



SIMULAÇÃO DINÂMICA DE EVAPORADORES PARA APLICAÇÃO EM BIORREFINARIAS

Maria Jimena Ferreira Quagliata

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi
Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.,

Rio de Janeiro
Março de 2015

SIMULAÇÃO DINÂMICA DE EVAPORADORES PARA APLICAÇÃO EM
BIORREFINARIAS

Maria Jimena Ferreira Quagliata

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA
(COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE
EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., D.Sc.

Prof. Eduardo Rocha de Almeida Lima, D.Sc.

Prof^a. Verônica Maria de Araujo Calado, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 2015

Quagliata, Maria Jimena Ferreira

Simulação dinâmica de evaporadores para aplicação em biorrefinarias / Maria Jimena Ferreira Quagliata. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XIII, 98 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 61-64.

1. Modelagem. 2. Simulação dinâmica. 3. Sistema de evaporação. I. Secchi, Argimiro Resende *et al.*. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

AGRADECIMENTOS

A mis padres, mi hermano, y mi familia por el apoyo desde el comienzo de esta gran experiencia que fue realizar mi maestría en el extranjero.

Aos meus orientadores Argimiro Secchi e Evaristo Biscaia por ter-me dado a conhecer o programa, e pela ajuda em todos os momentos.

A Soledad G., Pablo E. y Martin P. por haberme apoyado e incentivado a lo largo de estos años.

Quero agradecer a Maíra, Mariana A. e Thamiris que ajudaram a melhorar meu português em estes últimos tempos de escrita.

Aos amigos do PEQ que sempre tiveram palavras de apoio e carinho. Muito obrigada por tudo, vocês fizeram a minha estadia aqui boa demais!!!!

Aos meus amigos do LMSCP pela convivência, conselhos; em especial para Alessandra e os meus queridos amigos do "segundo andar", no principio com Mirella e Izaq, e nos últimos tempos com Tiago, Bruno N., Mayara, Hudson e Edgar. Muito obrigada pelo incentivo e por ouvir meus desabafos!

A Simone que desde o começo desta dissertação sempre teve boa disponibilidade para me ajudar com o uso do EMSO.

A mis amigos que a la distancia los he tenido presentes. En especial a Alfon, Maguita y Cebollita. Muchas gracias por estar!!

Aos funcionários do PEQ e da COPPE sempre prestativos.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

SIMULAÇÃO DINÂMICA DE EVAPORADORES PARA APLICAÇÃO EM BIORREFINARIAS

Maria Jimena Ferreira Quagliata

Março/2015

Orientadores: Argimiro Resende Secchi

Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Programa: Engenharia Química

Sendo o Brasil o segundo maior produtor mundial de etanol, existe um grande interesse nacional na modelagem e simulação de biorrefinarias, com objetivos desde a melhoria das condições de operação e redução do consumo energético até o desenvolvimento de novos processos. Este trabalho está focado nas biorrefinarias produtoras de etanol, baseadas em fermentação, na etapa de concentração do caldo por evaporação. O uso de evaporadores está amplamente difundido nas biorrefinarias nacionais. Foram realizadas a modelagem das propriedades termodinâmicas das misturas complexas presentes no processo e a modelagem matemática dos evaporadores tipo *flash* e tipo Robert, considerando fluxo monofásico e bifásico dentro dos tubos do evaporador. Foram também simulados e otimizados sistemas de evaporadores de múltiplos efeitos, conduzidos no simulador EMSO. Foi realizada uma análise de sensibilidade dos sistemas de evaporadores e a consequente busca pelas condições ótimas de operação. A melhor condição de operação encontrada para cada evaporador, em um sistema de quatro evaporadores conectados de forma cocorrente, reduziu o consumo de vapor um 26 % em comparação com a operação normal do sistema.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

DYNAMIC SIMULATION OF EVAPORATORS FOR APPLICATION IN
BIOREFINERIES

Maria Jimena Ferreira Quagliata

March/2015

Advisors: Argimiro Resende Secchi
Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Department: Chemical Engineering

Brazil is the second largest producer of ethanol, what justifies the great national interest in modeling and simulation of biorefineries, with goals from improving the operating conditions and reducing energy consumption to the development of new processes. This work is focused on biorefinery producing ethanol, based on fermentation, in the step of juice concentration by evaporation. The use of evaporators is widespread in national biorefineries. We were carried out modeling of the thermodynamic properties of the complex mixtures involved in the process and the mathematical modeling of flash and Robert evaporators considering monophasic and biphasic flows within the evaporator tubes. Multiple effect evaporators systems have also been simulated and optimized using the EMSO simulator. A sensitive analysis of multiple evaporators systems, and the consequent demand for optimum operation conditions was performed. It was found that the best operating conditions of each evaporator, for a system of four evaporators connected in cocurrent order, reduced the steam consumption by 26 % compared with the normal operation of the system.

Sumário

1. Introdução	1
2. Revisão da literatura.....	3
2.1. Biorrefinaria de cana-de-açúcar	3
2.2. Processo de produção de bioetanol.....	6
2.3. Modelagem matemática de evaporadores	10
2.4. Otimização de sistemas de evaporadores	14
2.5. Evaporadores	15
3. Metodologia.....	17
3.1. Inserção das propriedades no VRTherm	17
3.2. Evaporador <i>Flash</i>	20
3.3. Evaporador Robert	22
3.4. Otimização	26
4. Resultados e Discussões	28
4.1. Inserção das propriedades dos compostos no VRTherm.....	28
4.2. Simulações e comparação da resposta dos evaporadores	29
4.3. Otimização	55
5. Conclusões.....	60
6. Referências bibliográficas	61
7. Apêndice: Curvas das propriedades a inserir no EMSO	65

Lista de figuras

FIGURA 2-1 – ESQUEMA DE TRATAMENTOS EM UMA BIORREFINARIA DE CANA-DE-AÇÚCAR.	9
FIGURA 2-2 - CONFIGURAÇÃO EM CO-CORRENTE DE EVAPORADORES.	11
FIGURA 2-3 - CONFIGURAÇÃO EM CONTRACORRENTE DE EVAPORADORES.	11
FIGURA 3-1 – ESQUEMA DA CONEXÃO. ADAPTADO DE HUGOT (1986).	23
FIGURA 3-2 – SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES EM COCORRENTE.....	26
FIGURA 3-3 – SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES EM COCORRENTE COM DISTRIBUIÇÃO DE VAPOR.	27
FIGURA 4-1- RESPOSTA DO SISTEMA A UM DEGRAU NO SINAL DA VÁLVULA DE VAPOR. DIFERENÇA DE PRESSÃO RELATIVA AO PONTO INICIAL.....	31
FIGURA 4-2- CALOR INJETADO NO EVAPORADOR <i>FLASH</i> PARA UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA.....	32
FIGURA 4-3 - TAXA MOLAR DO VAPOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	32
FIGURA 4-4 - PRESSÃO DO EVAPORADOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	33
FIGURA 4-5 – COEFICIENTE DE TRANSFERÊNCIA DE CALOR AO LONGO DO TEMPO, PARA TRÊS PONTOS DENTRO DOS TUBOS, PARA O MODELO DO EVAPORADOR ROBERT. (DISTANCIAS MEDIDAS DESDE A ENTRADA NOS TUBOS)	34
FIGURA 4-6 – NÍVEL DO EVAPORADOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	34
FIGURA 4-7 - CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	35
FIGURA 4-8 - CALOR INJETADO NO EVAPORADOR <i>FLASH</i> PARA UM DEGRAU NA VAZÃO DE ENTRADA.....	36
FIGURA 4-9 - TAXA MOLAR DO VAPOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NO FLUXO MOLAR DA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	37
FIGURA 4-10 - PRESSÃO DO EVAPORADOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NO FLUXO MOLAR DA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	37
FIGURA 4-11 - CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NO FLUXO MOLAR DA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	38
FIGURA 4-12 - CALOR INJETADO NO EVAPORADOR <i>FLASH</i> PARA UM DEGRAU NA TEMPERATURA DE ENTRADA	38
FIGURA 4-13 - TAXA MOLAR DO VAPOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA TEMPERATURA DA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	39
FIGURA 4-14 - PRESSÃO DO EVAPORADOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA TEMPERATURA DA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	39
FIGURA 4-15 - CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA TEMPERATURA DA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	40
FIGURA 4-16 - RESPOSTA DO EVAPORADOR 2 A UM DEGRAU NO SINAL DA VÁLVULA DE VAPOR. DIFERENÇA DE PRESSÃO RELATIVA AO PONTO INICIAL.	42
FIGURA 4-17 - RESPOSTA DO EVAPORADOR 3 A UM DEGRAU NO SINAL DA VÁLVULA DE VAPOR. DIFERENÇA DE PRESSÃO RELATIVA AO PONTO INICIAL.	42

FIGURA 4-18 - RESPOSTA DO EVAPORADOR 4 A UM DEGRAU NO SINAL DA VÁLVULA DE VAPOR. DIFERENÇA DE PRESSÃO RELATIVA AO PONTO INICIAL	43
FIGURA 4-19 - TAXA MOLAR DO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA DE SACAROSE, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.....	44
FIGURA 4-20 - TAXA DE VAPOR DE SAÍDA AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA DE SACAROSE, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.....	45
FIGURA 4-21 – DIFERENÇA DE TAXA DE VAPOR DE SAÍDA AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA DE SACAROSE, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.....	45
FIGURA 4-22 - TEMPERATURA DE SAÍDA AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA DE SACAROSE, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.....	46
FIGURA 4-23 – DIFERENÇA DE TEMPERATURA EM RELAÇÃO AO VALOR INICIAL. NA SAÍDA AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA DE SACAROSE, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.	47
FIGURA 4-24 - CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA DE SACAROSE, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.	47
FIGURA 4-25 - TAXA MOLAR DO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA VAZÃO DA ALIMENTAÇÃO, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.	49
FIGURA 4-26- TEMPERATURA NO EVAPORADOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA VAZÃO DA ALIMENTAÇÃO, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.	49
FIGURA 4-27 - CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA VAZÃO DA ALIMENTAÇÃO, PARA UM SISTEMA DE QUATRO EVAPORADORES.....	50
FIGURA 4-28 - CALOR INJETADO NO EVAPORADOR <i>FLASH</i> PARA UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ENTRADA.	51
FIGURA 4-29 - TAXA MOLAR DO VAPOR CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.	52
FIGURA 4-30 - PRESSÃO DO EVAPORADOR AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.....	52
FIGURA 4-31 - CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NO LÍQUIDO CONCENTRADO AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE NA ENTRADA, PARA UM SISTEMA DE UM EVAPORADOR.....	53
FIGURA 4-32 – DIFERENÇAS DAS FRAÇÕES MOLARES DA AGUA E SACAROSE (ESQUERDA), DEXTROSE E XILOSE (DIREITA) NA FASE LÍQUIDA AO LONGO DO TEMPO, EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ALIMENTAÇÃO.	54
FIGURA 4-33 – DIFERENÇAS DA FRAÇÃO MOLAR DO FURFURAL, ETILENGLICOL E HIDRÓXIDO DE CÁLCIO AO LONGO DO TEMPO EM RESPOSTA A UM DEGRAU NA CONCENTRAÇÃO DE ALIMENTAÇÃO.....	54
FIGURA 4-34 – CONCENTRAÇÃO DE SACAROSE (°Bx) PARA CADA DISTRIBUIÇÃO DE VAPOR.	56
FIGURA 4-35 VAZÃO DE VAPOR INSERIDO NO SISTEMA EM FUNÇÃO DAS DISTRIBUIÇÕES DAS PRESSÕES NO SISTEMA	58
FIGURA 4-36 - CURVAS APROXIMADAS AOS DADOS DAS SIMULAÇÕES COM AS CURVAS DA TABELA 4-12	59
FIGURA 7-1- PRESSÃO DE VAPOR VS. TEMPERATURA PARA SACAROSE (PRESSÃO EM ESCALA LOGARÍTMICA).....	68
FIGURA 7-2 - CAPACIDADE CALORÍFICA DO GÁS IDEAL VS. TEMPERATURA PARA SACAROSE.....	69
FIGURA 7-3 - VISCOSIDADE DO GÁS VS. TEMPERATURA PARA SACAROSE (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA).....	70
FIGURA 7-4 - CONDUTIVIDADE DO GÁS VS. TEMPERATURA PARA SACAROSE.....	71

FIGURA 7-5 - TENSÃO SUPERFICIAL VS. TEMPERATURA PARA SACAROSE	72
FIGURA 7-6 - PRESSÃO DE VAPOR VS. TEMPERATURA PARA DEXTROSE (PRESSÃO EM ESCALA LOGARÍTMICA)	75
FIGURA 7-7 - CAPACIDADE CALORÍFICA DO GÁS IDEAL VS. TEMPERATURA PARA DEXTROSE	76
FIGURA 7-8 - VISCOSIDADE DO GÁS VS. TEMPERATURA PARA DEXTROSE (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA)	77
FIGURA 7-9 - VISCOSIDADE DO LÍQUIDO VS. TEMPERATURA PARA DEXTROSE (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA)	78
FIGURA 7-10 - CONDUTIVIDADE DO GÁS VS. TEMPERATURA PARA DEXTROSE	79
FIGURA 7-11 - TENSÃO SUPERFICIAL VS. TEMPERATURA PARA DEXTROSE	80
FIGURA 7-12 - PRESSÃO DE VAPOR VS. TEMPERATURA PARA XILOSE (PRESSÃO EM ESCALA LOGARÍTMICA)	82
FIGURA 7-13 - CAPACIDADE CALORÍFICA DO GÁS IDEAL VS. TEMPERATURA PARA XILOSE.....	83
FIGURA 7-14 - VISCOSIDADE DO LÍQUIDO VS. TEMPERATURA PARA XILOSE (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA)	84
FIGURA 7-15 - TENSÃO SUPERFICIAL VS. TEMPERATURA PARA XILOSE	85
FIGURA 7-16 - PRESSÃO DE VAPOR VS. TEMPERATURA PARA HIDRÓXIDO DE AMÔNIO (PRESSÃO EM ESCALA LOGARÍTMICA) .	87
FIGURA 7-17 - CAPACIDADE CALORÍFICA DO GÁS IDEAL VS. TEMPERATURA PARA HIDRÓXIDO DE AMÔNIO	88
FIGURA 7-18 - VISCOSIDADE DO LÍQUIDO VS. TEMPERATURA PARA HIDRÓXIDO DE AMÔNIO (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA).....	89
FIGURA 7-19 - CAPACIDADE CALORÍFICA DO GÁS IDEAL VS. TEMPERATURA PARA HIDRÓXIDO DE CÁLCIO	92
FIGURA 7-20 - VISCOSIDADE DO LÍQUIDO VS. TEMPERATURA PARA HIDRÓXIDO DE CÁLCIO (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA).....	93
FIGURA 7-21 - PRESSÃO DE VAPOR VS. TEMPERATURA PARA OXIDO DE SILÍCIO (PRESSÃO EM ESCALA LOGARÍTMICA)	96
FIGURA 7-22 - CAPACIDADE CALORÍFICA DO GÁS IDEAL VS. TEMPERATURA PARA OXIDO DE SILÍCIO	97
FIGURA 7-23 - VISCOSIDADE DO LÍQUIDO VS. TEMPERATURA PARA OXIDO DE SILÍCIO (VISCOSIDADE EM ESCALA LOGARÍTMICA)	98

Lista de tabelas

TABELA 3-1 - COMPOSTOS MAIS USUAIS NAS REFINARIAS DE CANA-DE-AÇÚCAR.....	17
TABELA 3-2 – PROPRIEDADES DISPONÍVEIS PARA INSERIR NO VR THERM	18
TABELA 4-1– PROPRIEDADES INCLUÍDAS NO VR THERM. (X - OBTIDAS, F - FALTANTES, S - SIMILARES, A - APROXIMADOS) .28	
TABELA 4-2 – DIMENSÕES DO EVAPORADOR	29
TABELA 4-3 - CONDIÇÕES DA SIMULAÇÃO	30
TABELA 4-4– CONDIÇÕES INICIAIS NO EVAPORADOR	30
TABELA 4-5 - EQUAÇÕES RECOMENDADAS EM SEBORG <i>ET AL.</i> (2013).....	30
TABELA 4-6– PARÂMETROS PARA OS CONTROLADORES DE CADA EVAPORADOR	41
TABELA 4-7 – ELEVÇÃO DE PONTOS DE EBULICAO PARA CADA EVAPORDOR	48
TABELA 4-8 - CONCENTRAÇÕES EM %M/M	50
TABELA 4-9 – CONDIÇÕES NA SAÍDA DOS EVAPORADORES COM MODELO MONO E BIFÁSICO.....	55
TABELA 4-10 – DISTRIBUIÇÃO DA ENTRADA DE VAPOR EM CADA EVAPORADOR, CONECTADOS EM COCORRENTE	57
TABELA 4-11 – PRESSÕES PARA CADA EVAPORADOR DO SISTEMA	58
TABELA 4-12 – CURVAS ESTIMADAS PARA A TAXA DE VAPOR DE AQUECIMENTO EM FUNÇÃO DA INCLINAÇÃO.	58
TABELA 7-1 - PROPRIEDADES DA SACAROSE.....	66
TABELA 7-2 - PROPRIEDADES DA DEXTROSE.....	73
TABELA 7-3 - PROPRIEDADES DA XILOSE	80
TABELA 7-4 - PROPRIEDADES DO HIDRÓXIDO DE AMÔNIO	86
TABELA 7-5 - PROPRIEDADES DO HIDRÓXIDO DE CÁLCIO	90
TABELA 7-6 - PROPRIEDADES DO ÓXIDO DE SILÍCIO (QUARTZO).....	94

Lista de símbolos

h_L	entalpia do fluido de saída em fase líquida, kJ/mol
h_V	entalpia do fluido de saída em fase vapor, kJ/mol
h_o	entalpia do fluido de entrada, kJ/mol
H	altura total do evaporador, m
H_t	altura total dos tubos, m
D_s	diâmetro do evaporador, m
D_t	diâmetro interior dos tubos, m
$D_{t \text{ ext}}$	diâmetro exterior dos tubos, m
F_L	fluxo molar da saída em fase líquida, mol/h
F_V	fluxo molar da saída em fase vapor, mol/h
F_o	fluxo molar de entrada, mol/h
K_P	constante do termo proporcional do controlador
N_L	número de mols no volume de controle na fase líquida, mol
N_V	número de mols no volume de controle na fase vapor, mol
N_t	número total de tubos
P_L	pressão no volume de controle da fase líquida, atm
P_V	pressão no volume de controle da fase vapor, atm
T_L	temperatura no volume de controle da fase líquida, K
T_V	temperatura no volume de controle da fase vapor, K
n_i	número de mols do componente i no volume de controle, mol
v_L	volume molar da fase líquida no volume de controle, m ³ /mol
v_V	volume molar da fase vapor no volume de controle, m ³ /mol
x_i	fração molar do componente i na fase líquida
y_i	fração molar do componente i na fase vapor
z_i	fração molar do componente i no fluido de entrada
ρ_L^m	densidade em base molar da fase líquida, kmol/m ³
τ_d	constante do termo derivativo do controlador, s
τ_i	constante do termo integral do controlador, s
ϕ_i^L	fugacidade do componente i na fase líquida no volume de controle
ϕ_i^V	fugacidade do componente i na fase vapor no volume de controle
A	área transversal do evaporador, m ²
<i>Energia</i>	energia no volume de controle, kJ
P	pressão no volume de controle, atm
Q	calor de entrada ao volume de controle, kW
T_{vap}	temperatura do fluido esquentador, K

UA	coeficiente de transferência de calor vezes a área de transferência de calor, kW/h/K
V	volume do evaporador, m ³
$e(t)$	erro, diferença entre o set point e a entrada do sinal
ε	espessura do tubo, m

1. Introdução

O Brasil é o segundo maior produtor de etanol no mundo, cujas plantas industriais em funcionamento são, majoritariamente, de primeira geração, anexadas aos engenhos de cana-de-açúcar, e utilizam um processo de fermentação como etapa para converter a sacarose presente no caldo de cana em etanol. Portanto, o conhecimento de cada um dos processos presentes nas biorrefinarias de cana-de-açúcar é primordial para o avanço tecnológico e melhora de cada etapa.

A nível nacional, tem-se a perspectiva de um aumento significativo da demanda de álcool combustível, devido a três realidades de mercado: aumento interno do consumo de álcool hidratado pelo sucesso da introdução da alternativa *flex-fuel* no mercado de veículos automotivos leves; expansão das exportações brasileiras de álcool em função do crescente interesse mundial pela mistura do álcool à gasolina, como forma de enfrentar o aquecimento global; e à demanda gerada pelos esforços da indústria química, no Brasil, em substituir o petróleo pelo etanol, como matéria-prima das principais rotas petroquímicas (BONOMI *et al.*, 2009). Segundo Bonomi *et al.* (2009), este aumento poderá ser alcançado por meio de duas vertentes tecnológicas. A primeira vertente focada para a área agrícola, por meio da implantação de técnicas de manejo adequadas, da ampliação do atual programa de introdução de novas variedades de cana e, futuramente, por meio do emprego da cana transgênica, de forma a aumentar o atual nível de produtividade em toneladas de cana/hectare-ano. A segunda vertente, centralizada no setor industrial, buscando desenvolver tecnologias que permitam o aproveitamento integral da cana-de-açúcar na produção de etanol ou outros combustíveis renováveis ou mesmo, por meio do conceito de biorrefinaria, agregando valor à cadeia da cana-de-açúcar, por meio da produção de novos produtos.

O programa nacional da Biorrefinaria Virtual de Cana-de-açúcar (BVC), coordenado pelo CTBE (Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol), dentro do qual este trabalho está inserido, tem como objetivo desenvolver uma ferramenta computacional de análise para biorrefinarias que permita: otimizar os conceitos e os processos envolvidos em uma biorrefinaria; avaliar diferentes alternativas de biorrefinaria no que se refere à sua sustentabilidade (econômica, ambiental e social); e avaliar o estágio de desenvolvimento de novas tecnologias incluídas na análise.

Os **objetivos** da presente dissertação se enquadram dentro da perspectiva da biorrefinaria virtual. Realizar a modelagem e a simulação dos evaporadores tipo *flash* e Robert, em sistemas de um e múltiplos evaporadores. Otimizar as condições de operação de um sistema de evaporadores de múltiplos efeitos.

O presente trabalho está dividido em sete capítulos. O Capítulo 2 é dedicado à revisão bibliográfica e à descrição dos evaporadores. No Capítulo 3 é apresentada a metodologia empregada neste trabalho, onde são apresentadas as modelagens dos evaporadores tipo *flash* e Robert e a metodologia utilizada para a análise de sensibilidade e a busca do ótimo. No Capítulo 4, são apresentados e discutidos os resultados das simulações realizadas para cada sistema de evaporadores e a análise de sensibilidade. Os Capítulos 5 e 6 são dedicados às conclusões e referências bibliográficas utilizadas, respectivamente. Por último, é apresentado o apêndice contendo as tabelas e gráficos de propriedades termodinâmicas dos compostos utilizados.

2. Revisão da literatura

2.1. Biorrefinaria de cana-de-açúcar

São várias as definições existentes para biorrefinarias. Segundo Demirbas (2009) biorrefinaria é uma instalação que integra o processo de conversão da biomassa para produzir combustível, energia e produtos químicos. Este é um modelo conceitual onde são produzidos combustíveis e coprodutos de alto valor. Cherubini (2010), de forma similar, define biorrefinaria como uma instalação ou rede de instalações, que integra o processo de conversão de biomassa e os equipamentos necessários à produção de biocombustíveis para o transporte, energia e produtos químicos, o qual é um conceito análogo ao feito para o petróleo.

Segundo Kamm e Kamm (2007), a biomassa tem uma composição complexa, consistindo de carboidratos básicos, lignina, proteínas, gorduras, vitaminas e corantes. Dessa forma, os objetivos do processo tecnológico em uma biorrefinaria são despolimerizar e desoxigenar os componentes da biomassa.

As biorrefinarias podem ser classificadas segundo o processo de conversão em: baseada em biosyngas, baseada em pirólise, baseada em processos hidrotérmicos e baseada em fermentação (DEMIRBAS, 2009).

Além disso, a tecnologia para esses processos pode ser classificada de quatro formas: termoquímica, bioquímica, física ou mecânica e química. No que diz respeito à tecnologia termoquímica, o processo de conversão da biomassa pode ocorrer por meio de duas importantes rotas: a gaseificação ou a pirólise. A gaseificação, consiste em levar a biomassa a altas temperaturas (maior que 700°C) em ausência de oxigênio, obtendo uma mistura de H₂, CO, CO₂ e CH₄. O *Syngas* (gás de síntese) obtido pode ser utilizado como biocombustível ou como matéria prima na produção de produtos químicos e combustíveis. A pirólise, por sua vez, utiliza temperaturas na faixa de 300 e 600°C em ausência de oxigênio, para converter a biomassa em óleo pirolítico líquido (*bio-oil*), carvão e gases leves como o *Syngas*.

Ao contrário dos processos termoquímicos, os processos bioquímicos acontecem a baixas temperaturas e baixas velocidades de reação. Os processos mais usuais são a fermentação e a digestão anaeróbia. A fermentação utiliza microrganismos ou enzimas para converter o substrato fermentável em produtos recuperáveis (usualmente álcool e

ácidos orgânicos). O etanol é, atualmente, o produto mais requerido para a fermentação, mas a produção de muitos outros compostos químicos está sendo objeto de muitas pesquisas e desenvolvimento.

