(X_N^t + \Delta X_N^{t+1})$  em lugar de  $X_N$  e  $(P^t + \Delta P^{t+1})$  em lugar de  $P$ .  $Y_{N-1}$  foi discretizado e passou a apresentar a forma:  $Y_{N-1} = Y_N^t + \Delta Y_N^{t+1}$  e  $Y_N = Y_N^t + \Delta Y_N^{t+1}$ .

e - Equações de controle. Para o fechamento do sistema de equa -

ções são usadas 6 equações de controle para fixação ou manipulação de variáveis. A forma dessas equações é a seguinte:

$$F = K \text{ ( onde } K \text{ é uma constante)}$$

Assim o fluxo de alimentação está operando em regime permanente. Para imprimir nele um acréscimo em degrau, utilizou-se a seguinte técnica algébrica:

$$F^t + \Delta F^{t+1} = K + \text{ACREF}$$

$$\text{ou} \quad \Delta F^{t+1} = \text{ACREF} \quad (3.1)$$

Pelo método de Newton-Raphson a equação (3.1) é apresentada na forma:

$$f(n) = \Delta F^{t+1} - \text{ACREF}$$

Para imprimir uma variação em degrau no fluxo de alimentação faz-se ACREF diferente de zero. Caso se deseje manter o fluxo de alimentação constante ( amarrado ) faz-se ACREF igual a zero. Raciocínio análogo é feito para as outras equações de controle.

\*Observação: O superescrito t refere-se sempre ao instante em que a variável é conhecida e t+1 ao instante em que a variável deve ser determinada, ou seja, estas são as incógnitas do processo iterativo.

## BIBLIOGRAFIA

- (1) FERREIRA, R.T.S. - "Projeto de uma Central de Refrigeração de 5 Tr". - Relatório BNDE - FUNTEC 213. Publicação Interna , Universidade Federal de Santa Catarina, Eng. Mecânica, maio 1975.
- (2) VIANNA, J.N.S. - "Simulação Digital de um sistema de Refrigeração por Absorção". Tese de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, março - 1974.
- (3) SILVA, A.F.C. da - "Simulação e Otimização de um Sistema de Refrigeração por Absorção". Publicação Interna, Universidade de Brasília, Engenharia Mecânica, 1976.
- (4) McCune, L.C. et al - "Digital Simulation: A Toll for the Analysis and Design of Distillation Control". ISA Transactions, vol. 2, n. 3 .
- (5) BOYNTON, G.W. - "Interaction Solves Distillation Hydrocarbon Process", págs. 153 - 156, janeiro - 1970.
- (6) THOROGOOD, R.M. - "Dynamic and Qualitative Aspects of Distillation Theory", British Chemical Eng., vol 8, n.5, págs. 328-331, maio - 1973.
- (7) THELKELD, J.L. - "Ingeniería del Ambito Térmico" , Espanha International Prentice Hall, 1973 .
- (8) McCABE, W.L. et al - "Unit Operation of Chemical Engineering", Tokyo, McGraw-Hill Co., 1956 .
- (9) PLANK, R. - "Handbuch der Kältetechnik", Berlin, Springer Verlag, 1959 .
- (10) JAIN, P.C. et al - "Equilibrium Property Data Equation for Aqueous - ammonia Mixtures. ASHRAE Semiannual Meeting, Pennsylvania, págs. 149 - 151 , 1971.

(12) INSTITUTE OF GAS TECHNOLOGY - " Physical and Thermodynamics  
Properties of ammonia - water Mistures, Bulletin n.34 ,  
Illinois, 1964.