Por outro lado, nos processos mecânicos, não ocorre a mudança do estado químico ou da composição da biomassa; acontece somente a redução do tamanho ou a separação da matéria prima. Em uma biorrefinaria, esses são os primeiros passos para a conversão da biomassa.

Os processos de conversão mais comuns nas biorrefinarias por processo químico são a hidrólise e a transesterificação. A hidrólise usa ácidos, álcalis ou enzimas para despolimerizar os polissacáridos e proteínas em seus compostos açucarados. Já na transesterificação os óleos vegetais são convertidos em ésteres metílicos ou etílicos dos ácidos graxos. Esse processo é o método mais usual para produzir biodiesel. Outros processos químicos estão presentes na biorrefinaria como a síntese de *Fisher-Tropsch*, a metanização e a reforma de vapor.

De forma geral, os biocombustíveis produzidos podem ser classificados de acordo com a matéria-prima e a tecnologia utilizada, em primeira, segunda, terceira e quarta geração. A primeira geração refere-se aos combustíveis feitos a partir de açúcar (ex: cana-de-açúcar e beterraba), amido (ex: arroz, trigo e milho), óleos vegetais (ex: sementes de girassol, canola e soja) ou gorduras animais usando tecnologia convencional. Os biocombustíveis de primeira geração mais usuais são o bioetanol, biodiesel e o biogás.

A segunda geração refere-se aos combustíveis produzidos a partir do material lignocelulósico, que inclui palha de cereais e cana, resíduos florestais, bagaço, e materiais florestais de curta rotação, utilizando tecnologias avançadas (DEMIRBAS, 2009).

Os biocombustíveis da primeira geração competem com os produtos alimentícios, gerando problemas sociais, políticos e ambientais. Por serem alternativas mais “verdes” aos combustíveis fósseis e convencionais, os biocombustíveis de segunda geração têm ganhado interesse mundial nos últimos anos. O bioetanol é produzido a partir de cana-de-açúcar, beterraba e trigo, sendo os Estados Unidos da América o maior produtor de bioetanol com 19,8 bilhão de litros por ano, utilizando milho como matéria-prima. A cana-de-açúcar é a matéria-prima mais utilizada no Brasil, sendo o segundo

produtor mundial com 17,8 bilhões de litros por dia. A União Europeia produz somente 3,44 bilhões de litros de bioetanol a partir de beterraba e trigo (CHERUBINI, 2010).

O biodiesel é produzido a partir de óleos baseados em cereais como a canola, girassol e soja. O maior produtor é a Alemanha com 2,5 bilhões de litros por ano e em segundo está os Estados Unidos com 0,86 bilhões de litros, utilizando sementes de girassol e canola. A Suécia, por outro lado, lidera a produção de biogás para combustível automotriz.

As maiores vantagens dos biocombustíveis estão no alto conteúdo de açúcar ou de óleo na matéria-prima, o qual facilita o processo de conversão. Ao contrário dos biocombustíveis de primeira geração, os biocombustíveis de segunda geração podem contar com toda a biomassa para gerar bioenergia. Dessa forma, vislumbram uma maior vantagem sobre os biocombustíveis de primeira geração, em termos de eficiência e desempenho ambiental do uso da terra (CHERUBINI, 2010).

Atualmente no Brasil existem duas empresas que possuem plantas industriais de segunda geração, *GranBio* que possui uma planta no município de São Miguel dos Campos (Alagoas) operando desde setembro de 2014, com uma produção nominal de 82 milhões de litro de etanol por ano e, *Raizen* que começou as operações em novembro de 2014 na cidade de Piracicaba (São Paulo), com uma produção nominal de 40 milhões de litros de etanol por ano.

A maior vantagem das biorrefinarias de segunda geração está no compartilhamento da tecnologia das biorrefinarias de primeira geração já existente. Os maiores desafios estão no pré-tratamento dos materiais lignocelulósicos, de forma a obter uma solução de lignina, hemicelulose e celulose, como também a etapa de fermentação dos compostos hemicelulósicos. No trabalho de FitzPatrick *et al.* (2010) são apresentados alguns dos pré-tratamentos do material lignocelulósico, tais como o fracionamento baseado em álcalis e o fracionamento baseado em líquidos iônicos. Nota-se que a grande barreira desses pré-tratamentos é o alto custo dos processos.

A terceira geração refere-se a biodiesel ou óleo vegetal a partir de algas, e a quarta geração à produção de biogasolina a partir de óleos vegetais ou biodiesel. Essas últimas duas gerações têm pouca implementação em escala industrial sendo, atualmente na sua maioria, estudadas em escala laboratorial ou escala piloto. Um exemplo de

aplicação industrial é a produção de biodiesel a partir de óleo de palma, existente desde 2006 na Malásia, produzido pela *Malaysian Palm Oil Board*.

2.2. Processo de produção de bioetanol

A produção de etanol a partir de qualquer biomassa ocorre desde que tenha grandes quantidades de amido ou açúcares. Atualmente, os materiais amiláceos (como o milho, trigo, e outros cereais e grãos) detêm o predomínio da produção, com 53% do total (CGEE, 2008).

A cana-de-açúcar é um dos cultivos comerciais mais importantes do mundo, ocupando mais de 20 milhões de hectares (CGEE, 2008), e é uma das matérias-primas mais eficientes para a produção de bioetanol, dado que o processo tem baixo custo de energia fóssil e alta produção de energia renovável. Entre os anos 2006 e 2007 foram produzidos aproximadamente 1300 milhões de toneladas (CGEE, 2008). O Brasil destaca-se por ter uma área plantada de quase 7 milhões de hectares, representando 42% do total da produção mundial (CGEE, 2008).

O clima ideal para o cultivo da cana é o que apresenta duas estações distintas: uma quente e úmida, proporcionando a germinação, perfilhamento e crescimento vegetativo, seguida de outra fria e seca, para atingir a maturidade e a consequente acumulação de sacarose nos talos. A cana-de-açúcar é uma planta semiperene, oriunda de regiões temperadas e tropicais da Índia. A parte aérea da planta é composta, essencialmente, pelos talos, onde se concentra a sacarose, e pelas pontas e folhas, que constituem a palha da cana-de-açúcar. Todos os componentes juntos somam cerca de 35 toneladas de matéria seca por hectare.

Em média, a produtividade anual é bastante influenciada pela variabilidade climática e pela região produtora, sendo entre 50 e 100 toneladas por hectares. As melhores produtividades no Brasil estão em São Paulo, apresentado uma média de 85 toneladas por hectares, que é levemente superior à média do país, cujo valor é de 75 toneladas por hectares (CGEE, 2008).

O processo de produção da cana-de-açúcar começa com a colheita da cana, que consiste na queima prévia do canavial e corte manual da cana inteira. Este modelo, ainda utilizado em quase 70% das áreas cultivadas no Brasil, está sendo substituído pela colheita mecanizada da cana crua picada (sem queima), devido às restrições ambientais e às práticas de queima. Espera-se que para o ano de 2020, a cana seja colhida de forma

mecânica, sem que haja queima do canavial (CGEE, 2008). Depois do corte, a fim evitar perdas de sacarose, a cana é transportada o quanto antes possível para a planta industrial.

As etapas iniciais dos processos de produção de açúcar e de etanol são similares. Na planta industrial, a cana é lavada e, em seguida, levada ao sistema de preparação e extração, que no Brasil é baseado, essencialmente, em moendas. A extração do caldo é realizada sob pressão de cilindros, armados em conjuntos de 4 a 7 sucessivos “ternos” de moenda. No conjunto de cilindros da moenda, o caldo contendo a sacarose é separado da fibra (bagaço). Nas plantas de primeira geração, a fibra segue para a usina da planta industrial, onde é usada como combustível.

Para a produção de açúcar, primeiro deve-se tratar quimicamente o caldo, por meio da coagulação, da floculação e da precipitação das impurezas, que são eliminadas por decantação. A “torta de filtro” é utilizada como fertilizante. O caldo tratado é concentrado em evaporadores de múltiplos efeitos, sendo posteriormente cristalizado. Neste processo nem toda sacarose disponível na cana é cristalizada e a solução residual rica em açúcar (melaço) pode voltar ao processo, com o propósito de recuperar açúcar. O melaço final, que não retorna ao processo de fabricação de açúcar, ainda apresenta um pouco de sacarose e um elevado conteúdo de açúcares redutores (como glicose e frutose), que pode ser usado como matéria prima para a produção do bioetanol após a fermentação. Assim, a produção de bioetanol a partir da cana-de-açúcar pode ser baseada na fermentação do caldo da cana ou das misturas de caldo e melaço (rota usualmente utilizada no Brasil).

No caso do bioetanol produzido diretamente do caldo, as primeiras etapas do processo de fabricação, desde a chegada da cana até o tratamento inicial do caldo, são similares ao processo de fabricação de açúcar. Uma vez tratado, o caldo é evaporado para adequar sua concentração de açúcares e, eventualmente, é misturado com o melaço, dando origem ao “mosto” (uma solução açucarada) (CGEE, 2008). O “mosto” segue até os tanques de fermentação, onde são adicionadas leveduras (da espécie *Saccharomyces cerevisiae*) e é fermentado durante um período de 8 a 12 horas, originando o “vinho” (“mosto” fermentado, com uma concentração de 7 ao 10 % de álcool). Após a fermentação, as leveduras são recuperadas e são guardadas para um novo uso e o “vinho” é enviado para as colunas de destilação.

Durante a destilação, primeiramente o bioetanol é recuperado em forma hidratada, com aproximadamente 96 °GL (porcentagem em volume), cerca de 6 % de água em peso. Neste processo também são separadas outras frações líquidas, resultando nos álcoois de segunda e óleo fúsel. O bioetanol hidratado pode ser armazenado como produto final ou pode ser desidratado na coluna de desidratação. Porém, sendo uma mistura azeotrópica não é possível separar seus componentes por meio de uma destilação simples. Dessa forma, a tecnologia mais utilizada no Brasil é a desidratação por meio da adição de ciclohexano, na qual é formada uma mistura azeotrópica ternária, com ponto de ebulição inferior ao bioetanol anidro. Na coluna de desidratação, a adição de ciclohexano ocorre na parte superior e pela parte inferior é retirado o bioetanol anidro, com aproximadamente 99,7 °GL ou 0,4 % de água em peso. A mistura ternária extraída da parte superior é condensada e depois é decantada, sendo a parte rica em água enviada à coluna de recuperação de ciclohexano.

Há ainda a possibilidade de realizar a desidratação do bioetanol por meio da absorção com peneiras moleculares ou por meio da destilação extrativa com monoetilenoglicol, que se destaca pelo seu menor consumo de energia e os custos mais elevados. Devido às crescentes exigências mundiais, diversos produtores de bioetanol no Brasil têm optado pelas peneiras moleculares, por serem capazes de produzir um bioetanol anidro sem contaminantes (CGEE, 2008).

A possibilidade de usar os açúcares da cana, seja total ou parcialmente na produção de bioetanol, chama atenção nessa agroindústria já que devido às condições de preço, à demanda existente e às perspectivas do mercado, a mesma pode estabelecer um programa de produção de mínimo custo e máximo benefício econômico. Para aproveitar essa vantagem, várias usinas brasileiras possuem linhas de fabricação de açúcar e de bioetanol cada uma com capacidade para processar entre 50 e 75% do caldo produzido.

No caso da agroindústria de bioetanol baseada na cana-de-açúcar, a totalidade de energia consumida no processo pode ser fornecida por meio de um sistema combinado de produção de calor e potência (sistema de cogeração) instalado na planta, utilizando o bagaço como fonte de energia. No Brasil, as plantas se auto abastecem e, muitas vezes, exportam à rede pública os excedentes de energia.

Um esquema dos tratamentos sofridos pela cana até o produto final nas diferentes refinarias é apresentado na Figura 2-1.

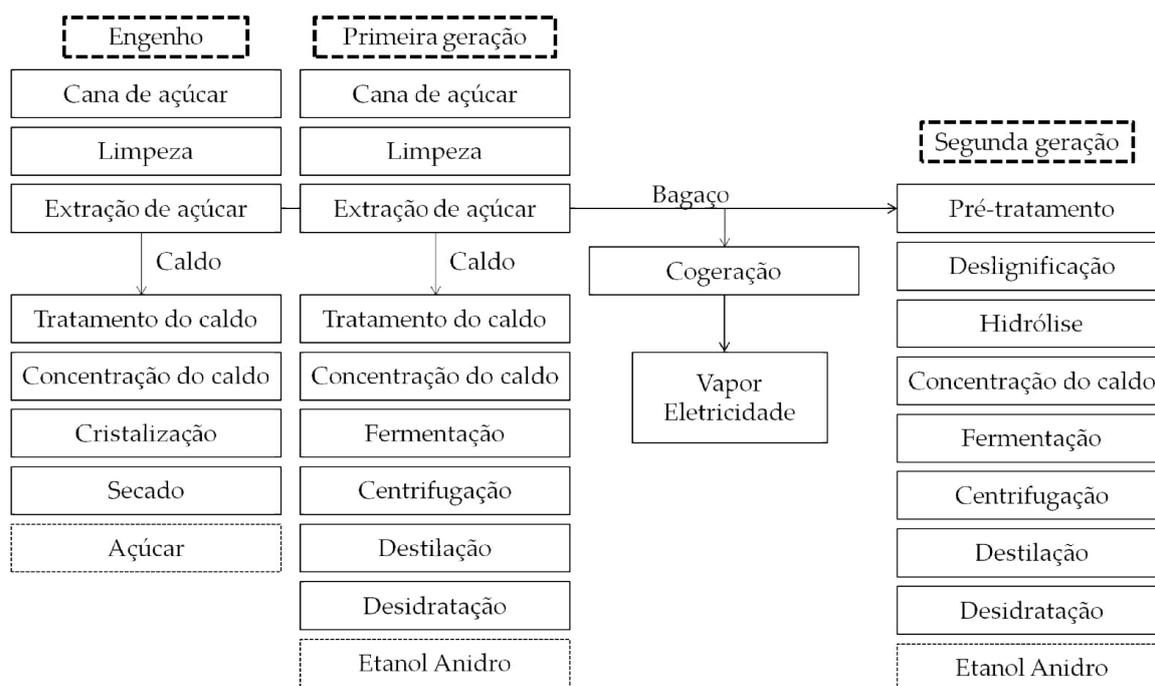


Figura 2-1 – Esquema de tratamentos em uma biorrefinaria de cana-de-açúcar.

2.2.1. Concentração do caldo de cana

A concentração do caldo de cana pode ser realizada por meio de dois métodos, evaporação ou filtração por membranas. O processo mais utilizado em plantas industriais é o de evaporação, enquanto que os processos de filtração por membrana (osmose inversa e nano-filtração) vêm sendo ainda estudados em escala laboratorial ou piloto.

Madaeni *et al.* (2010) compararam o consumo de energia entre os processos de evaporação e o de osmose inversa, como parte de uma planta de refinamento de açúcar a partir de beterraba. A osmose inversa é apresentada em combinação com a evaporação para diminuir o consumo de energia por parte dos evaporadores. Nesse trabalho, os autores expõem que o uso do sistema de osmose inversa como etapa prévia da evaporação para levar o caldo de 15 a 20 °Brix resultou em uma redução do consumo de energia em cerca de 33 %. No entanto, diversos problemas no uso das membranas foram citados, como a concentração de contaminantes, o incremento da viscosidade e a limpeza da membrana, portanto é esperado o uso da osmose inversa em combinação com o sistema de evaporação e não isolado. Ademais, esse processo de filtração por membrana apresentou como vantagem a ausência de perda térmica de açúcar. No entanto, a limitação na vazão de alimentação, dada pela pressão osmótica é uma de suas maiores desvantagens.

No trabalho de Wei *et al.* (2014), o uso das membranas se destacou pelo menor custo de instalação que o dos evaporadores, além da possível remoção de inibidores. Nesse contexto, a osmose inversa é apresentada como um bom substituto ao processo de evaporação, na etapa de purificação do caldo.

Atualmente, os sistemas de evaporadores são amplamente utilizados como processo de concentração prévia da fermentação, sendo por isso alvo de diversos trabalhos de modelagem. Tais trabalhos são abordados com maior profundidade no seguinte tópico.

2.3. Modelagem matemática de evaporadores

Segundo Holland e Liapis (1983), os evaporadores são usualmente utilizados para o processo de separação de um solvente volátil de um soluto não volátil. Os evaporadores são, geralmente, encontrados nas indústrias inorgânicas, orgânicas, de papel e de açúcar.

Na operação conhecida como de simples efeito, somente um evaporador é empregado, em que a alimentação deve ser aquecida até a temperatura do ponto de ebulição da mistura na pressão operacional e o solvente é evaporado e removido como vapor. Na operação de múltiplos efeitos, vários evaporadores são conectados em série. O vapor produzido no primeiro efeito é introduzido como vapor de aquecimento no segundo efeito e assim sucessivamente, se a conexão entre os evaporadores for do tipo cocorrente. Segundo Holland e Liapis (1983), para cada efeito adicionado no sistema, aproximadamente um quilograma a mais de solvente é evaporado por quilograma de vapor de aquecimento alimentado no primeiro efeito. O incremento nos quilogramas de solvente evaporado por quilograma de vapor de aquecimento é atingido somente via capital adicional. Na conexão em contracorrente, a alimentação é introduzida ao sistema pelo último efeito e o concentrado do último efeito é introduzido no penúltimo efeito e assim sucessivamente. O vapor de aquecimento segue caminho similar à conexão em cocorrente.

Nas Figura 2-2 e Figura 2-3 são apresentadas as configurações cocorrente e contracorrente.

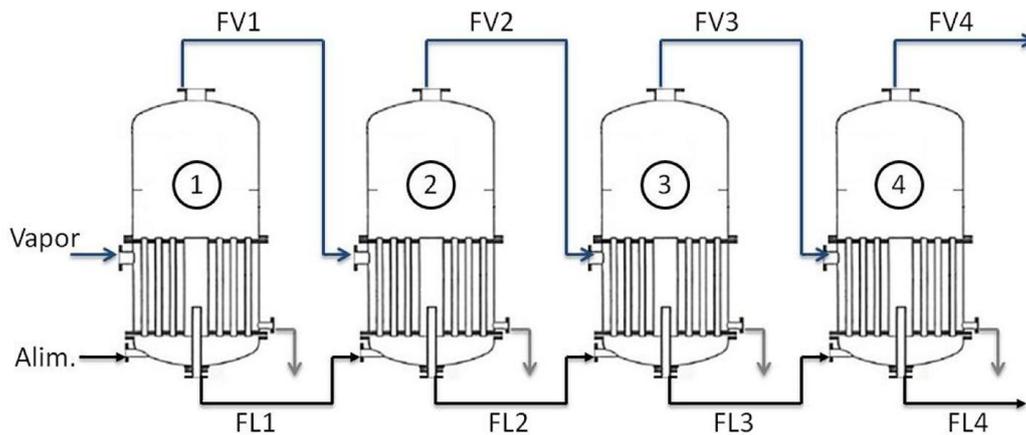


Figura 2-2 - Configuração em cocorrente de evaporadores.

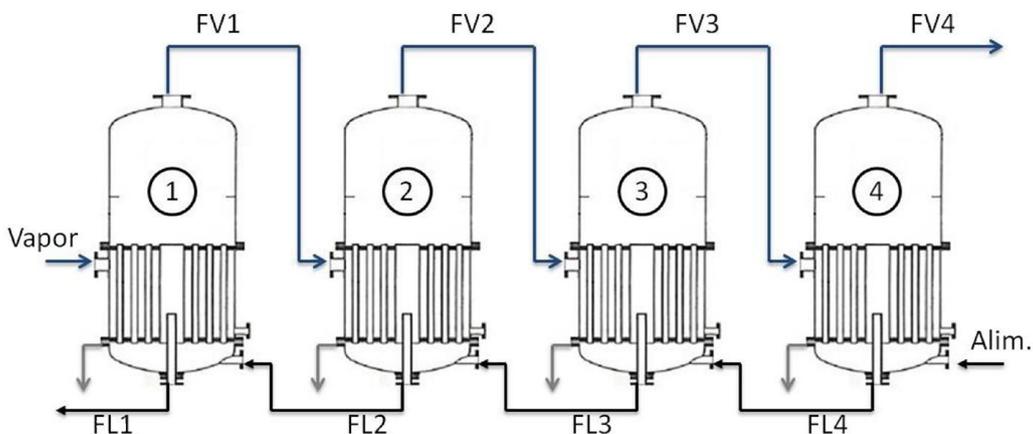


Figura 2-3 - Configuração em contracorrente de evaporadores.

Jorge *et al.* (2010) apresentaram a modelagem de um sistema de evaporadores, em estado estacionário (EE), para a indústria da cana-de-açúcar. O sistema consiste de um evaporador de filme descendente em série com um sistema de quatro evaporadores tipo Robert. O trabalho foi desenvolvido com a ferramenta *Hysys*, sendo feita a modelagem dos evaporadores como trocadores de calor em série com um evaporador *flash*. Outro trabalho que apresenta a modelagem em EE de um sistema de quatro evaporadores na indústria do açúcar é o trabalho de Kaya *et al.* (2007). No mesmo é apresentado um modelo linear dos evaporadores, em várias configurações possíveis, com o intuito de achar a configuração com menor consumo de energia.

Pehlivan *et al.* (2012) desenvolveram e compararam quatro modelos de transferência de calor em um evaporador de filme descendente em EE, para uma solução de sacarose e água. Tais modelos levam em conta a influência da transferência de calor por convecção, as forças de cisalhamento entre as fases e a viscosidade da mistura. Levando à conclusão que o modelo ajustava os dados experimentais e que a

transferência de energia depende da vazão, concentração de sacarose, do filme de cada fase e da pressão.

Holland e Liapis (1983) foram os primeiros a trabalhar na modelagem dinâmica de sistema de evaporadores. No livro, os autores apresentam as equações do modelo de um evaporador *flash* em estado não estacionário (ENE), para uma mistura de água e soluto, com as seguintes hipóteses:

- a parte líquida está perfeitamente misturada;
- a massa do solvente no vapor é desprezível relativa à massa acumulada do concentrado no evaporador;
- a massa do vapor de aquecimento na camisa é relativamente desprezível com relação aos outros termos que estão no balanço de energia para essa porção do sistema;
- o acúmulo de energia nas paredes dos tubos de metal é desprezível;
- as perdas de calor para o ambiente são desprezíveis.

Em ordem cronológica, os seguintes artigos, apresentam também a modelagem de um evaporador *flash* em ENE aplicado a diversas indústrias: Tonelli *et al.* (1990), Runyon *et al.* (1991), Cadet *et al.* (1999), e Kam *et al.* (2002). Esta modelagem foi alvo de pesquisa em diversas dissertações e teses no Brasil: Jesus (2004), Zurita (2008), Marques de Almeida (2009) e Silva (2013).

Tonelli *et al.* (1990) apresentaram a modelagem de um sistema de evaporadores de três efeitos, apresentando duas zonas (uma de aquecimento e outra de vaporização), para uma mistura binária. Runyon *et al.* (1991), baseando-se no modelo de Holland e Liapis (1983), sendo feito também o equacionamento de controle de temperatura e nível, simularam um sistema de dois evaporadores em série para a indústria de pasta de tomate. Cadet *et al.* (1999) modelaram um evaporador do tipo *flash* em ENE para o controle em plantas de cana-de-açúcar, baseado também na modelagem de Holland e Liapis (1983). Os autores consideraram a massa de solvente na fase vapor e a massa de vapor na camisa nos balanços de energias e adicionaram a hipótese de nível constante na fase líquida.

Kam *et al.* (2002) apresentam dois modelos para a simulação de um sistema de cinco evaporadores na indústria açucareira. Os modelos são levemente diferentes, o

primeiro tem como suposições que a dinâmica dos instrumentos e as válvulas de controle são desprezíveis; a temperatura e a densidade do líquido concentrado dentro do evaporador e na saída são as mesmas; as capacidades caloríficas são constantes; o efeito de filme descendente na transferência de calor e na dinâmica do trocador são desprezíveis; em cada evaporador o líquido concentrado está em equilíbrio com o vapor; as perdas de calor do sistema são desprezíveis; e não tem vaporização dentro dos trocadores de calor. Para o segundo modelo foram adicionadas as seguintes suposições ao primeiro modelo: a elevação do ponto de ebulição em cada evaporador permanece constante; a relação entre a pressão e temperatura na fase vapor é linear; o calor de vaporização é constante; e não existe acúmulo de vapor dentro dos evaporadores. Os modelos foram implementados em *Matlab/Simulink*, *Maple* e C++ para poder realizar comparações entre os programas, apresentando no trabalho uma tabela comparativa entre o desempenho de cada programa.

Em sua tese de doutorado, Jesus (2004) abordou a modelagem das etapas de evaporação e cristalização na produção de açúcar, utilizando redes neurais para a modelagem e simulação dinâmica. As simulações foram comparadas com dados reais da usina Santa Adelia (localizada em São Paulo, Brasil).

A dissertação de mestrado de Zurita (2008) baseou-se na modelagem em EE de um evaporador de filme descendente, separado em duas zonas, uma de aquecimento e outra de evaporação. O autor ainda levou em conta a variação longitudinal para a concentração, e longitudinal e radial para a temperatura dentro do evaporador.

Marques de Almeida (2008) apresentou a simulação e o controle avançado de um sistema de evaporadores de seis estágios, realizando uma modelagem dinâmica para um evaporador do tipo *flash*, utilizando a linguagem FORTRAN para realizar as simulações. Silva (2013) focou seu trabalho na modelagem dos evaporadores tipo *flash* e Robert em ENE. Sendo que no evaporador do tipo Robert os balanços de massa e energia foram realizados em EE para a calandra e em ENE para a zona de evaporação.

Quaak *et al.* (1994) apresentaram a modelagem de um evaporador de filme descendente, utilizando o programa NIZO-STREAM, que é um simulador para este tipo de evaporadores. A partir da simulação foi obtido um modelo do tipo caixa preta, com o objetivo de estudar o controle do evaporador. Este trabalho ganha destaque por ser um dos poucos trabalhando com a modelagem de evaporadores de filme descendente.

2.4. Otimização de sistemas de evaporadores

Os trabalhos encontrados sobre otimização e síntese de sistemas de evaporadores são poucos. Em ordem cronológica foram encontrados: Hillenbrand *et al.* (1988), Simpson *et al.* (2008), Sebastian *et al.* (2010), Galatro *et al.* (2011) e Irahola (2012).

Hillenbrand *et al.* (1988) centraram seu trabalho em calcular os termos de calor sensível, para cada efeito no processo de uma planta de dessalinização, obtendo a melhor temperatura de trabalho dos evaporadores. No trabalho de Simpson *et al.* (2008) foram otimizados os custos do processo de uma planta de pasta de tomate, introduzindo um fator de qualidade como parte da função objetivo para encontrar a quantidade ótima de evaporadores e as condições de operação dos mesmos. Tal problema foi realizado no *Microsoft Excel* utilizando um modelo simples para os evaporadores.

Sebastian *et al.* (2010) desenvolveram um método de otimização multi-objetivo, com objetivos de eficiência ambiental, custo operacional e potência de resfriamento. O método de resolução utilizado foi baseado em algoritmos genéticos.

Galatro *et al.* (2011) realizaram uma análise *Pinch*, utilizando *Microsoft Excel e Pro II*, para encontrar a mínima energia requerida em um sistema de três evaporadores para concentrar caldo de cana. Os autores ainda incluem na modelagem as interações binárias entre sacarose-água, dextrose-água e frutose-água.

Irahola (2012) apresentou a síntese de sistemas de evaporadores, abrangendo uma vasta quantidade de condições na disposição dos evaporadores (cocorrente, contracorrente e variações delas), e nas condições de entrada (temperatura maior ou menor que a temperatura de trabalho do evaporador). Além disso, tratou da distribuição ou não do vapor de aquecimento entre os efeitos, de forma a obter as condições ótimas de operação. Gautami *et al.* (2012) apresentaram também um trabalho de síntese de sistemas de sete e dez evaporadores em disposição contracorrente, incluindo quatorze modelos estacionários, utilizando uma equação não linear para o cálculo do coeficiente de transferência de calor. São adicionadas considerações em cada um dos modelos: *fouling* nos tubos, distribuição de vapor de aquecimento entre os evaporadores, variação nas propriedades físicas e na elevação do ponto de ebulição, vaporização por parte da alimentação, vaporização por parte do produto, a condensação na saída do fluido de aquecimento, mistura de vapores para o aquecimento de evaporadores posteriores. Foi

desenvolvido um modelo para cada uma dessas considerações e os demais modelos foram combinação entre essas considerações.

2.5. Evaporadores

A evaporação é o processo de remoção do solvente de uma solução na forma de vapor. Vale ressaltar que o objetivo principal da evaporação é a concentração da solução, não sendo o vapor o produto desejado.

2.5.1. Classificação de evaporadores

Os evaporadores podem ser classificados de acordo com o meio aquecedor empregado. Podendo estar em contato direto com a solução, ou separado da mesma por superfícies tubulares, por camisa de aquecimento, ou por parede dupla, etc. Os evaporadores com superfícies trocadoras de calor são os mais utilizados, operando, em sua maioria, de forma contínua (entrada e saídas contínuas).

Em Minton (1986), os seguintes tipos de evaporadores são apresentados: tanques com camisa, evaporadores de tubos horizontais, evaporadores de tubos verticais curtos, evaporadores de tubos verticais compridos, evaporadores de circulação forçada, evaporadores de placas e evaporadores *flash*.

2.5.1.1. Tanques com camisa

Estes tipos de evaporadores são utilizados, geralmente, quando a quantidade a evaporar é pequena. A operação pode ser contínua ou descontínua, sendo a velocidade de transferência de calor usualmente menor que nos outros tipos de evaporadores. Este tipo de evaporadores é geralmente utilizado com produtos muito viscosos, sendo necessária uma boa agitação.

2.5.1.2. Evaporadores de tubos horizontais

O projeto mais simples deste tipo é um tanque com um arranjo de tubos horizontais, com o fluido aquecedor dentro dos tubos e a evaporação no tanque. É utilizado em fluidos pouco viscosos, apresentando baixa taxa de transferência de calor.

2.5.1.3. Evaporadores de tubos verticais curtos

Os primeiros evaporadores deste tipo foram realizados por Robert, sendo por isso chamados de Evaporadores Robert. Estes consistem em um tanque com tubos

verticais que ocupam menos da metade da altura total do evaporador, no qual a entrada é realizada na parte inferior dos tubos, a saída do concentrado pela tubulação central do tanque e a saída de vapor por cima do evaporador.

A circulação do líquido por meio dos tubos (superfície aquecedora) é feita por circulação natural, em que a velocidade de circulação por meio dos tubos é muito maior que a velocidade de entrada ao evaporador. O tubo central é maior que os outros, sendo quase do tamanho do tubo de saída, permitindo assim a saída do produto. A área do tubo central deve ser tal que o nível de líquido acumulado esteja no mínimo, acima dos tubos, de modo a aprimorar a transferência de calor dinâmica e minimizar a espuma. Algumas das configurações para estes evaporadores são as de fundo do tanque esférico ou cônico, de tubos inclinados (entre 45 e 60°) ou de adição de hélices para agitação.

2.5.1.4. **Evaporadores de tubos verticais compridos**

Entre os diversos tipos de evaporadores, os evaporadores de tubos verticais compridos são os mais econômicos e os mais versáteis. Estes evaporadores assim como os anteriores, são compostos por um tanque e tubos verticais, mas neste caso os tubos ocupam quase todo o espaço do evaporador. A entrada e as saídas têm as mesmas configurações que nos evaporadores de tubos verticais curtos. Sendo que o evaporador é chamado de evaporador de filme descendente se a entrada está acima dos tubos, e caso contrário é chamado de evaporador de filme ascendente.

A circulação do fluido por meio dos tubos é influenciada pela temperatura de ebulição, sendo esta uma variável de difícil predição pois a temperatura do líquido não é uniforme ao longo dos tubos. Os efeitos hidrostáticos no ponto de elevação de ebulição são mais notórios nos tubos compridos onde a alimentação é embaixo dos tubos, quando comparados àqueles onde a alimentação é por cima dos tubos.

Os evaporadores de filme descendente são apropriados para serem usados com fluidos viscosos e com produtos sensíveis ao calor, já que geralmente apresentam um tempo de residência baixo.

2.5.1.5. **Evaporadores *flash***

Neste tipo de evaporador a solução é pré-aquecida em trocadores de calor e alimentada a um tanque que está a uma pressão inferior à pressão de saturação da água. Dessa forma, uma porção de água é evaporada imediatamente ao entrar no evaporador.

3. Metodologia

Neste trabalho, a primeira abordagem da modelagem dos evaporadores foi realizada para um evaporador *flash*. Posteriormente, foi realizada a modelagem de um evaporador do tipo Robert, que é o evaporador mais utilizado na indústria nacional de cana-de-açúcar.

3.1. Inserção das propriedades no VRTherm

Para a simulação dos diferentes compostos no processo de produção de etanol, é necessário conhecer suas propriedades físicas e termodinâmicas. Para isso, as bases de dados NREL-ASPEN e Aspen_DataBase (presentes no programa *Aspen Plus* 8.0 e 8.2) foram utilizadas nesta pesquisa.

O simulador EMSO, por meio da utilização do *plugin* VRTherm, já possui as propriedades termodinâmicas, de mais de 2000 compostos, sendo em sua maioria pertencentes à indústria petroquímica.

Os compostos mais usuais encontrados nas biorrefinarias a partir de cana-de-açúcar são apresentados na Tabela 3-1.

Tabela 3-1 - Compostos mais usuais nas refinarias de cana-de-açúcar

Compostos gasosos	Compostos líquidos e solúveis	Compostos sólidos insolúveis
CO ₂	Água	Celulose
CO	Sacarose	Lignina
N ₂	Dextrose (Glicose)	Xilanas (Hemicelulose)
O ₂	Xilose	Enzimas (Celulase)
	Furfural	Biomassa (Cellmass, ZimoMobilis)
	Celobiose (Celose)	Dióxido de Silício (Silica)
	Ácido sulfúrico	
	Hidróxido de amônio	
	Amônia	
	Álcool isoamílico (3-metil-1-butanol)	
	HMF (Hidroxi-metil-furfural)	
	Etanol	
	Ácido acético	
	Hidróxido de cálcio	

Os compostos que precisaram ser inseridos no VRTherm foram: sacarose, dextrose, xilose, celobiose (celose), hidróxido de cálcio, hidróxido de amônio, HMF (hidroxi-metil-furfural), celulose, xilanas (hemicelulose), lignina, biomassa, enzimas e sílica (SiO₂).

As propriedades dos compostos foram pesquisadas principalmente no simulador AspenPlus 8.2, já que este possui uma vasta base de dados, nas diversas áreas da indústria. Além disso, foram utilizadas as bases de dados do DIPPR (*Design Institute for Physical Properties*; o qual, além das relações funcionais e de seus parâmetros, informa alguns pontos experimentais ou de bibliografia) e do KDB (*Korean Data Base*).

As propriedades a serem inseridas no *plugin* VRTherm estão indicadas na Tabela 3-2.

Tabela 3-2 – Propriedades disponíveis para inserir no VRTherm

Propriedades físicas constantes	
Propriedade	Unidade
Massa molar	g/mol
Ponto de ebulição normal	K
Ponto de congelamento	K
Temperatura de ponto triplo	K
Pressão de ponto triplo	kPa
Temperatura crítica	K
Pressão crítica	kPa
Volume crítico	m ³ /mol
Compressão crítica	Adimensional
Fator acêntrico	Adimensional
Propriedades físicas (função da temperatura)	
Propriedade	Unidade
Pressão de vapor	Pa
Capacidade calorífica do gás ideal	kJ/(kmol K)
Capacidade calorífica do líquido	kJ/(kmol K)
Viscosidade do gás, a baixas pressões	cP
Viscosidade do líquido	cP
Condutividade térmica do gás, a baixas pressões	W/(m K)
Condutividade térmica do líquido	W/(m K)
Tensão superficial	dyn/cm
Propriedades físicas (somente em uma temperatura)	
Propriedade	Unidade
Densidade do líquido	mol/cm ³
Calor de vaporização	kJ/kmol
Tensão superficial	dyn/cm

As equações abaixo foram utilizadas como base para a inserção das propriedades que são função da temperatura, em que T é a temperatura em Kelvin e Prop é qualquer propriedade.

$$\text{Prop} = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 + F T^5 + G T^6 \quad (1)$$

$$\text{Prop} = 0.1(A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 + F T^5 + G T^6) \quad (2)$$

$$\text{Prop} = MM(A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 + F T^5 + G T^6) ; \text{MM}=\text{massa molar} \quad (3)$$

$$\ln\left(\frac{\text{Prop}}{1000}\right) = A \ln(T) + \frac{B}{T} + C + D T^2 \quad (4)$$

$$\mu_{\text{gas}} [cP] = 1000 \frac{A T^B}{\left(1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}\right)} ; \text{com T em R, } \mu: \text{ viscosidade} \quad (5)$$

$$\mu_{\text{gas}} [mP] = A + B T + C T^2 ; \text{com T em K} \quad (6)$$

$$\mu_{\text{liq}} [cP] = 1000 e^{\left(A + \frac{B}{T} + C \ln T + D T^E\right)} ; \text{com T em R} \quad (7)$$

$$\mu_{\text{liq}} [cP] = 10^{\left(A + \frac{B}{T} + C T + D T^2\right)} ; \text{com T em K}^1 \quad (8)$$

$$\kappa_{\text{liq}} \left[\frac{\text{W}}{\text{mK}}\right] = A + B T ; \text{com T em K, } \kappa: \text{ condutividade térmica} \quad (9)$$

Com exceção da viscosidade do gás, da viscosidade do líquido e da condutividade térmica do líquido, a inserção das propriedades foi feita a partir das Equações (1) a (4). A determinação dos coeficientes das curvas foi feita pelo método dos mínimos quadrados, fundamentado na minimização das diferenças entre os dados nas expressões encontradas e os obtidos pelas expressões.

Baseando-se nas equações da base de dados DIPPR, o *Aspen Plus* faz uso das seguintes equações para o cálculo das propriedades, em que utiliza a mais adequada dependendo o caso. Para o caso de capacidade calorífica do líquido e a condutividade térmica do líquido é utilizada a Equação (10); para o caso da pressão de vapor é utilizada a Equação (11) ou a (16); na condutividade térmica do vapor é utilizada a Equação (12); a Equação (13) é utilizada na estimação da densidade do líquido; para o cálculo do calor de vaporização é utilizada a Equação (14); e a Equação (15) é utilizada para a capacidade calorífica do gás ideal.

¹ No VRTherm está escrito como: $\mu_{\text{liq}} [cP] = A + \frac{B}{T} + C T + D T^2$, mas o cálculo realizado pelo VRTherm versão 1.4.2 é o apresentado na Eq. (8).

$$\text{Prop} = A + B T + C T^2 + D T^3 + E T^4 \quad (10)$$

$$\text{Prop} = \exp\left(A + \frac{B}{C+T} + D \ln T + E T^F\right) \quad (11)$$

$$\text{Prop} = \frac{A T^B}{\left(1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}\right)} \quad (12)$$

$$\text{Prop} = \frac{A}{B \left(1 + (1-T/C)^D\right)} \quad (13)$$

$$\text{Prop} = A (1 - T_r)^{(B+CT_r+DT_r^2+ET_r^3)} \quad (14)$$

$$\text{Prop} = A + B \left(\frac{C/T}{\sinh(C/T)}\right)^2 + D \left(\frac{E/T}{\cosh(E/T)}\right)^2 \quad (15)$$

$$\text{Prop} = \exp\left[\frac{A(1-T_r) + B(1-T_r)^{1.5} + C(1-T_r)^3 + D(1-T_r)^6}{T_r}\right] \quad (16)$$

Para os compostos dissolvidos, a base de dados PURE11 do *Aspen Plus* foi utilizado preferencialmente na busca por suas propriedades.

3.2. Evaporador Flash

A modelagem do sistema em questão inicia-se com o balanço de massa, em base molar, por componente:

Acumulação_{*i*} = Entrada_{*i*} – SaídaLiq_{*i*} – SaídaVap_{*i*}; em que *i*(composto) = 1, ..., NComp

Descreve-se a seguir cada um dos termos do balanço.

$$\text{Acumulação}_i = \frac{dn_i}{dt} \quad \text{em que } n_i = N_L x_i + N_V y_i \quad (17)$$

$$\text{Entrada}_i = F_o z_i \quad (18)$$

$$\text{SaídaLiq}_i = F_L x_i \quad (19)$$

$$\text{SaídaVap}_i = F_V y_i \quad (20)$$

Resultando nas seguintes equações para os balanços de cada componente:

$$\frac{dn_i}{dt} = F_o z_i - F_L x_i - F_V y_i \quad \text{com } n_i = N_L x_i + N_V y_i \quad (21)$$

Pela definição de fração molar, as variáveis x_i e y_i devem satisfazer às seguintes restrições:

$$\sum_{i=1}^{NComp} x_i = 1 \quad e \quad \sum_{i=1}^{NComp} y_i = 1 \quad (22)$$

O balanço de energia do evaporador é dado por:

$$\frac{dEnergia}{dt} = F_o h_o - F_L h_L - F_V h_V + Q \quad \text{em que} \quad Energia = N_L h_L + N_V h_V - PV \quad (23)$$

onde F são as taxas molares e h as entalpias molares, da entrada (o), do líquido de saída (L) e do vapor de saída (V). Q é o calor injetado no sistema, N a quantidade de moles em cada fase (L) líquida e (V) vapor. P a pressão do sistema e V o volume total do sistema.

No desenvolvimento das equações apresentadas anteriormente, foram consideradas as seguintes hipóteses:

- Cada uma das fases está totalmente misturada.
- Não se tem perda de energia nas paredes do evaporador.
- Equilíbrio térmico, mecânico e químico.
- Para o cálculo de fugacidade a mistura é ideal.

Além dos balanços feitos anteriormente, há ainda as equações de equilíbrio térmico, mecânico e químico:

$$T_L = T_V; \quad P_L = P_V; \quad \phi_i^L x_i = \phi_i^V y_i \quad (24)$$

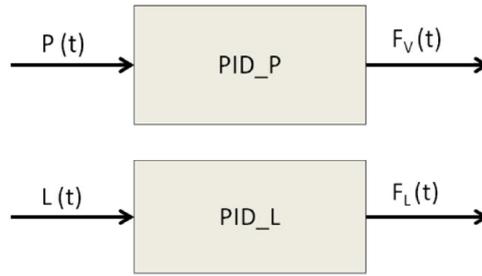
O controle de nível e de pressão foi representado pela equação de controlador do tipo PID, na qual $e(t)$ é o erro, isto é, a diferença entre o *setpoint* e a variável controlada:

$$Ação = Bias + K_p e(t) + \frac{K_p}{\tau_i} \int e(t) dt + K_p \tau_d \frac{de(t)}{dt} \quad (25)$$

Podendo-se agrupar os termos das constantes da seguinte forma:

$$K_i = \frac{\tau_i}{K_p} \quad e \quad K_d = K_p \tau_d \quad (26)$$

A ação do controle pode ser representada pelos diagramas abaixo:



Como o evaporador apresenta volume total constante, a equação a seguir também deve ser satisfeita:

$$V = N_L v_L + N_V v_V \quad (27)$$

Considerando a geometria do evaporador como cilíndrica, o nível de líquido relaciona-se com seu volume por meio de:

$$L = \frac{V_L}{A} \text{ em que } V_L = N_L v_L \quad (28)$$

As propriedades termodinâmicas (h_L , h_V , v_L , v_V , ϕ_L , ϕ_V) são funções da temperatura, pressão e composição da respectiva fase, sendo obtidas a partir da chamada do *plugin* VRTherm.

3.3. Evaporador Robert

Para a modelagem do evaporador Robert, foi considerado o evaporador composto por duas seções. Em uma primeira na qual ocorre a troca de calor nos tubos e a seguinte na qual ocorre a separação das fases, essa última modelada de forma análoga ao evaporador tipo *flash* (modelo já explicado no tópico anterior). Na Figura 3-1, o esquema deste tipo de evaporador está apresentado, em que as duas seções estão conectadas em série.

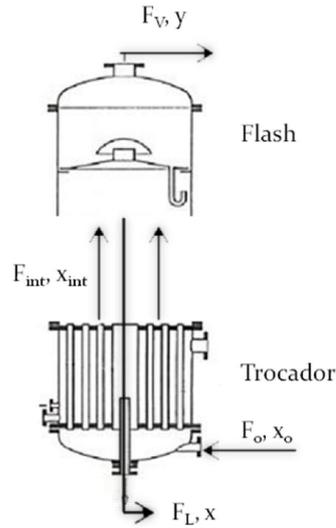


Figura 3-1 – Esquema da conexão. Adaptado de Hugot (1986).

Para o modelo do trocador de calor, foi considerada a equação de continuidade invariante no tempo.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} (\rho \cdot v) = 0 \quad (29)$$

Implicando em:

$$\rho \cdot v = C^{te} \quad (30)$$

O balanço de massa de cada um dos componentes nos tubos é expresso por:

$$\boxed{\frac{\partial (x_i \rho_L^m)}{\partial t} = - \frac{\partial (v x_i \rho_L^m)}{\partial z}} \quad (31)$$

E o balanço de energia por:

$$\boxed{\frac{\partial (h_L \rho_L^m - P(z))}{\partial t} = - \frac{\partial (v \rho_L^m h_L - P(z))}{\partial z} + U \frac{4}{D_t} [T_{vap} - T(z, t)]} \quad (32)$$

Além dos balanços, foi considerada a seguinte restrição:

$$\sum_{i=1}^{N_{comp}} x_i = 1 \quad (33)$$

As propriedades termodinâmicas (h_L , ρ_L , μ_L) são funções da temperatura, pressão e composição da fase líquida, calculados por meio do *plugin* VRTherm do EMSO.

Para o cálculo da pressão ao longo dos tubos foi utilizada a Equação (34), onde foi considerado que a pressão na entrada do tubo ($z=0$) é a pressão da alimentação, e a pressão na saída do tubo ($z=H_t$) é a dada pelas contribuições das pressões estática e dinâmica, considerando um perfil linear entre a entrada e o *flash*:

$$P = P_{z=0} - \frac{1}{2} \left[(P_{z=0} - P_{flash}) / H_t + \rho g \right] z \quad (34)$$

Foram realizadas duas abordagens na transferência de calor na calandra: a primeira foi supondo que somente ocorre transferência de calor por meio de calor sensível por parte do líquido dentro dos tubos (Robert monofásico). Ressaltando que também é calculada a quantidade vaporizada ao longo do tubo para ser utilizado como calor a inserir no *flash* que está em série com a calandra. Na segunda abordagem é retirada a suposição de ter somente líquido dentro dos tubos, sendo calculada a transferência de calor a partir do calor sensível e do calor de vaporização (Robert bifásico).

O coeficiente global de transferência de calor é calculado a partir dos coeficientes de transferência de calor de cada fase do sistema (exterior aos tubos, paredes dos tubos e interior aos tubos), de acordo com a seguinte equação:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_{int}} + \frac{\varepsilon}{k_w} + \frac{1}{h_{ext}} \quad (35)$$

com ε a espessura do tubo.

Para o coeficiente de transferência de calor dentro dos tubos, foi utilizada a Equação (36), que não considera os efeitos da vaporização:

$$h_{int} = 1,6636 \text{Re}^{-0,2648} \text{Pr}^{0,1592} \quad \text{Prost et al. (2006)} \quad (36)$$

$$\text{Em que: } \text{Re} = \frac{D_t G}{\mu} \quad \text{e} \quad \text{Pr} = \frac{C_p \mu}{k}$$

A correlação foi utilizada a partir do trabalho de Prost *et al.* (2006), em que é apresentada a transferência de calor dentro dos tubos de um filme descendente. Apesar dessa configuração não ser a mesma do processo considerado, tal correlação apresenta valores mais próximos da realidade que aqueles calculados considerando somente água dentro dos tubos, como apresentado no trabalho de Minton (1996). Prost *et al.* (2006) apresentaram uma correlação semelhante à apresentada por Minton (1986), mas

calculando os valores das potências de Re, Pr e o da constante da equação específicos ao sistema água-sacarose.

A Equação (37) foi utilizada para o cálculo do coeficiente externo de transferência de calor, conforme apresentada em Hewitt (1994) para a transferência de calor por condensação. Nos cálculos do balanço de energia desprezou-se o valor de calor sensível fora dos tubos, já que nas condições de simulação considerou-se o vapor como saturado ou perto da saturação:

$$h_{ext} = 0,943 \left(\frac{k_{L_{ext}}^3 \rho_{L_{ext}}^2 g h_g}{\mu_{L_{ext}} (T_{sat} - T_w) L} \right)^{1/4} \quad (37)$$

em que h_g é o calor de vaporização, $k_{L_{ext}}$ a condutividade do líquido saturado, $\rho_{L_{ext}}$ a densidade do líquido saturado e $\mu_{L_{ext}}$ a viscosidade do líquido saturado no fluido exterior do tubo e L é a altura do tubo.

As primeiras simulações foram realizadas para o caso onde existe somente líquido dentro dos tubos. Em simulações posteriores, a suposição de fluxo monofásico dentro dos tubos foi desconsiderada.

Quando a existência de vapor dentro dos tubos do evaporador for considerada na modelagem, torna-se necessário levar em conta a transferência por convecção e por evaporação no cálculo dos coeficientes de transferência de calor.

Vários livros tratam este tema, como Minton (1986), Ghiaasiaan (2008) e Bejan (2013). Segundo Ghiaasiaan (2008) e Minton (1986), uma das primeiras correlações existentes foi a correlação de Chen (1966), que vem sendo utilizada até os dias de hoje. Essa correlação é usada para transferência de calor em ebulição saturada, e pode ser aplicada para tubos com as fases líquida e vapor em cocorrente. Além dessa, outras correlações podem ser usadas como as correlações de Kandlikar (1990-1991), de Gungor e Winterton (1986-1987), de Steiner e Taborek (1992), sendo esta última a mais acurada.

A correlação de Chen (1966) é descrita pela Equação (38).

$$h = F_c h_c + S h_{eb} \quad (38)$$

em que h_c é o coeficiente de transferência de calor devido à convecção, podendo ser avaliadas pelas correlações utilizadas anteriormente considerando somente uma fase

dentro dos tubos; h_{eb} é o coeficiente de transferência de calor devido à evaporação do líquido dentro dos tubos; F_c e S são fatores referentes aos dois fenômenos de transferência de calor que estão acontecendo no momento, calculados pelas Equações (39) e (40), respectivamente.

$$F_c = \left(\frac{Pr_L + 1}{2} \right)^{0,444} (1 + X_{tt}^{0,5})^{1,78} \quad (\text{BENNETT e CHEN, 1980}) \quad (39)$$

com $X_{tt} = \left(\frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0,5} \left(\frac{\mu_L}{\mu_V} \right)^{0,1} \left(\frac{1-v}{v} \right)^{0,9}$ (Parâmetro turbulento-turbulento de Martinelli)

$$e S = (1 + 2,56 \cdot 10^{-6} (\text{Re}_L F^{1,25})^{1,17})^{-1} \quad (\text{COLIER, 1981}) \quad (40)$$

$$h_{eb} = 0,00122 \left(\frac{k_L^{0,79} C_{P_L}^{0,45} \rho_L^{0,49}}{\sigma^{0,5} \mu_L^{0,29} (h_{fg} \rho_V)^{0,24}} \right) (T_w - T)^{0,24} (P(T_w) - P)^{0,75} \quad (41)$$

Esta correlação é bem adaptada para água a pressões relativamente baixas, e também tem sido utilizada para outros tipos de fluidos refrigerantes.

Para simulação e implementação no EMSO, foi realizada a discretização por diferenças finitas do sistema de equações diferenciais.

3.4. Otimização

No presente trabalho, a análise de sensibilidade e a conseqüente busca pelo ótimo de uma função univariável são apresentadas. O sistema em estudo é um sistema de quatro evaporadores em cocorrente (Figura 3-2).

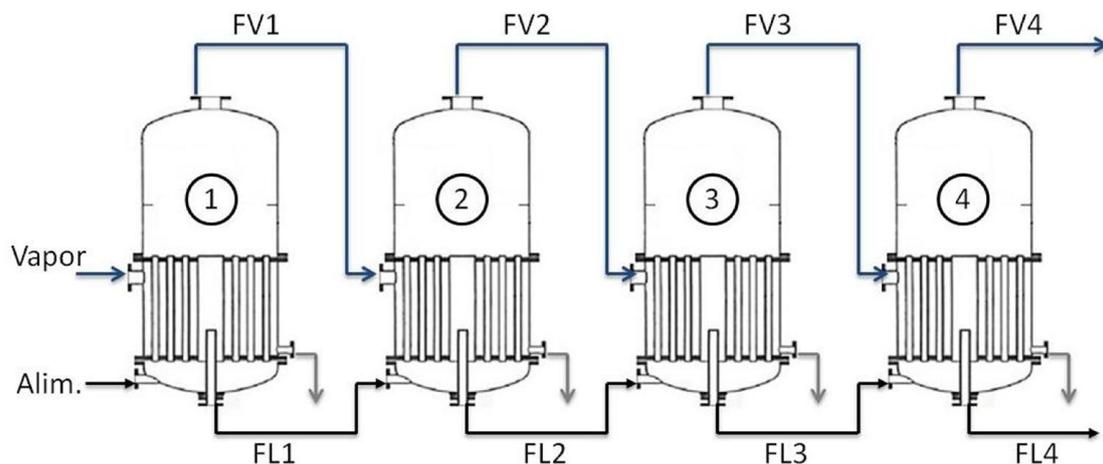


Figura 3-2 – Sistema de quatro evaporadores em cocorrente.

Dessa forma, foi possível avaliar diferentes configurações de distribuição do vapor em cocorrente entre os evaporadores (Figura 3-3). Para a conexão entre as correntes de vapor foram realizados balanços de massa e energia e a suposição que a pressão na união é a média ponderada pelas taxas molares de cada vapor.

Em primeira instância, procurou-se uma melhor distribuição de vapor entre os evaporadores. Para uma mesma quantidade de vapor introduzido no sistema, e com as mesmas condições de operação de pressão e temperatura, foram observadas as maiores concentrações de soluto obtidas na saída de cada sistema.

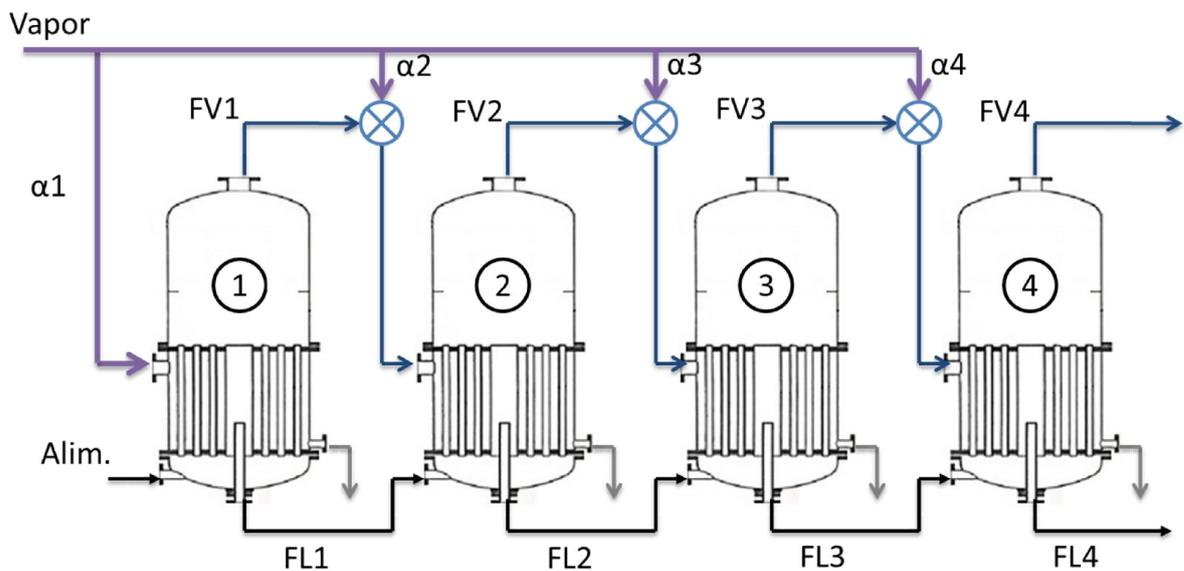


Figura 3-3 – Sistema de quatro evaporadores em cocorrente com distribuição de vapor.

Posteriormente, fixada a distribuição de vapor no sistema, procurou-se o menor consumo de vapor de modo a obter a mesma concentração de sacarose na saída do sistema. Para isso, as condições de operação do sistema foram variadas, para que a pressão em cada evaporador reduzisse de forma linear com o número de evaporadores, e assim encontrar a melhor condição de operação dos evaporadores com o menor consumo de vapor.

4. Resultados e Discussões

4.1. Inserção das propriedades dos compostos no VRTherm

Foram coletados os dados para vários compostos usuais nas biorrefinarias de cana-de-açúcar. Na Tabela 4-1 mostra-se de forma esquemática as propriedades obtidas para cada composto e no Apêndice são apresentados os resultados dos ajustes das funções selecionadas para as propriedades físicas dos componentes e comparações com dados experimentais e relações da literatura.

Tabela 4-1– Propriedades incluídas no VRTherm. (X - obtidas, F - faltantes, S - Similares, A - Aproximados)

	Sacarose	Dextrose	Xilose	Hidro. Amônio	Hidro. Cálcio
Massa molar (g/mol)	X	X	X	X	X
Ponto de ebulição normal (K)	X	X	X	X	F
Ponto de congelamento (K)	X	X	F	X	X
Temperatura de ponto triplo (K)	X	X	F	X	X
Pressão de ponto triplo (kPa)	X	X	F	X	F
Temperatura crítica (K)	X	X	X	S	X
Pressão crítica (kPa)	X	X	X	S	X
Volume crítico (m ³ /mol)	X	X	X	S	X
Compressão crítica	X	X	X	S	X
Fator acêntrico	X	X	X	S	X
Pressão de vapor (Pa)	X	X	X	X	A
Capacidade calorífica do gás ideal (kJ/kmol-K)	X	X	X	X	X
Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K)	X	X	X	X	A
Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP)	X	X	X	A	A
Viscosidade do líquido (cP)	S	X	X	X	X
Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K)	X	X	X	A	A
Condutividade térmica do líquido (W/m-K)	X	X	X	X	X
Tensão superficial (dyn/cm)	X	X	X	F	F
Densidade do líquido (mol/cm ³)	X	X	X	X	X
Densidade do sólido (mol/cm ³)					X
Capacidade calorífica do sólido (kJ/kmol-K)					X
Calor de vaporização (kJ/kmol)	X	X	X	F	F

Os espaços deixados em branco são aquelas propriedades que não são necessárias conhecer para a utilização do composto nas simulações.

Nos compostos que não foram encontradas todas as propriedades, foram utilizadas as propriedades de compostos similares (compostos marcados com S na Tabela 4-1). Para o caso de viscosidade da fase líquida da sacarose foi utilizada aquela informada no trabalho de Silva (2013). Para as viscosidades da fase gás do hidróxido de amônio e hidróxido de cálcio, foram usados valores baixos devido às concentrações desprezíveis destes compostos na fase gás nas condições de simulação.

As propriedades dos compostos marcadas com a letra A foram representadas por valores aproximados. Para a pressão de vapor do hidróxido de cálcio foi utilizado 0,0001 Pa, valor relativamente baixo, devido a este composto ser muito pouco volátil. Nas condições de simulação, o hidróxido de amônio e o hidróxido de cálcio têm concentrações desprezíveis na fase gás e, portanto, as propriedades faltantes foram aproximadas por valores baixos, da ordem de 1×10^{-6} .

4.2. Simulações e comparação da resposta dos evaporadores

De modo a observar a resposta do sistema, foram planejadas simulações com perturbações de graus compatíveis com processos reais. Foram realizados de graus nas condições da entrada da alimentação, aplicando de graus na concentração, na temperatura e na vazão da alimentação. Foram comparadas as respostas para os sistemas de um evaporador, para os modelos de evaporador tipo *flash*, Robert monofásico e Robert bifásico, e o sistema de quatro evaporadores, para os modelos de evaporador tipo *flash* e Robert monofásico, para uma mistura binária de água-sacarose. Também foram comparadas as respostas de um evaporador para os modelos de evaporador tipo *flash* e Robert para uma mistura de sete componentes.

Para comparação dos evaporadores, foram utilizadas as mesmas condições de operação, nas quais o calor injetado no evaporador tipo *flash* é equivalente ao valor no estado estacionário do evaporador Robert monofásico.

4.2.1. Sistemas de um evaporador com mistura água-sacarose

As características do evaporador utilizadas (Tabela 4-2) foram as mesmas adotadas no trabalho de Jesus (2004).

Tabela 4-2 – Dimensões do evaporador

D_t	33,10 mm	$D_{t \text{ ext}}$	34,35 mm
D_s	5,054 m	N_t	7754
H_t	2,80 m	H	3,747 m

com D_b , D_{t_ext} e D_s são os diâmetros interno e externo dos tubos e do evaporador, respectivamente, N_t número total de tubos, H_t e H as alturas dos tubos e do evaporador, respectivamente.

Para a simulação de um só evaporador, foram usadas as condições de operação e iniciais apresentadas nas Tabela 4-3 e Tabela 4-4, respectivamente, também baseadas no trabalho de Jesus (2004), com exceção dos parâmetros dos controladores que foram calculados seguindo a metodologia de controle clássico (SEBORG *et al.*, 2003).

Tabela 4-3 - Condições da simulação

Parâmetro	Valor (Unidades)	Controlador PI	Parâmetro	Valor (Unidades)
Fo	300 m ³ /h	Pressão	ub (bias)	0,6
To	373 K		Kc	0,97
Po	2,2 atm		τ_i	3,50 s
zo	18 °Bx		Set Point	1,7 atm
Tvap	410 K	Nível	ub	0,45
Pvap	2,2 atm		Kc	7,0
Fvap	7358 kmol/h		τ_i	18,12 s
			Set Point	2,9 m

Tabela 4-4- Condições iniciais no evaporador

x	[0,98 0,002]
L	2,9 m
T	389,3 K

Tabela 4-5 - Equações recomendadas em Seborg *et al.* (2013)

Com

$$K_C = \frac{100\%}{\Delta h} \quad \Delta h = \min \{ h_{max} - h_{SP}, h_{SP} - h_{min} \}$$

Expressadas em porcentagens do transmissor.

$$\tau_I = \frac{4V}{K_C Q_{max}}$$

com h_{max} , h_{min} e h_{SP} os níveis máximo, mínimo e de *Set Point*, respectivamente, K_c o ganho e τ_I o tempo integral do controlador.

Para a sintonia dos controladores de pressão, foi utilizado o método de síntese direta, no qual a partir de um modelo linearizado do sistema é possível calcular os parâmetros do controlador. No presente trabalho, o modelo linear foi obtido a partir da resposta na pressão do vapor de saída a um degrau no sinal da válvula da taxa de vapor de saída, e foram calculados os parâmetros de um modelo de primeira ordem. Foram feitas as aproximações da resposta aos modelos de primeira ordem e de primeira ordem com tempo morto, encontrando que o tempo morto é quase desprezível em comparação com o valor da constante de tempo do sistema.

Na Figura 4-1 é apresentada a resposta do sistema e a função estimada para o evaporador. A relação funcional foi: $Y = -1,2106 \left(1 - e^{-t[s]/3,50} \right)$, com Y a resposta do sistema, relativa ao ponto inicial.

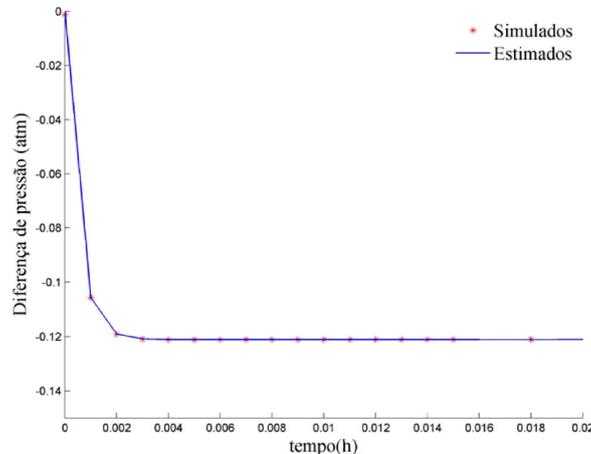


Figura 4-1- Resposta do sistema a um degrau no sinal da válvula de vapor. Diferença de pressão relativa ao ponto inicial.

Para o evaporador Robert foi também utilizado a condutividade dos tubos (k_{cond}) de 53 W/m/K.

A seguir, são apresentados os resultados dos diferentes degraus aplicados aos sistemas. A modelagem utilizada no caso do evaporador Robert, em todas as simulações dos itens 4.2.1, 4.2.2 e 4.2.3 foi a de escoamento monofásico nos tubos.

As simulações foram realizadas no simulador de processos EMSO, utilizando como algoritmo de resolução dos sistemas de equações algébricas o *nl solver*, que utiliza o método de Newton-Raphson, e como algoritmo de resolução de sistemas de equações algébrico-diferencial o *dasslc*, que faz uso do método BDF (*Backward Differentiation Formulae*). Para os dois algoritmos já incluídos no simulador, as tolerâncias relativas e absolutas foram fixadas em 1×10^{-5} e 1×10^{-7} , respectivamente para o *nl solver*; e 1×10^{-4} e 1×10^{-6} , respectivamente para o *dasslc*.

4.2.1.1. Degrau de 2,5 °Bx na concentração de entrada

Para a devida comparação dos modelos dos evaporadores *flash* e Robert, ao mesmo tempo em que a concentração de entrada foi aumentada, foi necessária a redução do calor injetado no evaporador *flash*, como é apresentado na Figura 4-2.

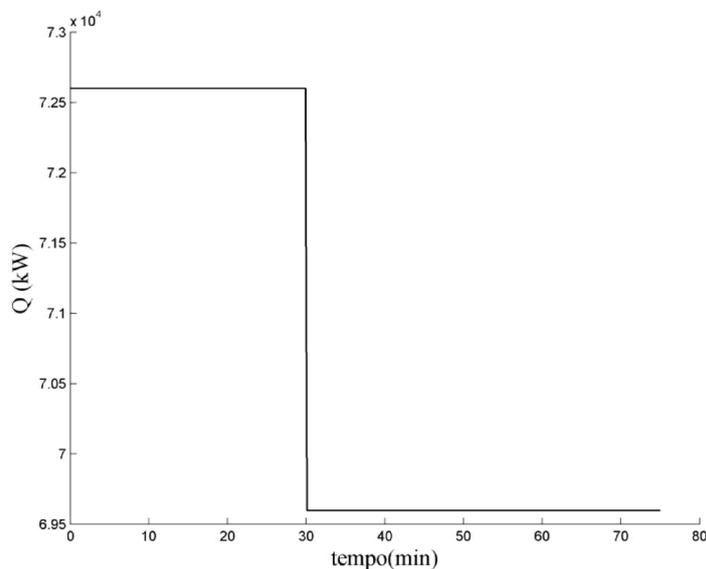


Figura 4-2- Calor injetado no evaporador *flash* para um degraú na concentração de entrada.

A partir da Figura 4-3 e Figura 4-4 é possível observar que as respostas dos dois modelos são diferentes. Como era esperado, ao aumentar a concentração e diminuir o calor no evaporador tipo *flash*, a pressão tende a diminuir e, portanto, a vazão de vapor também, como se vê refletido nessas figuras.

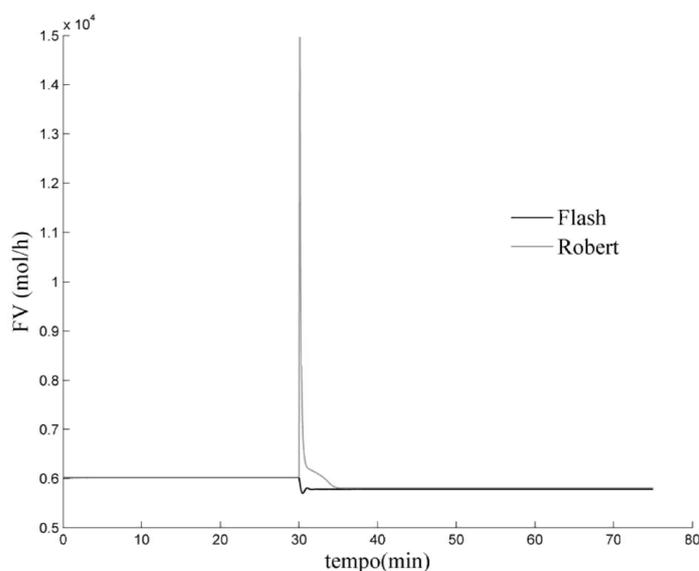


Figura 4-3 - Taxa molar do vapor ao longo do tempo, em resposta a um degraú na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

No evaporador Robert, a resposta é mais complexa. No começo do degrau é perceptível as mudanças devido ao aumento da concentração da sacarose, para depois o sistema responder em função das mudanças geradas na transferência de calor por parte da concentração. Assim no começo da perturbação, com o aumento da concentração de sacarose a pressão aumenta, e assim também a vazão de vapor. Com o passar do tempo a transferência de calor diminui, representada pelo coeficiente de transferência de calor da Figura 4-5, e, portanto, a pressão diminui e assim a vazão de vapor. É possível perceber que o coeficiente de transferência de calor tem pouca variação conforme varia a altura dos tubos.

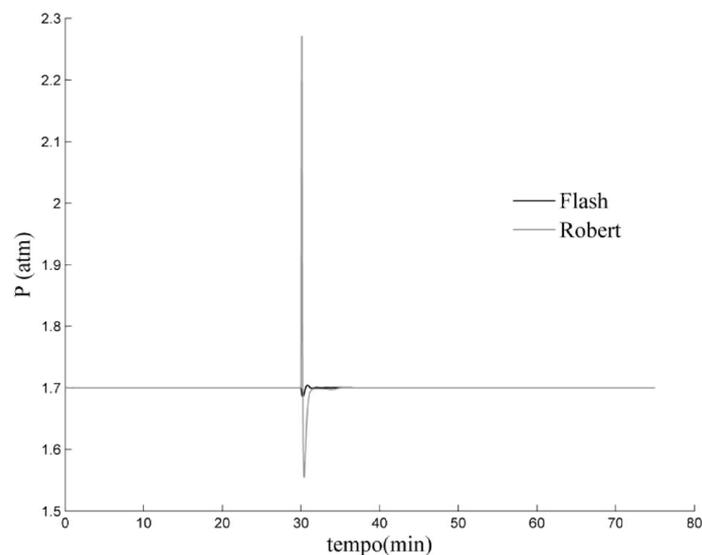


Figura 4-4 - Pressão do evaporador ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

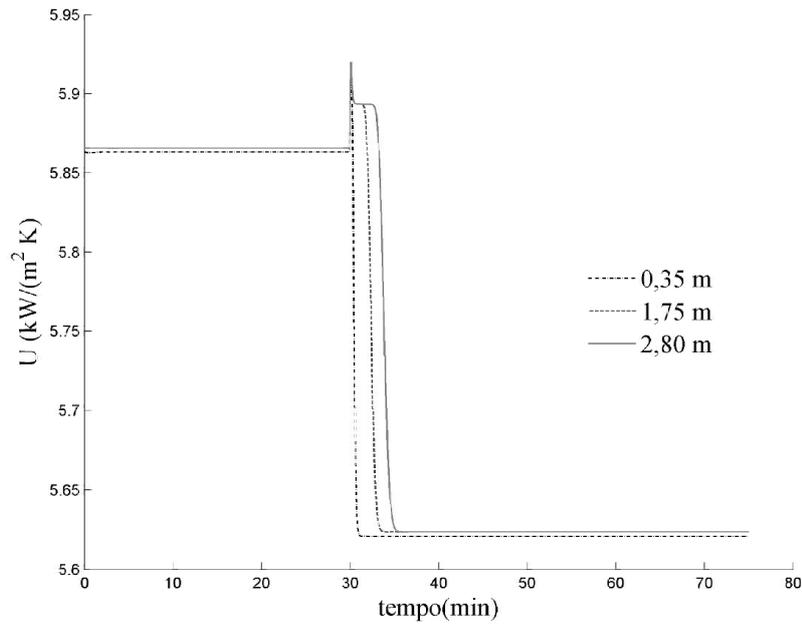


Figura 4-5 – Coeficiente de transferência de calor ao longo do tempo, para três pontos dentro dos tubos, para o modelo do evaporador Robert. (distancias medidas desde a entrada nos tubos)

Pela Figura 4-4 e pela Figura 4-6 pode-se perceber que os controladores atuam após a perturbação de forma rápida, cerca de 15 minutos, levando a pressão e o nível aos valores desejados (*Set Points*).

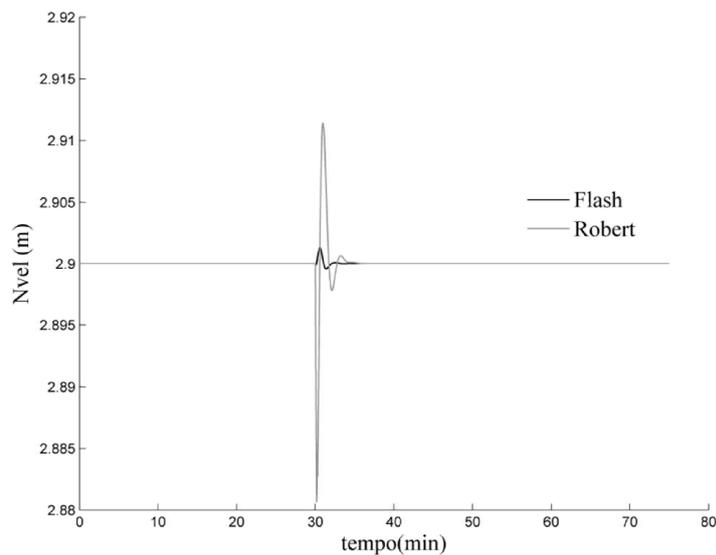


Figura 4-6 – Nível do evaporador ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

Como é esperado a concentração no líquido concentrado aumenta. Assim como as outras variáveis apresentadas o comportamento para o modelo *flash* é mais suave que para o Robert (Figura 4-7).

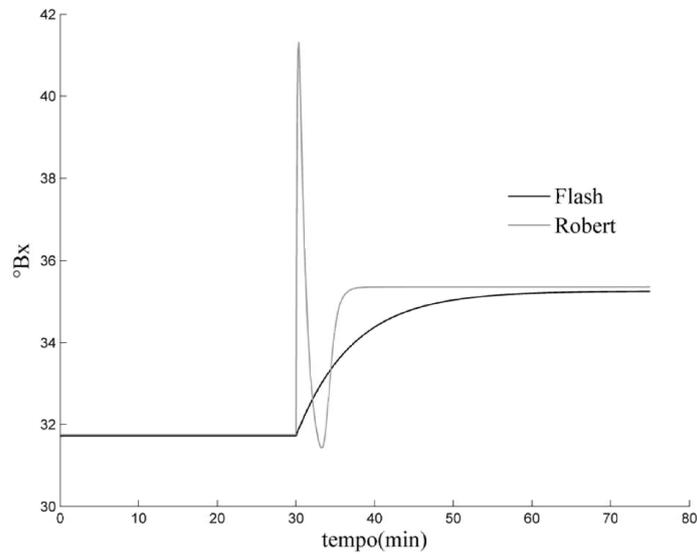


Figura 4-7 - Concentração de sacarose no líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

Segundo Asadi (2005), o EPE (Elevação do Ponto de Ebulição) para as condições propostas na condição inicial está compreendido entre 0,71 e 0,98 °C. Foi calculado o EPE para o ponto de estado estacionário de partida, o mesmo foi de 0,79 °C, estando assim de acordo com a bibliografia citada.

4.2.1.2. Degrau de 10% no fluxo molar de entrada

Assim como para as simulações do item anterior, foi aplicado um degrau no calor injetado no evaporador *flash* (Figura 4-8).

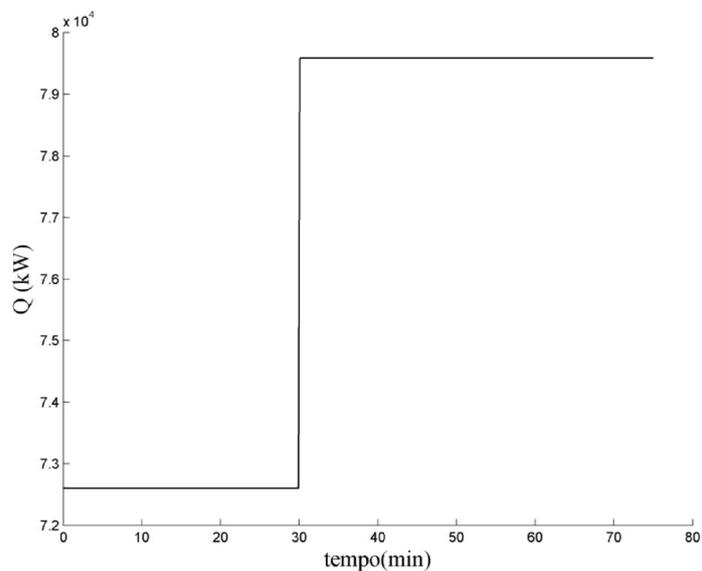


Figura 4-8 - Calor injetado no evaporador *flash* para um degrau na vazão de entrada.

As respostas dos sistemas para o degrau na vazão de entrada são similares. Assim quando a vazão aumenta, o nível aumenta e por consequência também a pressão e, com o aumento da pressão, também aumenta a taxa molar de vapor na saída do sistema. Diferentemente do degrau na composição da alimentação, a resposta do Robert ao degrau na vazão não apresenta grandes oscilações na etapa inicial do degrau e quando a transferência de calor começa a fazer efeito, já que esses efeitos têm o mesmo sinal sobre as variáveis (Figura 4-9 e Figura 4-10).

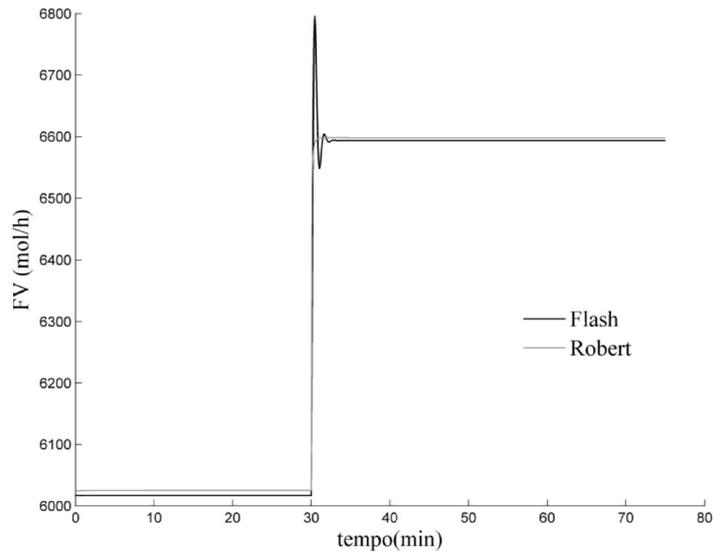


Figura 4-9 - Taxa molar do vapor ao longo do tempo, em resposta a um degrau no fluxo molar da entrada, para um sistema de um evaporador.

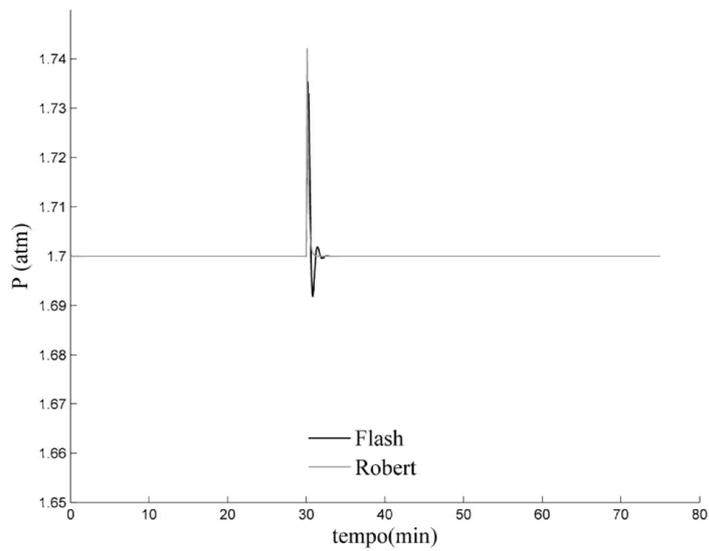


Figura 4-10 - Pressão do evaporador ao longo do tempo, em resposta a um degrau no fluxo molar da entrada, para um sistema de um evaporador.

Na Figura 4-11, é possível observar que o comportamento na concentração de sacarose da saída do líquido é diferente, para os dois modelos, sendo mais rápida para o modelo do evaporador Robert.

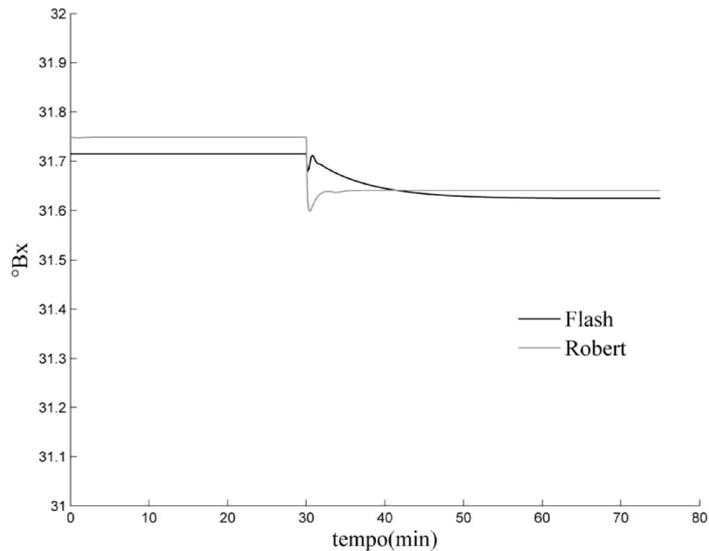


Figura 4-11 - Concentração de sacarose no líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau no fluxo molar da entrada, para um sistema de um evaporador.

4.2.1.3. Degrâu de -10 K na temperatura da entrada

Para o caso do degrâu negativo na temperatura de entrada, o calor injetado foi um degrâu positivo (Figura 4-12).

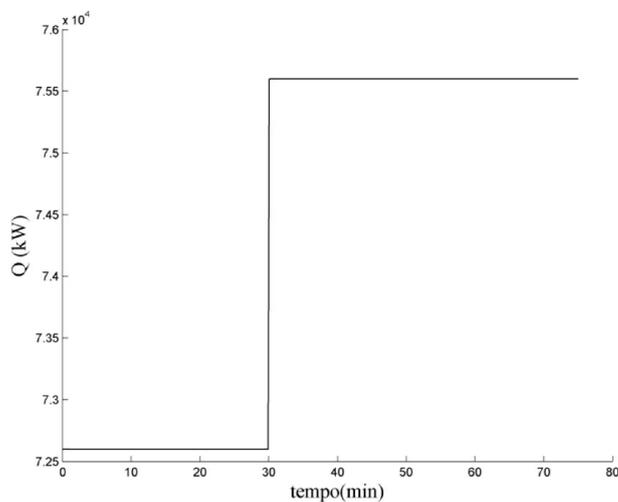


Figura 4-12 - Calor injetado no evaporador *flash* para um degrâu na temperatura de entrada

No caso do degrâu onde a temperatura de entrada diminui acontecem dois efeitos contrários na transferência de calor, o coeficiente de transferência de calor diminui e a diferença de temperaturas aumenta. Para as condições de simulação, a diferença de temperatura tem uma maior influência no calor e, portanto, o calor transferido aumenta. Para o evaporador Robert, como a transferência de calor é mais lenta que o escoamento, primeiro é percebido uma diminuição da pressão (Figura 4-14)

devido à inserção de fluido mais frio e, posteriormente, com o aumento do calor transferido ocorrem um aumento da pressão e, conseqüentemente, a estabilização da mesma. A taxa de vapor (Figura 4-13), como é esperado, apresenta as mesmas variações que a pressão. Ao reduzir a pressão, a concentração de sacarose (Figura 4-15) diminui drasticamente, mas no novo ponto de EE, as diferenças entre a concentração do novo EE e o de partida são pequenas.

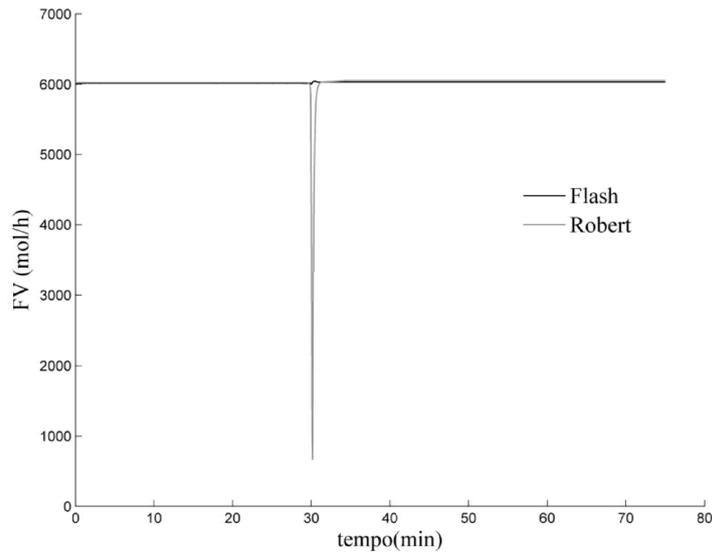


Figura 4-13 - Taxa molar do vapor ao longo do tempo, em resposta a um degrau na temperatura da entrada, para um sistema de um evaporador.

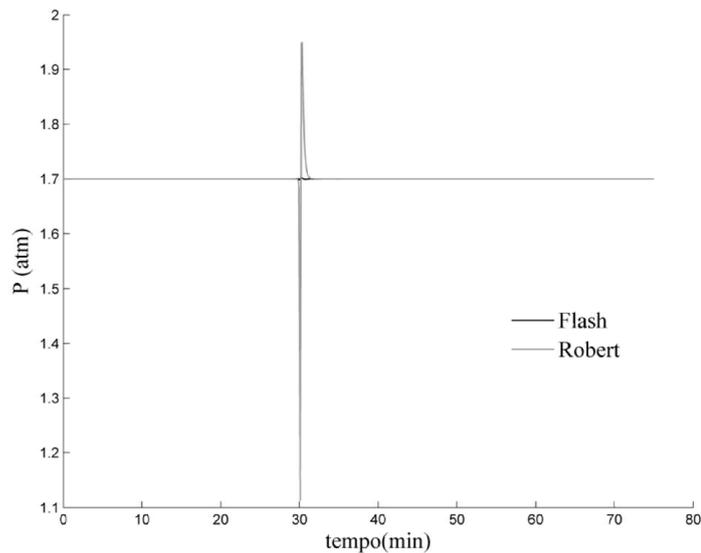


Figura 4-14 - Pressão do evaporador ao longo do tempo, em resposta a um degrau na temperatura da entrada, para um sistema de um evaporador.

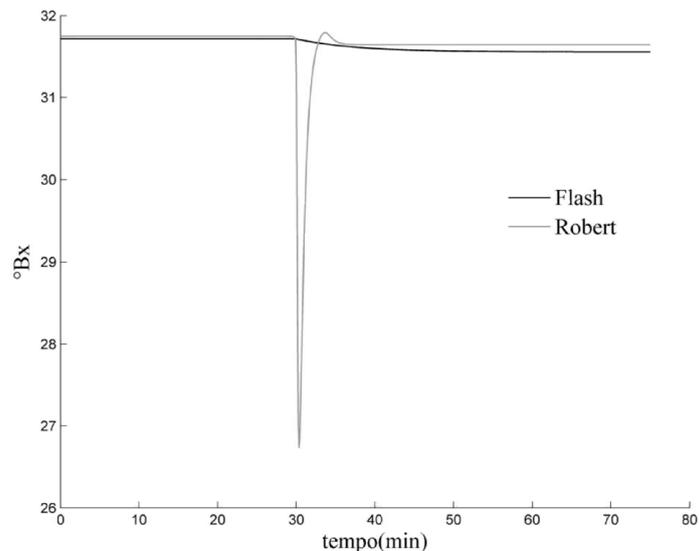


Figura 4-15 - Concentração de sacarose no líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na temperatura da entrada, para um sistema de um evaporador.

O trabalho de Jesus (2004) apresenta as faixas da concentração de saída dos evaporadores. Para o primeiro evaporador a concentração de saída varia entre 28,4 e 30,1 °Bx. Levando isso em conta os valores apresentados pelas Figura 4-7, Figura 4-11, Figura 4-15 estão dois graus Brix acima do limite da faixa.

Pelos resultados apresentados, é observado um comportamento diferente entre os modelos dos evaporadores tipo *flash* e Robert, em que o evaporador tipo *flash* apresenta respostas mais suaves ao aplicar perturbações degraus em diferentes variáveis.

4.2.2. Sistemas de quatro evaporadores diferentes em série com mistura água - sacarose

As alimentações dos evaporadores têm seus fluxos em cocorrente relativos aos fluxos de vapor. O vapor de saída do primeiro evaporador é o fluido aquecedor do segundo evaporador, e assim por diante. O sistema em cocorrente foi o escolhido devido a seu extenso uso na indústria sucroalcooleira.

As condições de entrada no primeiro evaporador são as mesmas que para as simulações de um evaporador, assim como as condições de operação do primeiro evaporador são iguais às de um só evaporador. Os parâmetros geométricos e as condições de operação dos evaporadores são as mesmas que os utilizados no trabalho de Jesus (2004).

Para os demais evaporadores, foram adicionados os parâmetros dos controladores apresentados na Tabela 4-6. Os parâmetros dos controladores foram calculados da mesma forma que para um evaporador. Nas Figura 4-16, Figura 4-17 e Figura 4-18 são apresentadas as curvas das respostas de cada evaporador a um degrau de 0,1 no sinal da válvula de vapor de saída de cada evaporador para obter um modelo linear de primeira ordem para a sintonia dos controladores. Para encontrar cada relação funcional entre o sinal da válvula de vapor e a pressão, foram simulados cada evaporador separadamente, nas condições de alimentação e operação do sistema de quatro evaporadores. Posteriormente, foram corrigidos os valores dos parâmetros no sistema de quatro evaporadores para obter poucas oscilações nas respostas.

Tabela 4-6– Parâmetros para os controladores de cada evaporador

Controlador PID, Evaporador 2		
	Parâmetro	Valor (Unidades)
Pressão	ub	0,40
	Kc	0,52
	τ_i	64,80 s
	<i>Set Point</i>	1,20 atm
Nível	ub	0,65
	Kc	15,00
	τ_i	64,76 s
	<i>Set Point</i>	2,60 m
Controlador PID, Evaporador 3		
Pressão	ub	0,50
	Kc	4,13
	τ_i	77,10 s
	<i>Set Point</i>	0,60 atm
Nível	ub	0,60
	Kc	2,00
	τ_i	5,04 s
	<i>Set Point</i>	2,55 m
Controlador PID, Evaporador 4		
Pressão	ub	0,50
	Kc	3,61
	τ_i	32,73 s
	<i>Set Point</i>	0,20 atm
Nível	ub	0,55
	Kc	2,00
	τ_i	5,04 s
	<i>Set Point</i>	2,55 m

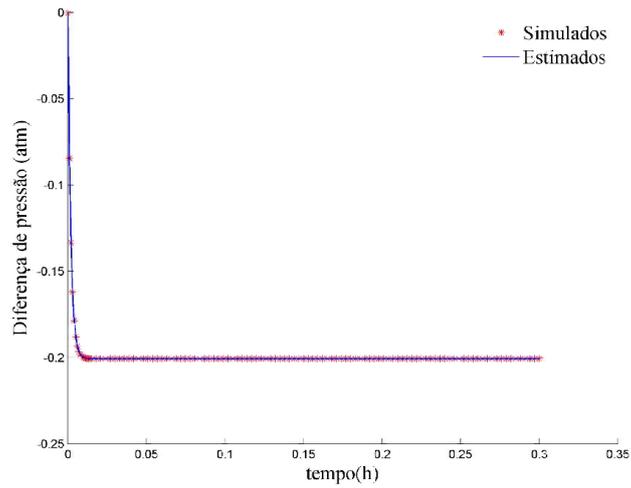


Figura 4-16 - Resposta do evaporador 2 a um degrau no sinal da válvula de vapor. Diferença de pressão relativa ao ponto inicial.

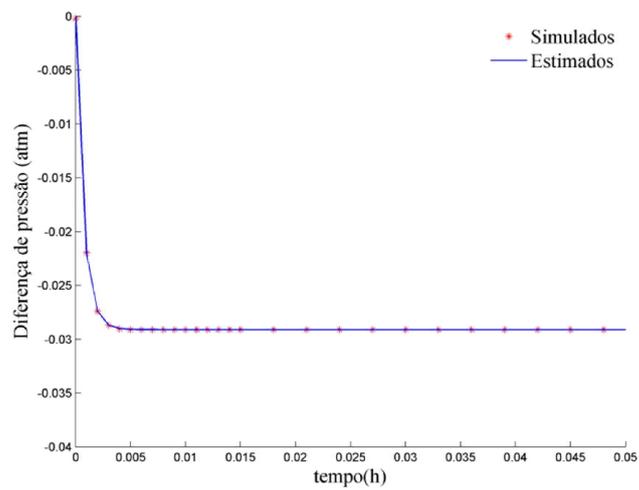


Figura 4-17 - Resposta do evaporador 3 a um degrau no sinal da válvula de vapor. Diferença de pressão relativa ao ponto inicial.

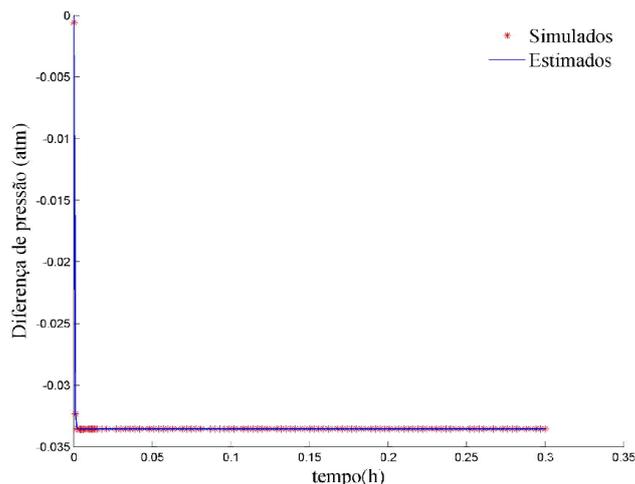


Figura 4-18 - Resposta do evaporador 4 a um degrau no sinal da válvula de vapor. Diferença de pressão relativa ao ponto inicial.

Assim como para o sistema de um evaporador, as simulações foram realizadas no EMSO, utilizando como algoritmo de resolução de sistemas de equações algébricas o *nl solver* e como algoritmo de resolução de sistemas de equações algébrico-diferencial o *dasslc*. As tolerâncias relativas e absolutas para os dois algoritmos foram de 1×10^{-3} e 1×10^{-4} , respectivamente. Os degraus foram aplicados aos 60 minutos.

Cabe ressaltar que a busca do EE de partida foi realizada adicionando os evaporadores um a um, e utilizando a simulação com um evaporador a menos como valores de partida para o cálculo das estimativas iniciais para o *nl solver* do sistema maior. Isto foi necessário, pois não foi possível encontrar o EE partindo com o sistema de quatro evaporadores sem uma simulação prévia para obter os valores das estimativas iniciais.

4.2.2.1. Degrau de 2,5 °Bx na concentração de entrada

A partir das Figura 4-19 até Figura 4-24 é possível observar que o degrau na concentração de sacarose na alimentação é perceptível ao longo de todo o sistema. É possível observar a propagação das perturbações ao longo da sequência de evaporadores.

Como esperado, a taxa de líquido concentrado vai diminuindo ao longo dos evaporadores, devido à evaporação da água, e assim obter uma concentração maior de sacarose na saída do líquido concentrado (Figura 4-24).

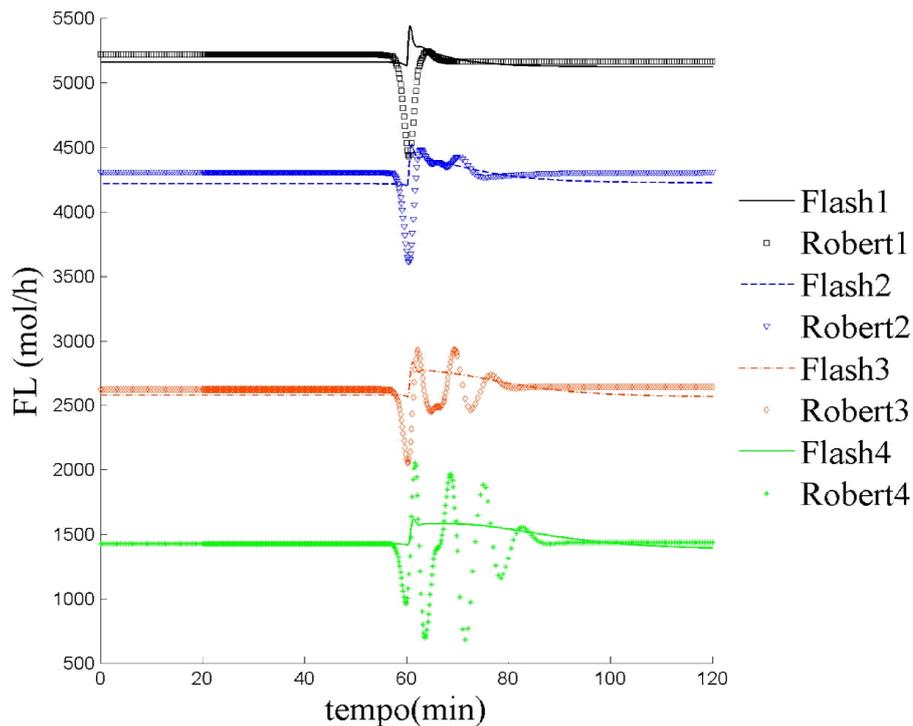


Figura 4-19 - Taxa molar do líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de entrada de sacarose, para um sistema de quatro evaporadores.

Na Figura 4-20 é apresentada a variação da taxa de vapor na saída dos evaporadores ao longo do tempo e, para uma melhor visualização, na Figura 4-21 é representada a variação da taxa molar do líquido concentrado ao longo do tempo, como diferenças em relação ao valor inicial de cada variável. As quantidades de vapor tem uma dependência entre as pressões do evaporador e o anterior, gerando diferentes taxas de transferências de calor aos tubos e diferentes taxas de evaporação pela diferença de pressões no vaso de *flash* dentro dos evaporadores Robert.

É possível observar uma diminuição na quantidade de vapor de saída entre o evaporador 1 e o resto dos evaporadores, pois o vapor de aquecimento é injetado no primeiro evaporador e nos outros o vapor injetado é a saída do efeito anterior, o qual tem uma diferença muito pequena de temperatura o que faz uma transferência de calor mais pobre nos tubos dos últimos evaporadores.

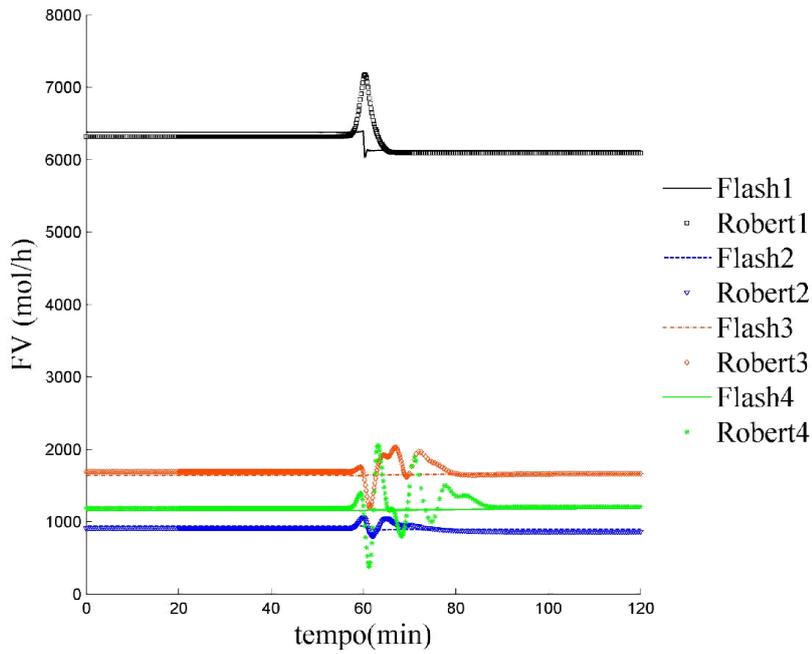


Figura 4-20 - Taxa de vapor de saída ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de entrada de sacarose, para um sistema de quatro evaporadores.

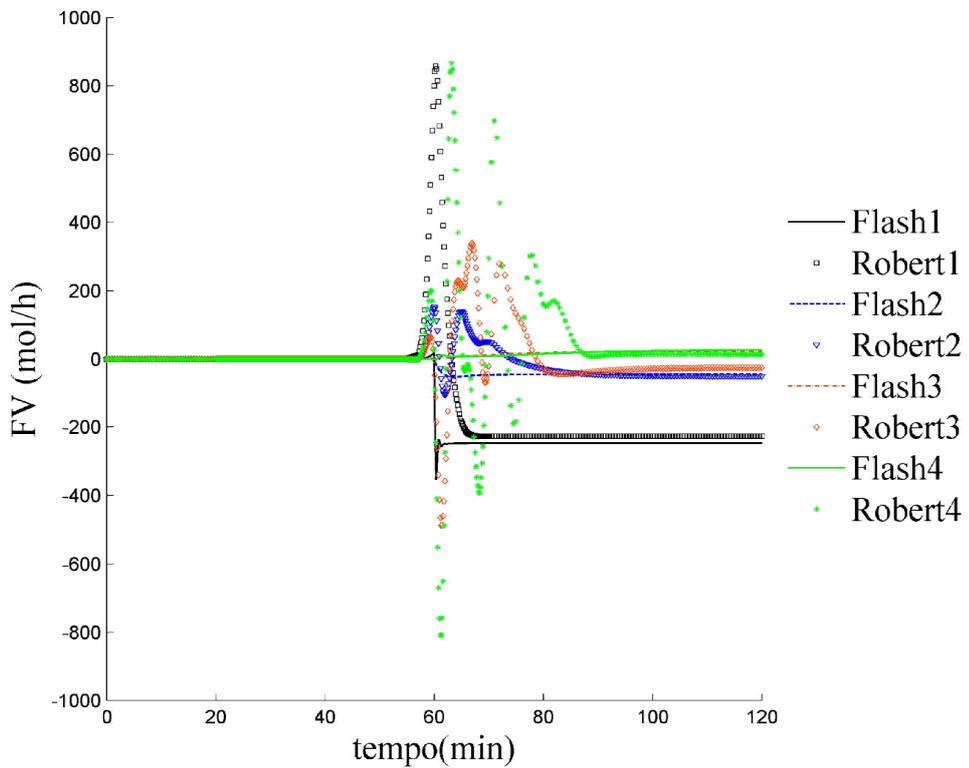


Figura 4-21 – Diferença de taxa de vapor de saída ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de entrada de sacarose, para um sistema de quatro evaporadores.

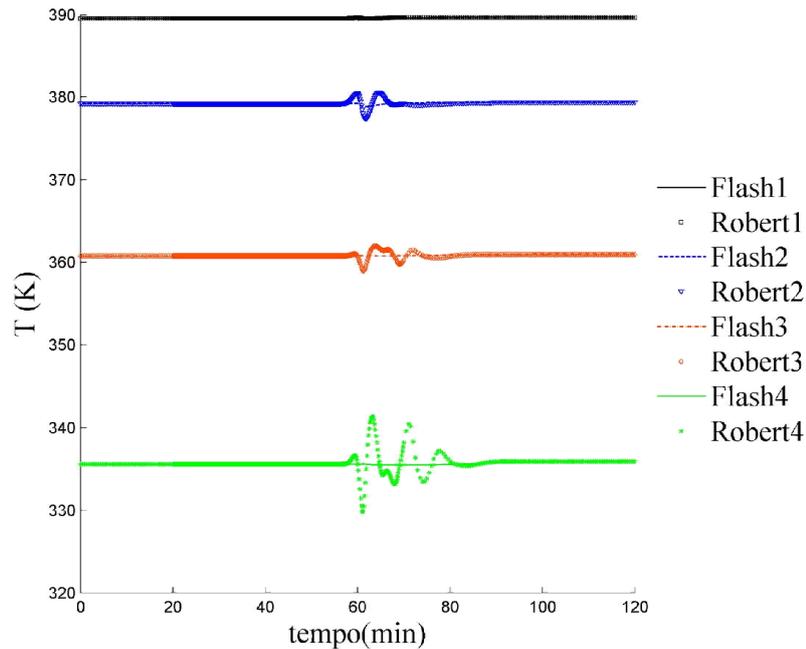


Figura 4-22 - Temperatura de saída ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de entrada de sacarose, para um sistema de quatro evaporadores.

Para uma melhor visualização, na Figura 4-23 é representada a variação da temperatura ao longo do tempo, como diferenças em relação ao valor inicial de cada variável. É possível observar que todas as temperaturas no começo aumentam. No primeiro evaporador, devido ao aumento da concentração de entrada, existe um aumento da concentração no líquido, e conseqüentemente um aumento do ponto de ebulição da solução, e por tanto a temperatura no vapor de saída aumenta. Posteriormente, o controle atua, e a temperatura é estabilizada, a uma temperatura levemente maior, devido ao aumento na concentração na saída líquida, e alcança o valor de equilíbrio do ponto de ebulição.

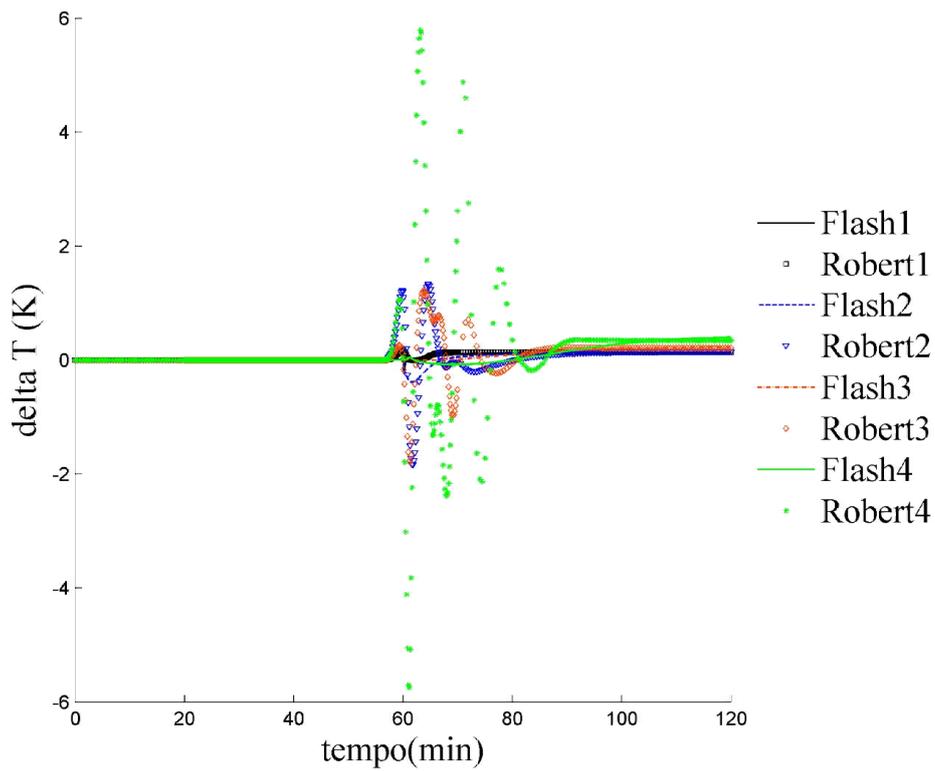


Figura 4-23 – Diferença de temperatura em relação ao valor inicial, na saída ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de entrada de sacarose, para um sistema de quatro evaporadores.

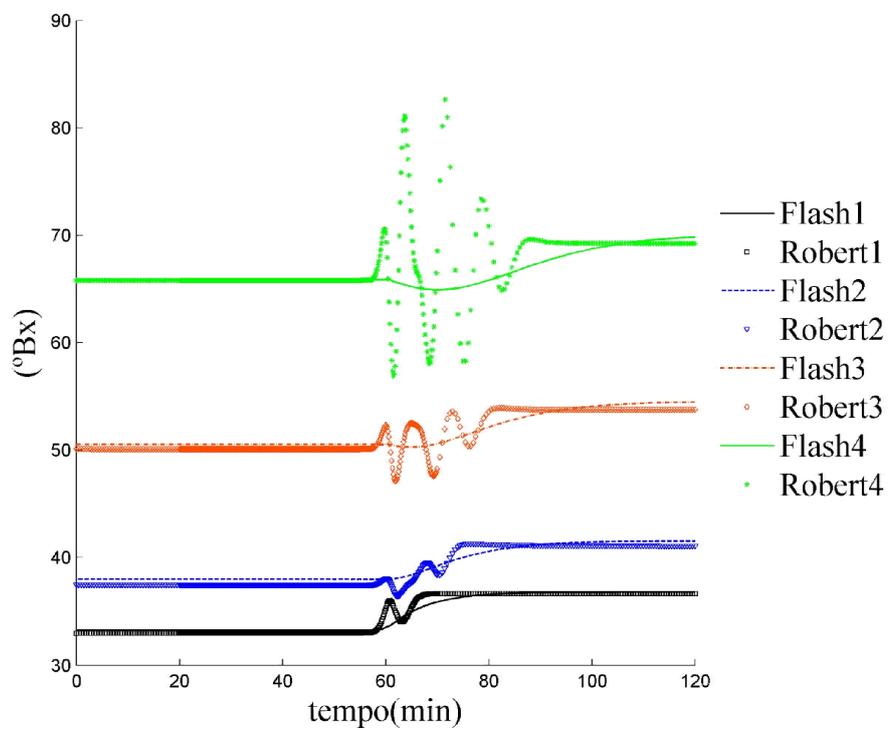


Figura 4-24 - Concentração de sacarose no líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de entrada de sacarose, para um sistema de quatro evaporadores.

O trabalho de Jesus (2004) apresenta as faixas da concentração de saída dos evaporadores. Para o primeiro evaporador a concentração de saída varia entre 28,4 e 30,1 °Bx, entre 36 e 38,2 °Bx para o evaporador 2, entre 46,2 e 52,6 °Bx para o evaporador 3 e, entre 63,3 e 72,4 °Bx para o evaporador 4. As concentrações dos evaporadores no EE inicial foram de 33,2, 38,0, 50,5, 65,8 para cada evaporador respectivamente, onde somente o primeiro evaporador tem uma concentração na saída do líquido de 2 graus Brix acima do limite da faixa.

Para o EE de partida foram calculadas as elevações do ponto de ebulição. Na Tabela 4-7 são apresentados o valor da simulação e a faixa de valores informados no livro de Asadi (2005).

Tabela 4-7 – Elevação de pontos de ebulicao para cada evaporador

	EPE (°C)	Faixas de valores (°C)
E1	0,79	0,71-0,98
E2	0,92	0,86-1,20
E3	1,35	1,40-1,94
E4	2,10	2,52-3,24

A partir da Tabela 4-7 é possível observar que a EPE para os evaporadores 1 e 2 está dentro da faixa apresentada na literatura, mas os evaporadores 3 e 4 apresentaram uma leve diferença com a literatura, sendo o EPE calculada menor que o esperado.

4.2.2.2. Degrau de 10% na vazão volumétrica de entrada

Na Figura 4-25, Figura 4-26 e na Figura 4-27 são apresentadas as variação da taxa do líquido concentrado, a temperatura no evaporador e da concentração de sacarose na fase líquida em resposta a um degrau na vazão de alimentação, respectivamente. A partir das figuras é possível observar que o degrau na vazão volumétrica não causa mudanças percebíveis nas variáveis como temperatura e concentração de sacarose, Na taxa molar a mudança é menor que 10% do valor da variável no estado estacionário inicial.

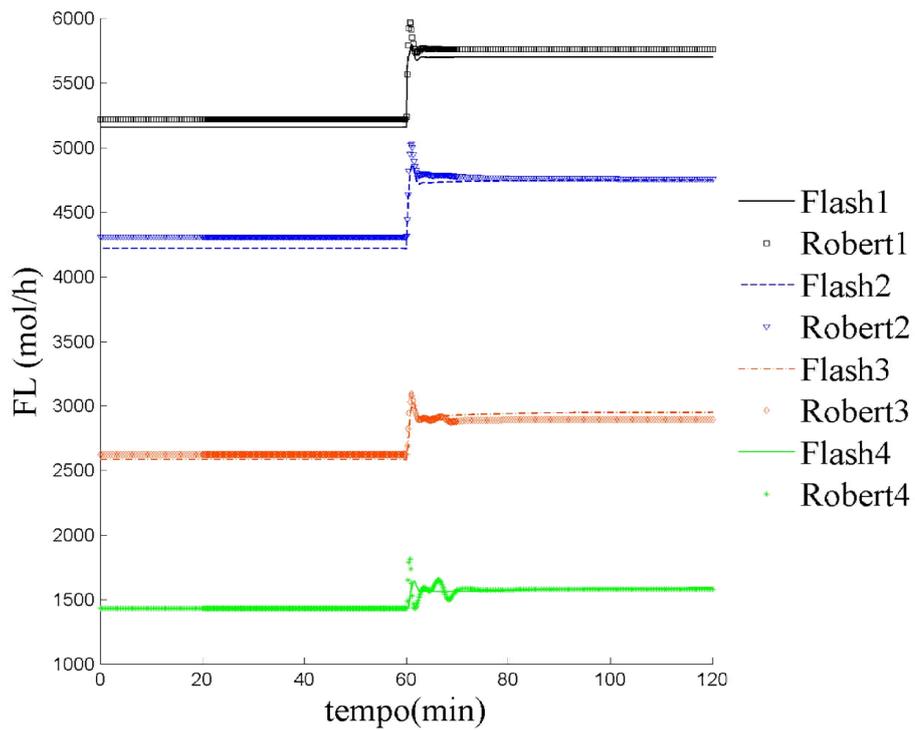


Figura 4-25 - Taxa molar do líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na vazão da alimentação, para um sistema de quatro evaporadores.

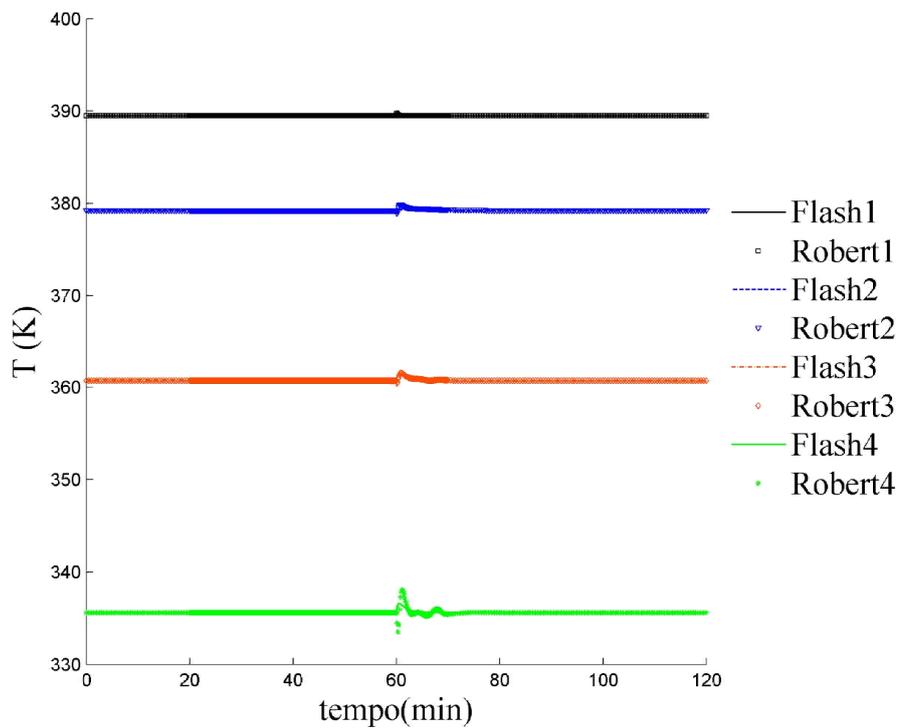


Figura 4-26- Temperatura no evaporador ao longo do tempo, em resposta a um degrau na vazão da alimentação, para um sistema de quatro evaporadores.

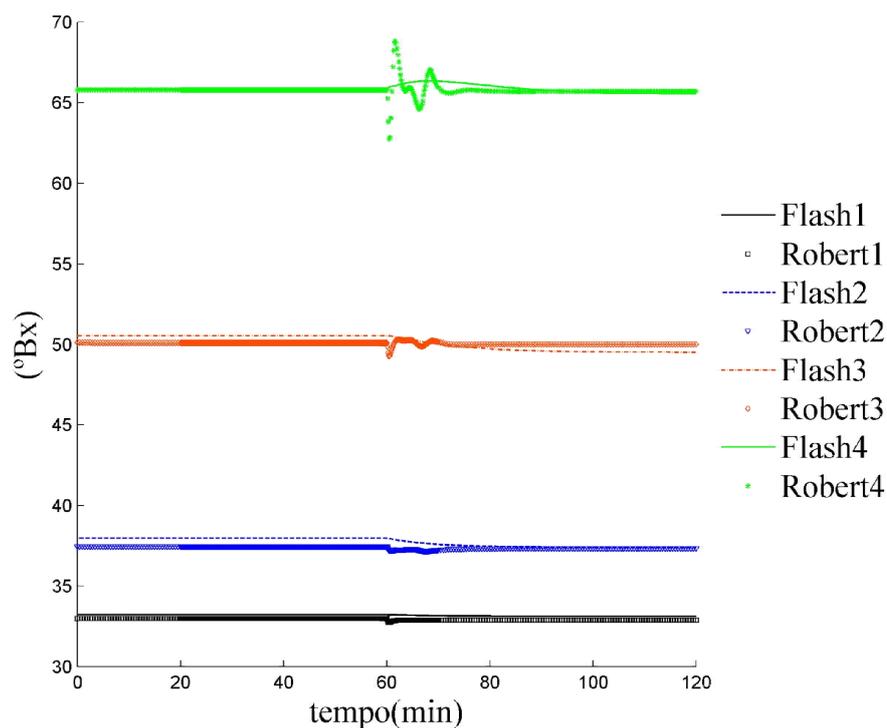


Figura 4-27 - Concentração de sacarose no líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na vazão da alimentação, para um sistema de quatro evaporadores.

4.2.3. Sistemas de um evaporador com mistura complexa

Para a mistura complexa foram utilizados valores dentro das faixas apresentadas no trabalho de Dias (2008). A mistura utilizada tem as concentrações na alimentação apresentada na Tabela 4-8.

Tabela 4-8 - Concentrações em %m/m

Água	81,40
Sacarose	16,60
Dextrose	0,20
Xilose	0,20
Furfural	0,20
Etilenglicol	0,20
Hidróxido de cálcio	0,20

As simulações foram realizadas no EMSO utilizando como algoritmo de resolução sistemas de equações algébricas o *nl solver* e como algoritmo de resolução de sistemas de equações algébrico-diferencial o *dasslc*. As tolerâncias relativas e absolutas para o *nl solver* foram de 1×10^{-4} e 1×10^{-5} , respectivamente, e as tolerâncias relativas e

absolutas para o *dasslc* foram de 1×10^{-3} e 1×10^{-4} , respectivamente. Os degraus foram aplicados aos 30 min.

4.2.3.1. Degrau de 2,5 °Bx na concentração de entrada de sacarose

Assim como para as simulações de um evaporador com mistura binária, foi realizada a injeção de calor no *flash* em um degrau no momento do degrau na alimentação (Figura 4-28).

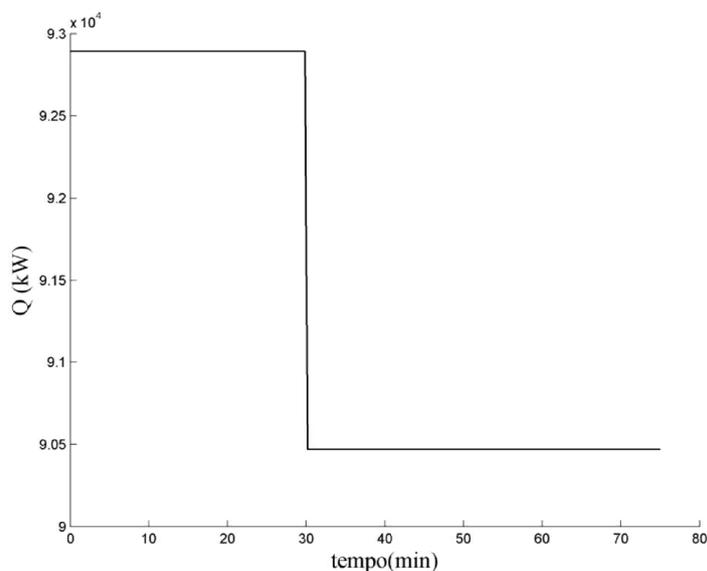


Figura 4-28 - Calor injetado no evaporador *flash* para um degrau na concentração de entrada.

Ao aplicar o degrau de concentração de sacarose, a resposta do sistema com mistura complexa não foi similar à encontrada com a mistura binária. Para o degrau na concentração de sacarose na entrada, o sistema apresenta uma diminuição no calor trocado, como também ocorreu para a mistura binária. A variação da vazão de vapor (Figura 4-29) apresenta a mesma forma que para o sistema com água-sacarose, mas com valores menores devido aos pontos de EE atingidos em cada sistema. O controle da pressão também apresenta ser rápido (Figura 4-30). A pressão do sistema multicomponente apresenta uma variação mais complexa que a apresentada para o sistema de mistura binária.

No entanto, para o sistema com mistura multicomponente, as variações encontradas nas variáveis do sistema (Figura 4-29 até Figura 4-31) foram muito pequenas.

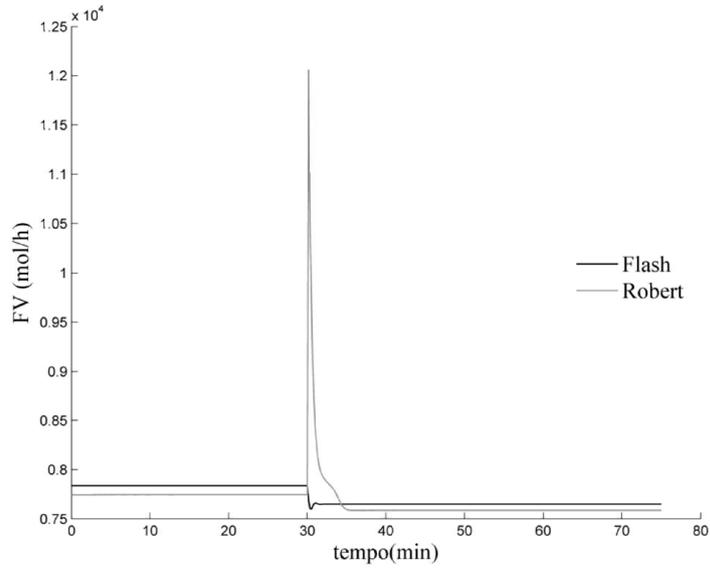


Figura 4-29 - Taxa molar do vapor concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

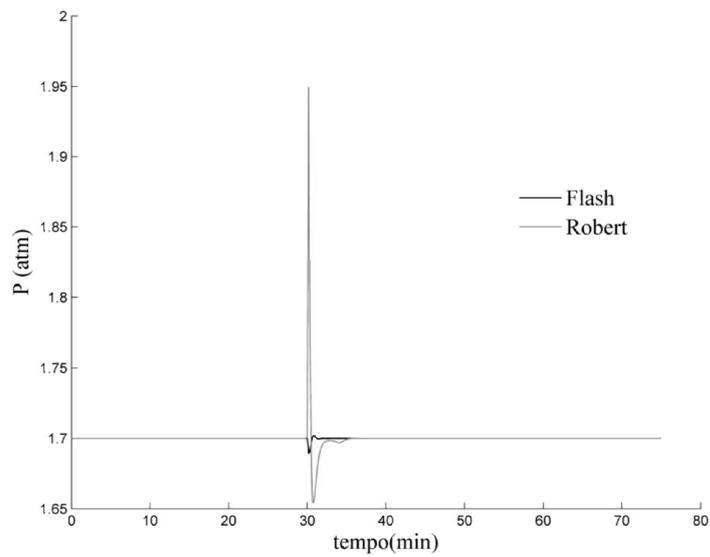


Figura 4-30 - Pressão do evaporador ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

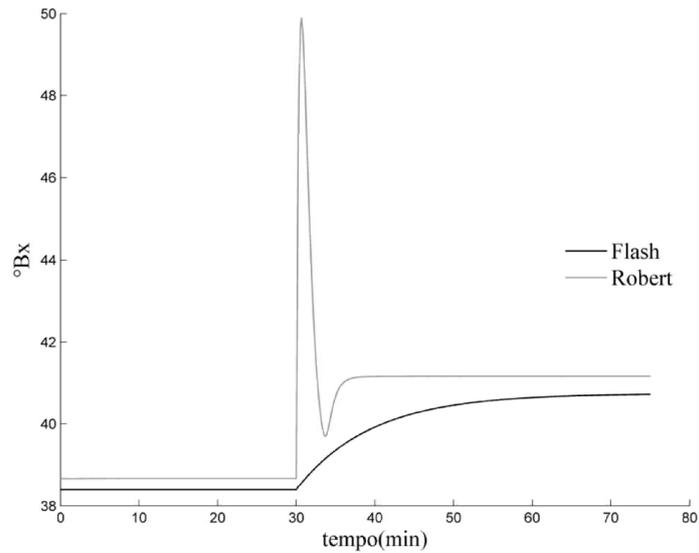


Figura 4-31 - Concentração de sacarose no líquido concentrado ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de sacarose na entrada, para um sistema de um evaporador.

Nas Figura 4-32 e Figura 4-33 são apresentadas as diferenças das frações molares de cada composto na saída do evaporador em relação a sua concentração de entrada, para os dois modelos, o *flash* e o Robert. É possível observar que as maiores variações são para a sacarose, perturbada na entrada, e para a água que é o componente em maior concentração. O furfural é o que tem menor variação de concentrações.

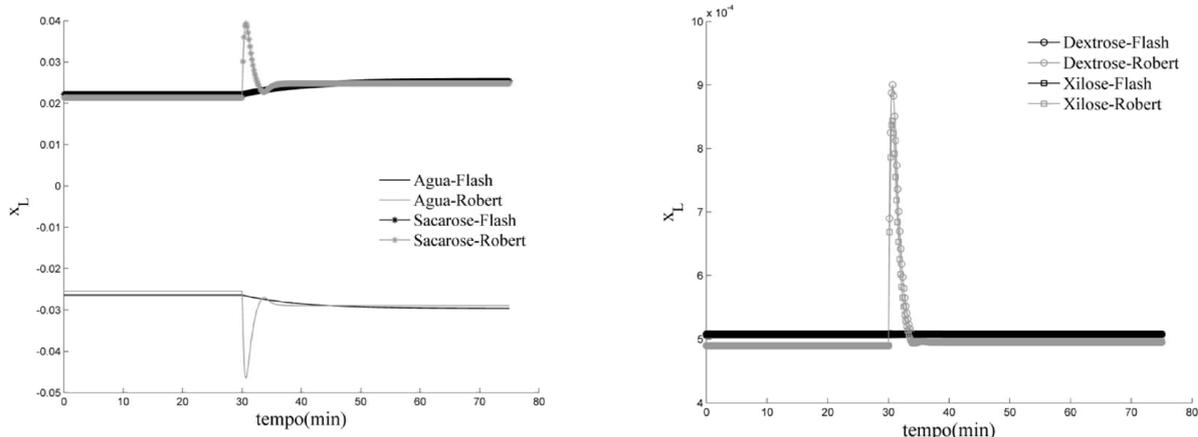


Figura 4-32 – Diferenças das frações molares da água e sacarose (esquerda), dextrose e xilose (direita) na fase líquida ao longo do tempo, em resposta a um degrau na concentração de alimentação.

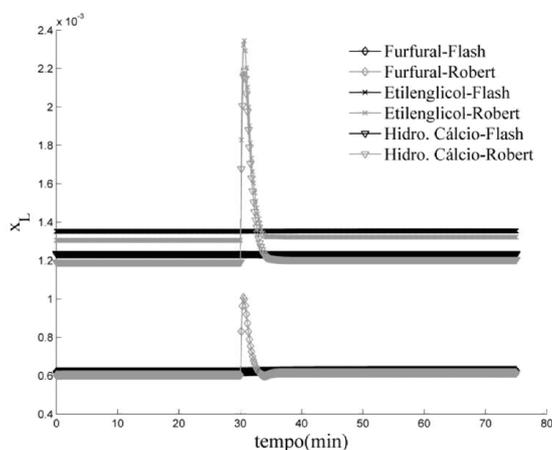


Figura 4-33 – Diferenças da fração molar do furfural, etilenglicol e hidróxido de cálcio ao longo do tempo em resposta a um degrau na concentração de alimentação.

Em Asadi (2005) o EPE para as condições propostas na condição inicial está compreendido entre 0,71 e 0,98 °C. Foi calculado o EPE para o ponto de estado estacionário de partida, o mesmo foi de 1,22 °C, estando acima da bibliografia citada.

Comparando as Figura 4-7 e Figura 4-31, os pontos de EE de partida são diferentes, o que reflete uma grande influência dos outros compostos na concentração da solução. Para a mesma quantidade de concentração total de componentes não considerando a água (aprox. 18 %m/m), e as mesmas condições de operação, para a mistura binária foi alcançado o valor 31,75 °Bx e para a mistura complexa foi cerca de 38,66 °Bx na concentração de saída do líquido.

Para as condições de simulação, as tolerâncias nos *solvers* tiveram que ser maiores. O número de variáveis para a mistura binária foi de 1586 e para mistura

complexa de 2882, e o número de graus de liberdade dinâmicos aumentou de 169 para 569.

4.2.4. Sistemas de um evaporador Robert bifásico para uma mistura água-sacarose

O estado estacionário para as condições de partida na simulação dos modelos mono e bifásico resultaram em valores diferentes (Tabela 4-9). Por exemplo, a concentração de sacarose na saída do líquido concentrado foi de 24,25 °Bx para o Robert bifásico; enquanto que no caso do Robert monofásico é cerca de 31,75° Bx.

Tabela 4-9 – Condições na saída dos evaporadores com modelo mono e bifásico.

Modelo de Robert	Monofásico	Bifásico
Concentração de sacarose no líquido (°Bx)	31,74	24,25
Taxa molar de vapor (kmol/h)	6025	3565
Taxa molar de líquido (kmol/h)	5513	7951
Temperatura (K)	389,45	389,22

As duas modelagens têm a diferença no cálculo da transferência de calor e na consideração da vaporização para o cálculo das propriedades nos balanços de massa e energia. A baixa concentração de sacarose na saída do líquido concentrado reflete uma pobre transferência de calor no evaporador Robert bifásico. Uma das possíveis razões das diferenças entre as simulações é o uso de correlações empíricas aplicadas para escoamento de água pura no caso de ter ebulição dentro dos tubos, devido à falta de correlações aplicadas para o escoamento de soluções contendo água e sacarose. Assim como no escoamento monofásico, as correlações empíricas baseadas em escoamento de água não foram adequadas para os valores encontrados na literatura.

4.3. Otimização

Na busca pela melhor condição de operação dos evaporadores, foi realizada uma análise de sensibilidade do sistema em função da quantidade de vapor de aquecimento introduzida no sistema.

A partir da simulação realizada com o sistema de quatro evaporadores em série, foi possível perceber que a variação de 10% na vazão do vapor de aquecimento não influencia na concentração de sacarose da saída do sistema de forma perceptível. Somente com grandes variações da vazão do vapor a concentração de saída é afetada.

Em primeira instância, foi realizado o estudo da melhor distribuição de inserção de vapor de aquecimento no sistema. A seguir, buscou-se a menor quantidade de vapor que resultasse em uma mesma concentração de sacarose.

4.3.1. Estudo da distribuição de vapor

Para o estudo da distribuição de vapor foram fixadas as condições de operação de cada evaporador, assim como a vazão de vapor inserida no sistema. E, a partir das distintas distribuições de vapor, foram observadas as concentrações de saída do sistema no líquido concentrado.

Foi escolhida uma variação linear para a distribuição de vapor nos efeitos. Na Figura 4-34 são apresentadas as concentrações de sacarose atingidas para o sistema, com as correspondentes distribuições da Tabela 4-10.

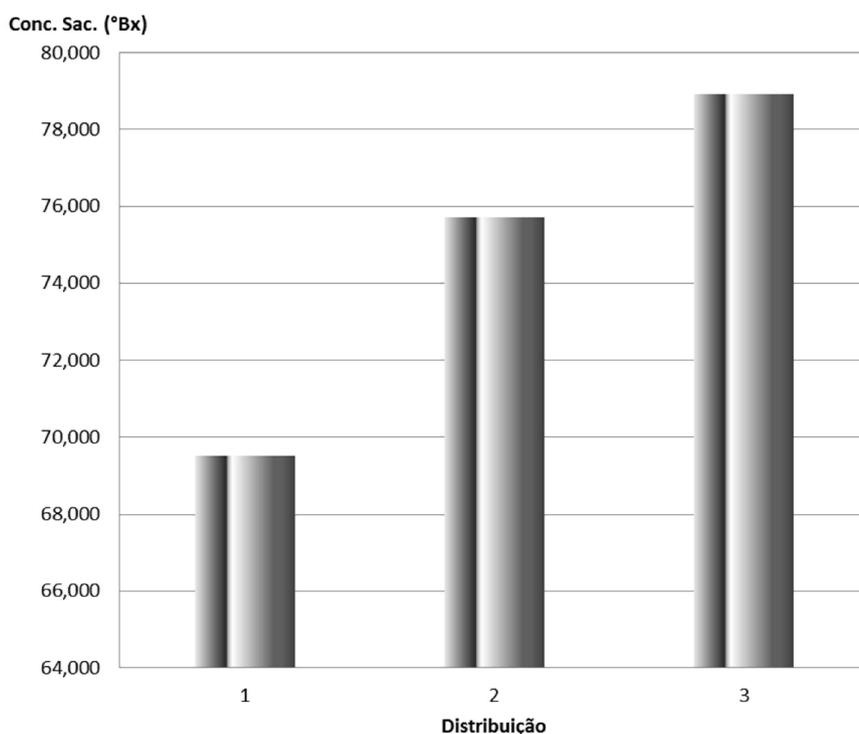


Figura 4-34 – Concentração de sacarose (°Bx) para cada distribuição de vapor.

Tabela 4-10 – Distribuição da entrada de vapor em cada evaporador, conectados em cocorrente

	Fração E1	Fração E2	Fração E3	Fração E4
1	0,900	0,100	0,000	0,000
2	0,750	0,250	0,000	0,000
3	0,675	0,325	0,000	0,000

A partir da Figura 4-34 é observado que conforme aumenta a quantidade de vapor de aquecimento no segundo evaporador, a concentração de saída do sistema aumenta. Para as condições de operação estudadas, foi escolhida a primeira distribuição, já que segundo Jenkins (1966) a concentração de saída do sistema não pode superar 70°Bx, devido que não é possível um bom transporte do líquido em concentrações maiores de 70 °Bx.

4.3.2. **Análise de sensibilidade do fluxo de vapor de aquecimento em função das pressões de operação de cada evaporador**

Na análise de sensibilidade da quantidade de vapor, conforme explicado anteriormente, a concentração final de sacarose foi fixada em 70 °Bx, e variando as pressões em cada efeito de forma linear (decrecente), utilizando a distribuição de vapor de 90% no primeiro evaporador e 10% no segundo evaporador. O objetivo da seguinte análise é encontrar as condições de pressão dos evaporadores que tem o menor consumo de vapor, com limite superior de 1,7 atm e limite inferior de 0,2 atm. Para isso foram avaliadas cinco condições de operação do sistema e observadas as quantidades necessárias de vapor de aquecimento por parte do sistema.

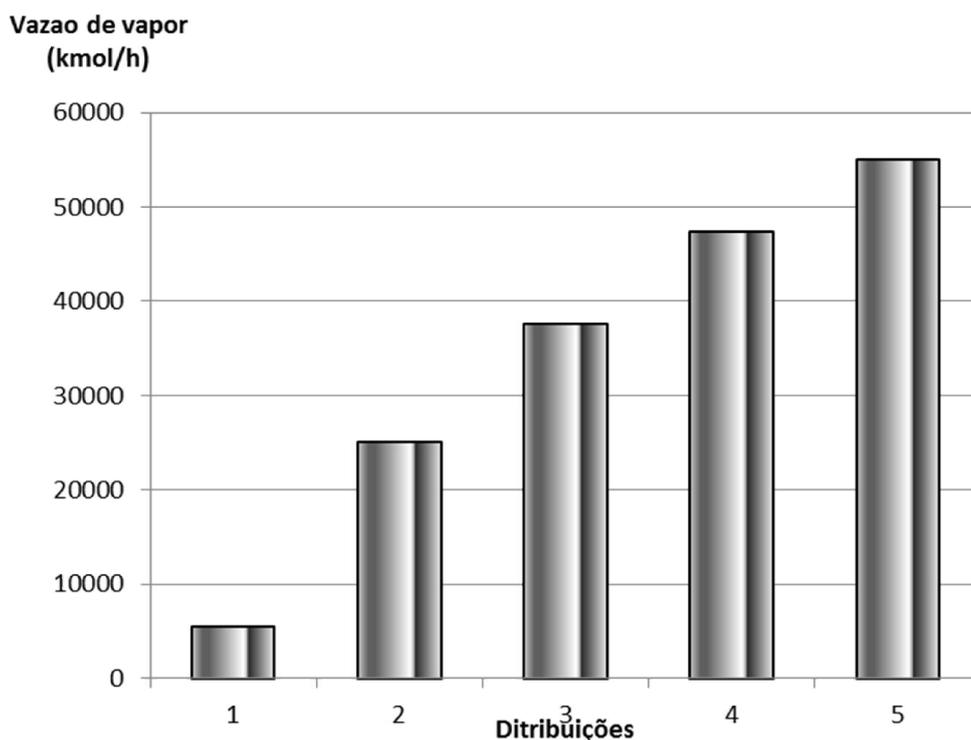


Figura 4-35 Vazão de vapor inserido no sistema em função das distribuições das pressões no sistema

Tabela 4-11 – Pressões para cada evaporador do sistema

	E1	E2	E3	E4	Inclinação da reta
1	1,7	1,2	0,7	0,2	26,57
2	1,7	1,25	0,8	0,35	24,23
3	1,7	1,3	0,9	0,5	21,80
4	1,7	1,35	1	0,65	19,29
5	1,7	1,4	1,1	0,8	16,70

Para cada distribuição linear das pressões foi calculado o coeficiente angular da reta, a partir daqui chamado de inclinação. Com os valores de vazão de vapor e a inclinação de cada distribuição, foram avaliadas duas curvas as quais são apresentadas na Tabela 4-12.

Tabela 4-12 – Curvas estimadas para a taxa de vapor de aquecimento em função da inclinação.

Curvas estimadas	R ²
$y = -299,988113x^2 + 8048,701218x + 4478,505035$	0,997846
$y = -1,448194x^4 + 92,186120x^3 - 2223,607959x^2 + 21198,635288x + 4531,038369$	0,999944

com x o coeficiente angular da distribuição linear das pressões, e y a vazão de vapor introduzido no sistema (kmol/h).

Pela Figura 4-36 e Tabela 4-12 é possível observar que a melhor condição de operação do sistema é a que tem maior inclinação. Essa configuração é a que resulta na

maior relação entre a pressão de trabalho de um evaporador e o seguinte, favorecendo assim a evaporação por diferença de pressão.

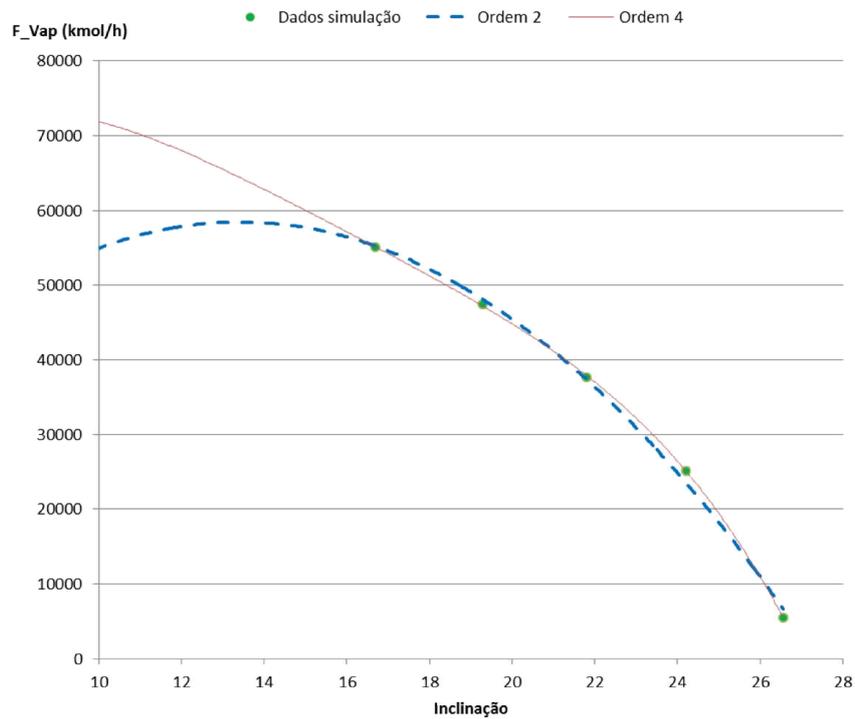


Figura 4-36 - Curvas aproximadas aos dados das simulações com as curvas da Tabela 4-12

Assim o valor da inclinação de 26,57 apresentou um consumo menor de vapor por parte do sistema. A mesma reduziu de 7358 até 5422 kmol/h, o que representa uma redução de 26 % no consumo de vapor por parte do sistema de quatro evaporadores em cocorrente.

5. Conclusões

Neste trabalho, foram construídos modelos matemáticos para os evaporadores tipo *flash* e Robert. Na modelagem do evaporador do tipo Robert levou-se em conta as variações nas propriedades termodinâmicas ao longo dos tubos, consideração que não é apresentada na literatura.

Os resultados obtidos nas simulações mostraram que os modelos dos evaporadores *flash* e Robert monofásico alcançam o mesmo estado estacionário desde que a taxa de calor injetada no evaporador tipo *flash* seja a mesma do valor estacionário obtida no evaporador tipo Robert monofásico. Por outro lado, os comportamentos dinâmicos mostraram-se diferentes entre os dois modelos, com respostas mais lentas e sem tempo morto para o evaporador tipo *flash*. Além disso, os valores de concentração, temperatura e pressão obtidos estão de acordo com os dados obtidos da literatura.

Para a análise de sensibilidade em estado estacionário do sistema de quatro evaporadores conectados de forma cocorrente para uma mistura de água-sacarose, foi encontrada que a melhor configuração de distribuição de vapor é de 90 % e 10 % respectivamente para o evaporador 1 e o evaporador 2. Ademais, utilizando a configuração ótima de vapor, a especificação das pressões dos evaporadores mostrou-se ser aquela que tem um maior coeficiente angular na relação linear entre elas. Dessa forma, para obter 70 °Bx na saída do sistema, o valor da inclinação foi de cerca de 26; com 1,7, 1,2, 0,7 e 0,2 atm como especificações para os evaporadores do um até o quatro. Essa configuração reduziu o consumo de vapor por parte do sistema um 26% comparado com o consumo atual.

Por último, sugere-se para trabalhos futuros, a procura de correlações de transferência de calor para o sistema de água-sacarose no caso de escoamento com mudança de fase. Assim como a implementação de coeficientes de interação para misturas binárias, já que foram encontradas diferenças nas propriedades quando se tem grandes concentrações de sacarose, como por exemplo, na elevação de ponto de ebulição.

6. Referências bibliográficas

ALMEIDA, 2009, *Modelagem, simulação e controle de um sistema de evaporação múltiplo efeito de licor negro*. Trabalho de Conclusão de Curso, FATEB.

ASADI, M., 2007, *Beet-sugar handbook*, John Wiley & Sons, Inc., USA.

BEJAN, A., 2013, *Convection heat transfer*. John Wiley & Sons, Inc., USA.

BONOMI, A., da CUNHA, M.P., SCANDIFFIO, M.I.G., 2009, Programa biorrefinaria virtual de cana-de-açúcar. CTBE.

Coordinación BNDES y CGEE, 2008, *Bioetanol de caña de azúcar: energía para el desarrollo sostenible*. 1ra ed., Rio de Janeiro, BNDES.

CADET C., TOURÉ, Y., GILLES, G., CHABRIAT, J.P., 1999, “Knowledge modeling and nonlinear predictive control of evaporators in cane sugar production plants”, *Journal of Food Engineering*, v. 40, pp. 59-70.

CAVALETT, O., 2012, “Environmental and economic assessment of sugarcane first generation biorefineries in Brazil”, *Clean Technology Environmental Policy*, v. 14, pp 399–410.

CHERUBUNI, F., 2010, “The biorefinery concept: Using biomass instead of oil for producing energy and chemicals”, *Energy Conversion and Management*, v. 51, pp. 1412–1421.

DEMIRBAS, M.F., 2009, “Biorefineries for biofuel upgrading: A critical review”, *Applied Energy*, v. 86, pp. 151–161.

Dias, M.O. S, 2008, *Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço*. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Campinas.

DIAS, M.O. S., CUNHA, M.P., JESUS, C.D.F, SCANDIFFIO, M.I.G., ROSSELL, C.E.V., MACIEL FILHO, R., BONOMI, A., 2010, "Simulation of ethanol production from sugarcane in Brazil: economic study of an autonomous distillery", *ESCAPE 20*.

DIAS, M.O.S., JUNQUEIRA, T.L., CAVALETT, O., PANAVELLO, L.G., CUNHA, M.P.M JESUS, C.D.F., MACIEL Filho, R., BONOMI, A., 2013, “Biorefineries for the production of first and second generation ethanol and electricity from sugarcane”, *Applied Energy*, v. 109, pp. 72–78.

DIPPR, Design Institute for Physical Properties. <http://dippr.byu.edu/>.

FITZPATRICK, M., CHAMPAGNE, P., CUNNINGHAM, M.F., WHITNEY, R.A., 2010, “A biorefinery processing perspective: Treatment of lignocellulosic materials”, *Bioresource Technology*, v. 101, pp. 8915–8922.

FURLAN, F.F., COSTA, C.B.B., FONSECA, G.C., SOARES, R.P., SECCHI, A.R., da CRUZ, A.J.G., GIORDANO, R.C., 2012, “Assessing the production of first and second generation bioethanol from sugarcane through the integration of global optimization and process detailed modeling”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 43, pp. 1– 9.

GALATRO, D., VERRUSCHI, E., GUILLEN, R., 2011, “Model and Optimisation of a Multi-Effect Evaporator of Sugarcane Juice: Energy Consumption and Inversion Losses”, *Chemical Engineering Transactions*, v. 24, pp. 361-366.

GAUTAMI, S., KHANAM, S., 2012, "Selection of optimum configuration for multiple effect evaporator system", *Desalination*, v.288, pp.13-26.

GHIAASIAAN, S.M., 2011, *Convective heat and mass transfer*, Cambridge university press, USA.

HEWITT, G.F., SHIRES, G.L., BOTT, T.R., 1994, *Process Heat Transfer*, CRC Press. USA.

HOLLAND, C.D., LIAPIS, A.I., 1983, *Computer methods for solving dynamic separation problems*. Mc Graw-Hill Book company, USA.

HUGOT, E., 1986, *Handbook of cane sugar engineering*. 3rd ed. Elsevier. USA.

IRAHOLA, J.A., 2012, Optimal Synthesis of Multiple-Effect Evaporation System of Solutions with a high Boiling Point Rise. *Advances in Chemical Engineering*. InTech.

JENKINS, G.H., 1966, *Introduction to cane sugar technology*. Elsevier publishing company. Holanda.

JESUS, C.D.F., 2004, *Validação da simulação dinâmica das etapas de evaporação e cristalização da produção de açúcar com dados obtidos em plantas industriais*. Tese de doutorado, UFSCar.

KAM K.M., SAHA, P., TADÉ, M.O., RANGAIAH, G.P., 2002, "Models of an Industrial Evaporator System for Education and Research in Process Control". *Development in Chemical Engineering and Mineral Processing*, v. 10 (1/2), pp. 105-127.

KAMM, B., KAMM, M., 2007, "Biorefineries – Multi Product Processes", *Advances in Biochemical Engineering/Biotechnology*, v. 105, pp 175–204.

KAYA, D., SARAC, H.I., 2007, "Mathematical modeling of multiple-effect evaporators and energy economy", *Energy*, v. 32, pp. 1536–1542.

KDB, Korean Data Base. <http://www.theric.org/research/kdb/hcprop/cmprch.php>.

MADAENI, S.S., ZERESHKI, S., 2010, "Energy consumption for sugar manufacturing. Part I: Evaporation versus reverse osmosis", *Chemical Engineering and Processing*, v. 47, pp. 1075-1080.

MINTON, P.E., 1986, *Handbook of evaporation technology*, Noyes Publications, USA.

PEHLIVAN, H., ÖZDEMİR, M., 2012, "Experimental and theoretical investigations of falling film evaporation", *Heat Mass Transfer*, v. 48, pp. 1071–1079.

PROST, J.S., GONZALEZ, M.T, URBICAIN, M.J, 2006, "Determination and correlation of heat transfer coefficients in a falling film evaporator", *Journal of Food Engineering*, v.73, pp. 320-326.

RUNYON C.H., RUMSEY, T.R., McCARTHY, K.L., 1991, "Dynamic Simulation of a Nonlinear Model of a Double Effect Evaporator". *Journal of Food Engineering*, v. 14 , pp. 185-201.

SEBASTIAN, P., QUIRANTE, T., HO KON TIAT, V., LEDOUX, Y., 2010, “Multi-objective optimization of the design of two-stage flash evaporators: Part 2. Multi-objective optimization”, *International Journal of Thermal Sciences*, v. 49, pp. 2459-2466.

SEBORG, D.E., EDAG, T.F., MELLICHAMP, D.A., 2003, *Process dynamics and control*. John Wiley and Sons, Inc. USA.

SILVA, P., 2013, *Simulação dinâmica e otimização de evaporadores de múltiplos efeitos em biorrefinarias*, Dissertação de mestrado, UFRJ.

SIMPSON, R., ALMONACID, S., LOPEZ, D., ABAKAROV, A., 2008, “Optimum design and operating conditions of multiple effect evaporators: Tomato paste”, *Journal of Food Engineering*, v. 89, pp. 488–497.

TONELLI S.M., ROMAGNOLI, J.A., PORRAS, J.A., 1990, “Computer Package for Transient Analysis of Industrial Multiple-Effect Evaporators “. *Journal of Food Engineering*, v. 12, pp. 267-281.

WEI, P., CHENG, L.-H., ZHANG, L., XU, X., CHEN, H., GAO, C., 2014, “A review of membrane technology for bioethanol production”. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 30, pp. 388-400.

ZURITA, E.J.C., 2008, *Avaliação da inversão da sacarose em um sistema de evaporação*. Dissertação de mestrado, Escola politécnica da universidade de São Paulo.

7. Apêndice: Curvas das propriedades a inserir no EMSO

As seguintes curvas foram aquelas obtidas como melhor aproximação aos dados obtidos dos compostos. As curvas de partidas foram encontradas nas bases de dados do *Aspen Plus* 8.0, *KDB* e pelo CENPES (Centro de pesquisas e desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello); em cada caso é informado onde foi encontrada cada curva.

Para a visualização das propriedades na faixa de temperatura de trabalho das refinarias, foram extrapoladas, quando for o caso, as curvas para o intervalo 273K até 500K.

Para a eleição da curva de cada propriedade foi realizado o ajuste com as equações possíveis a inserir no VRTherm e foi escolhida a que resultou em um melhor ajuste, a qual é apresentada nas tabelas de cada composto. Para todas as propriedades estudadas foram obtidas pelo menos uma curva similar à curva da base de dado.

Cada propriedade apresenta uma faixa de validação. Nas curvas ajustadas foi realizada uma extrapolação das curvas até as condições de simulação possíveis. No presente trabalho foi escolhido 273 K como a temperatura mínima para as extrapolações.

Componentes dissolvidos:

Tabela 7-1 - Propriedades da sacarose

Nome	Sucrose	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	Referencia
Propriedades físicas constantes	Massa molecular (g/mol)	342,3	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de ebulição normal (K)	751	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de congelamento (K)	459,15	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura de ponto triplo (K)	459,15	Pure11_AspenDataBase
	Pressão de ponto triplo (kPa)	0,0418922	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura crítica (K)	1086	Pure11_AspenDataBase
	Pressão crítica (Pa)	2,69 x10 ⁶	Pure11_AspenDataBase
	Volume crítica (m ³ /mol)	7,61 x10 ⁻⁴	Pure11_AspenDataBase
	Compressão crítica	0,227	Pure11_AspenDataBase
	Fator acêntrico	0,365256	Pure11_AspenDataBase
Propriedades físicas função da temperatura	Pressão de vapor (Pa) 459,15K<T<1086K	$P_V = 1000 e^{\left(-7,19 \ln(T) - \frac{12998}{T} + 69 + 9,11 \cdot 10^{-7} T^2\right)}$	Pure11_AspenDataBase: [Pa] $P_V = e^{(67,812 - 12635/T - 5,9648 \ln(T) + 1,9713E-19 T^6)}$
	Capacidade calorífica do Gás ideal (kJ/kmol-K) 300K<T<1500K	$C_{p_{GI}} = -36,69 + 1,56 T - 6,86 \cdot 10^{-4} T^2 - 3,08 \cdot 10^{-7} T^3 + 3,70 \cdot 10^{-10} T^4 - 9,18 \cdot 10^{-14} T^5$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $C_{p_{GI}} = 198470 + 795920 \left[\frac{1200}{T} / \sinh\left(\frac{1200}{T}\right) \right]^2 + 462900 \left[\frac{556,77}{T} / \cosh\left(\frac{556,77}{T}\right) \right]^2$
	Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K) 459,15K<T<814,15K	$C_{p_L} = 111,72 + 1,172 T - 3,64 \cdot 10^{-4} T^2$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $C_{p_L} = 111720 + 1172 T - 0,364 T^2$
	Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP). 459,15K<T<1000K	$\mu_V = 1,73 \cdot 10^{-5} + 1,63 \cdot 10^{-5} T$	Pure11_AspenDataBase: [Pa.s] $\mu_V = \frac{1,57 \cdot 10^{-08} T^{1,0048}}{\left(1 - \frac{6,3278}{T}\right)}$
Viscosidade do líquido (cP)			

Tabela 7-1 - Propriedades da sacarose (cont.)

Propriedades físicas função da temperatura	Viscosidade do líquido (cP)		
	Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K) 751K<T<1000K	$\kappa_V = -0,0048 + 3,36 \cdot 10^{-5} T + 1,73 \cdot 10^{-8} T$	Pure11_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_V = \frac{1,48 \cdot 10^{-04} T^{0,91957}}{\left(1 + \frac{870,96}{T}\right)}$
	Condutividade térmica do líquido (W/m-K) 459,15K<T<715K	$\kappa_L = 0,1621 - 1,08 \cdot 10^{-4} T$	Pure11_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_L = 0,16209 - 1,0769 \cdot 10^{-4} T$
	Tensão superficial (dyn/cm) 443,15K<T<1086K	$\sigma = 102,8 - 0,0761T - 6,61 \cdot 10^{-5} T^2 + 9,22 \cdot 10^{-8} T^3 + -4,33 \cdot 10^{-11} T^4$	Pure11_AspenDataBase: [N/m] $\sigma = 0,10197(1 - T_r)^{0,93986}$
Propriedades físicas somente em uma temperatura	Densidade do líquido (mol/cm3)	0,00441, a 300 K	Pure11_AspenDataBase: [kmol/cm3] $\rho = \frac{0,36046}{0,2743099 \left(1 + \left(\frac{T}{1086}\right)^{0,200651}\right)}$
	Calor de vaporização (kJ/kmol)	82486, a 460 K	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol] $\Delta H_{vap} = 1,013 \cdot 10^8 (1 - T_r)^{0,37293}$

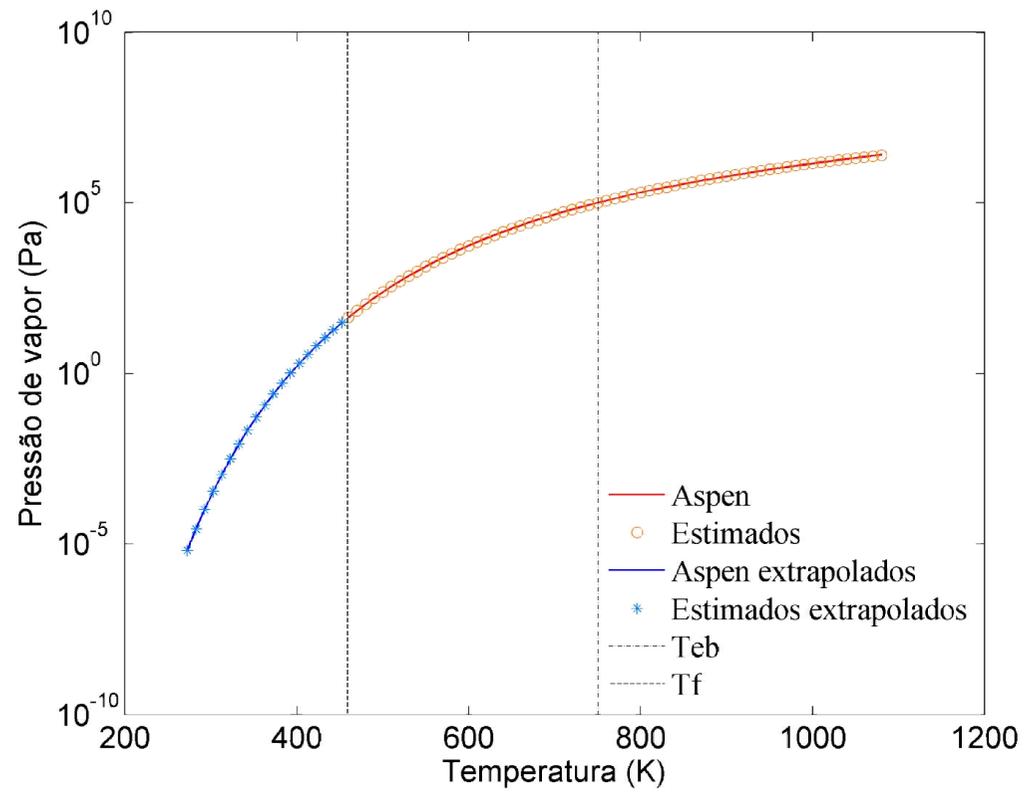


Figura 7-1- Pressão de vapor vs. Temperatura para sacarose (Pressão em escala logarítmica)

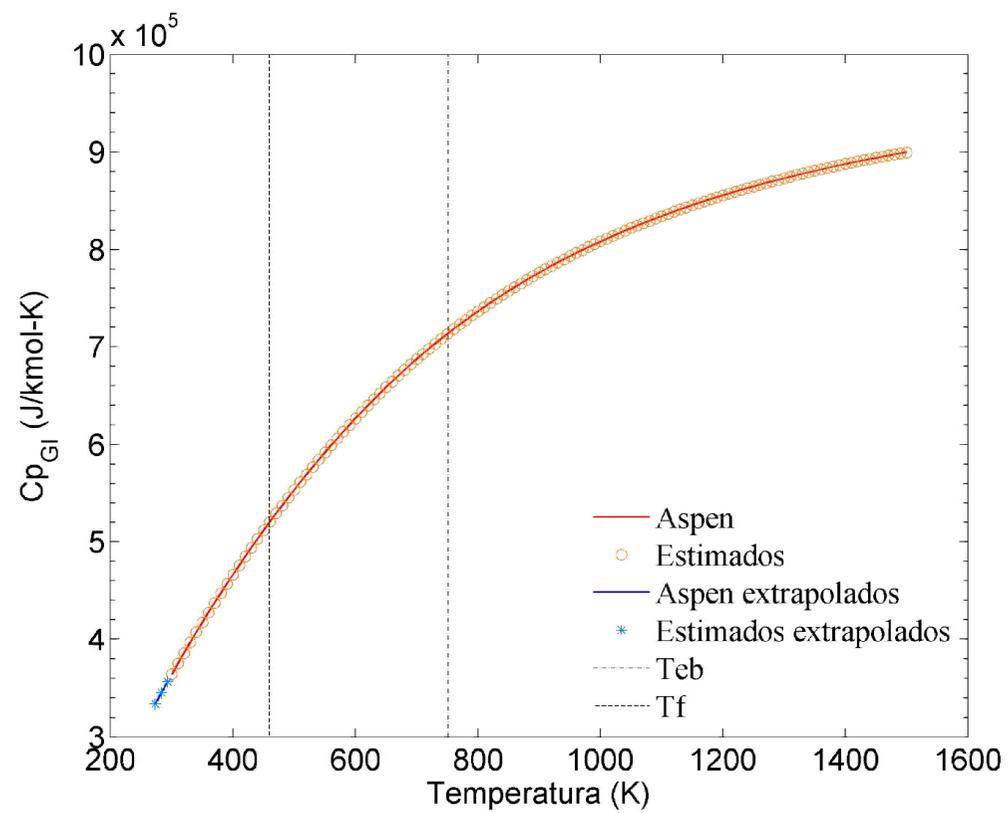


Figura 7-2 - Capacidade calorífica do gás ideal vs. Temperatura para sacarose

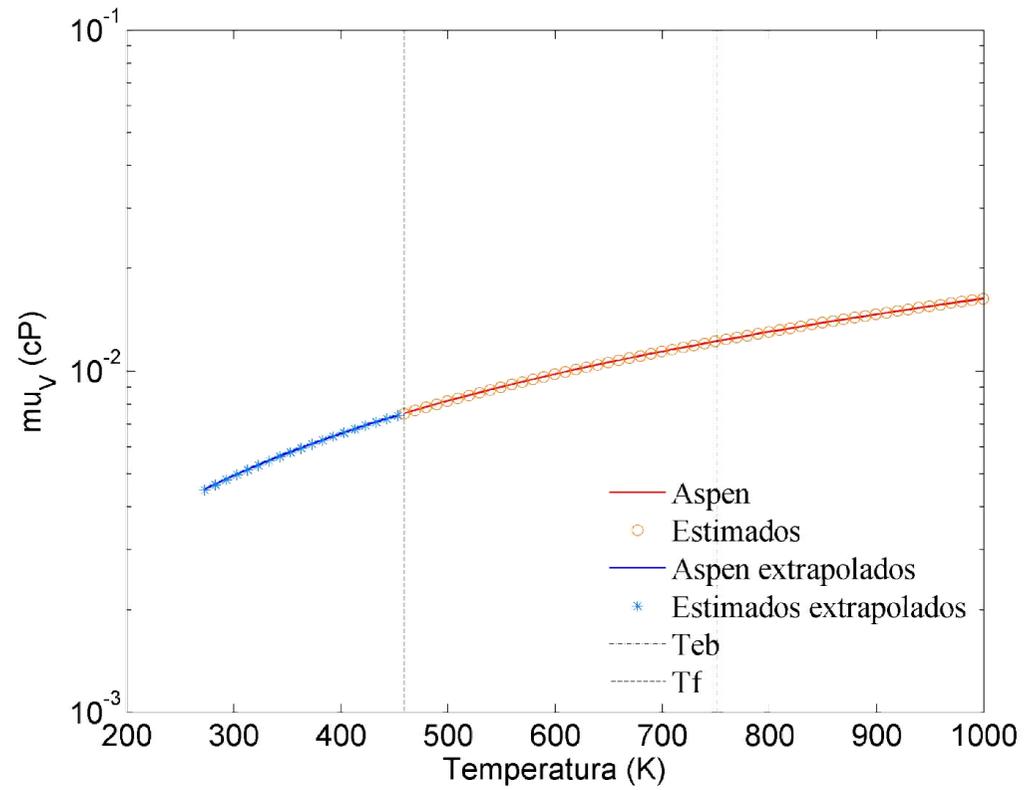


Figura 7-3 - Viscosidade do gás vs. Temperatura para sacarose (Viscosidade em escala logarítmica)

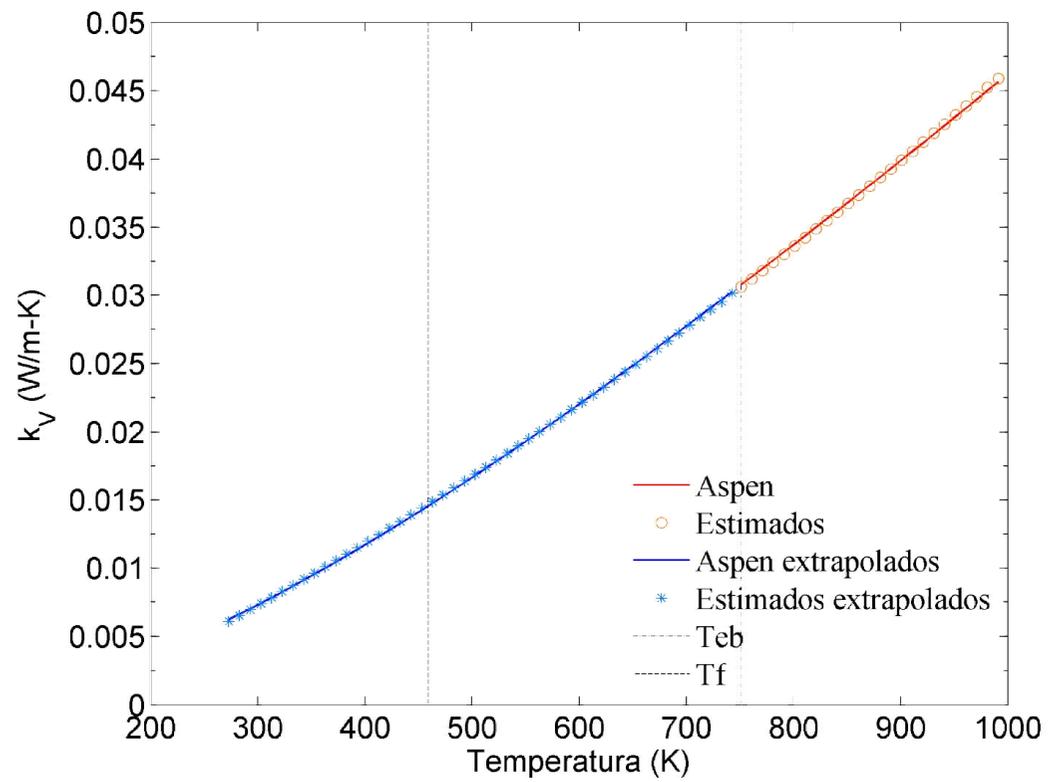


Figura 7-4 - Condutividade do gás vs. Temperatura para sacarose

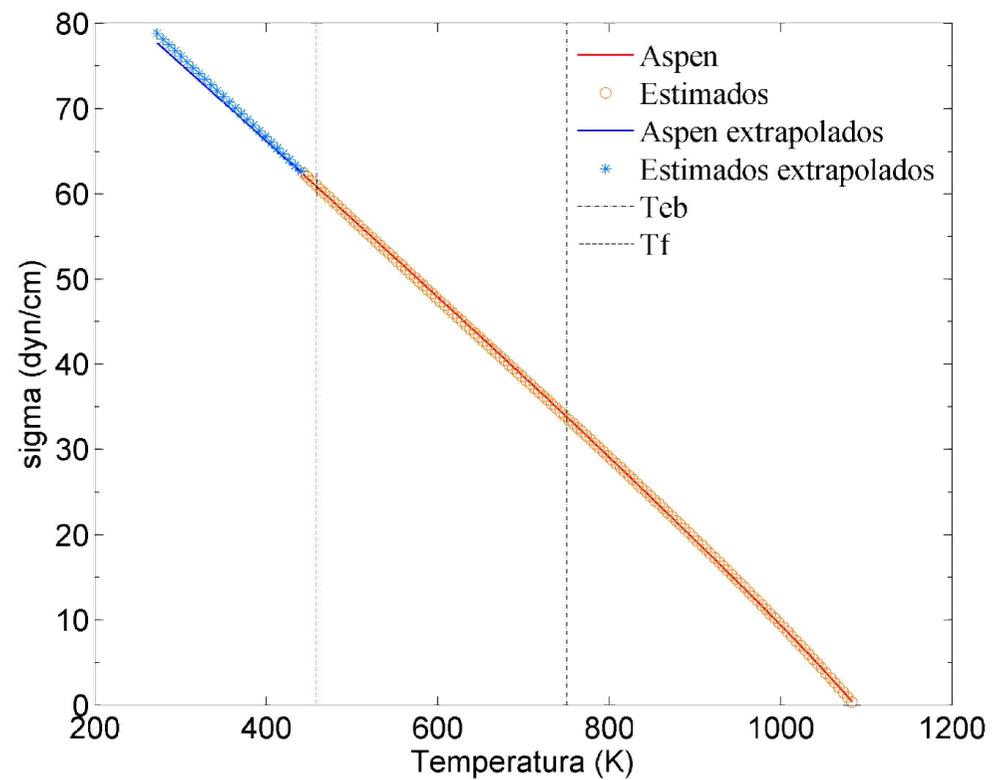


Figura 7-5 - Tensão superficial vs. Temperatura para sacarose

Tabela 7-2 - Propriedades da dextrose

Nome	Dextrose	C ₆ H ₁₂ O ₆	Referencia
Propriedades físicas constantes	Massa molecular (g/mol)	180.16	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de ebulição normal (K)	617	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de congelamento (K)	419.15	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura de ponto triplo (K)	419.15	Pure11_AspenDataBase
	Pressão de ponto triplo (kPa)	4,33x10 ⁻⁴	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura crítica (K)	755	Pure11_AspenDataBase
	Pressão crítica (Pa)	4,82 x10 ⁶	Pure11_AspenDataBase
	Volume crítica (m ³ /mol)	0,000414	Pure11_AspenDataBase
	Compressão crítica	0,318	Pure11_AspenDataBase
	Fator acêntrico	2,3867	Pure11_AspenDataBase
Propriedades físicas função da temperatura	Pressão de vapor (Pa) 459,15K<T<755K	$P_v = 1000 e^{\left(-39,21 \ln(T) - \frac{33498}{T} + 307,31 + 9,36 \cdot 10^{-6} T^2\right)}$	Pure11_AspenDataBase: [Pa] $P_v = e^{\left(261,32 - \frac{31423}{T} - 31,006 \ln(T) + 6,24 \cdot 10^{-18} T^6\right)}$
	Capacidade calorífica do Gás ideal (kJ/kmol-K) 300K<T<1000K	$Cp_G = 236,62 - 1,38T + 0,00756T^2 - 1,36 \cdot 10^{-5} T^3 + 1,088 \cdot 10^{-8} T^4 - 3,279 \cdot 10^{-12} T^5$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_{Gi} = 171750 + 385000 \left[\frac{2009}{T} / \sinh\left(\frac{2009}{T}\right) \right]^2 + 360300 \left[\frac{831,6}{T} / \cosh\left(\frac{831,6}{T}\right) \right]^2$
	Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K) 419,15K<T<617K	$Cp_L = 281,73 - 0,0135T + 9,02 \cdot 10^{-4} T^2$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_L = 281730 - 13,514T + 0,90164T^2$
	Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP), T em R. 419,15K<T<1000K	$\mu_v = 1000 \left(\frac{7,42 \cdot 10^{-8} T^{0,799}}{1 + \frac{244,19}{T} + \frac{1395,63}{T^2}} \right)$	Pure11_AspenDataBase: [Pa.s] $\mu_v = \frac{1,23 \cdot 10^{-07} T^{0,79443}}{\left(1 + \frac{141,6}{T}\right)}$
Viscosidade do líquido (cP), T em R 323,15K<T<418,15K	$\mu_L = 1000 e^{\left(-2458,41 + \frac{250038}{T} + 320,55 \ln T - 0,00572 T^{0,00262}\right)}$	Pure11_AspenDataBase: [Pa.s] $\mu_L = e^{\left(-2267,4 + \frac{138910}{T} + 320,55 \ln T\right)}$	

Tabela 7-2 - Propriedades da dextrose (cont.)

Propriedades físicas função da temperatura	Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K) 617K<T<1000K	$\kappa_V = 0,00694 + 1,48 \cdot 10^{-4} T - 2,65 \cdot 10^{-8} T^2$	Pure11_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_V = \frac{5,05 \cdot 10^{-04} T^{0,80346}}{\left(1 + \frac{786,57}{T}\right)}$
	Condutividade térmica do líquido (W/m-K) 419,15K<T<617K	$\kappa_L = 0,285 - 2,295 \cdot 10^{-4} T$	Pure11_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_L = 0,28498 - 2,9034 \cdot 10^{-4} T$
	Tensão superficial (dyn/cm) 419,15K<T<755K	$\sigma = 29,97 - 0,0275 T - 1,61 \cdot 10^{-5} T^2$	Pure11_AspenDataBase: [N/m] $\sigma = 0,033145(1 - T_r)^{0,93525}$
Propriedades físicas somente em uma temperatura	Densidade do líquido (mol/cm ³)	0,00294, a 300 K	Pure11_AspenDataBase: [kmol/cm ³] $\rho = \frac{0,76784}{0,318 \left(1 + \frac{T_r}{755}\right)^{0,28571}}$
	Calor de vaporização (kJ/kmol)	166735, a 300 K	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol] $\Delta H_{vap} = 1,9911 \cdot 10^8 (1 - T_r)^{0,3504}$

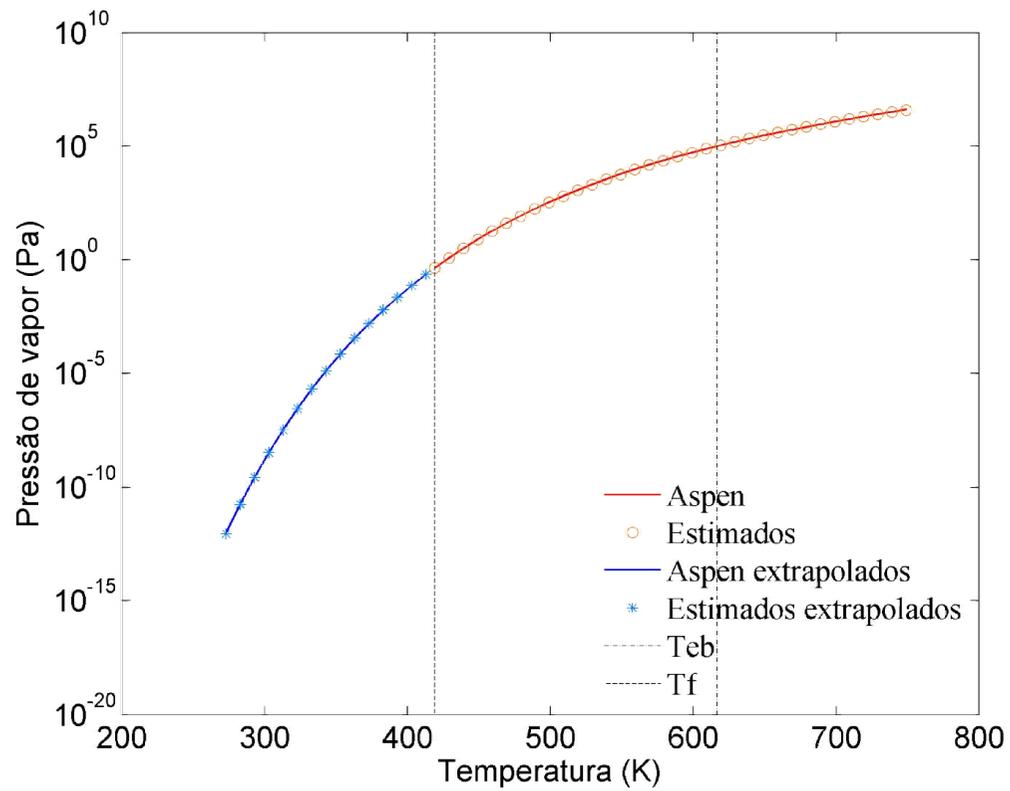


Figura 7-6 - Pressão de vapor vs. Temperatura para dextrose (Pressão em escala logarítmica)

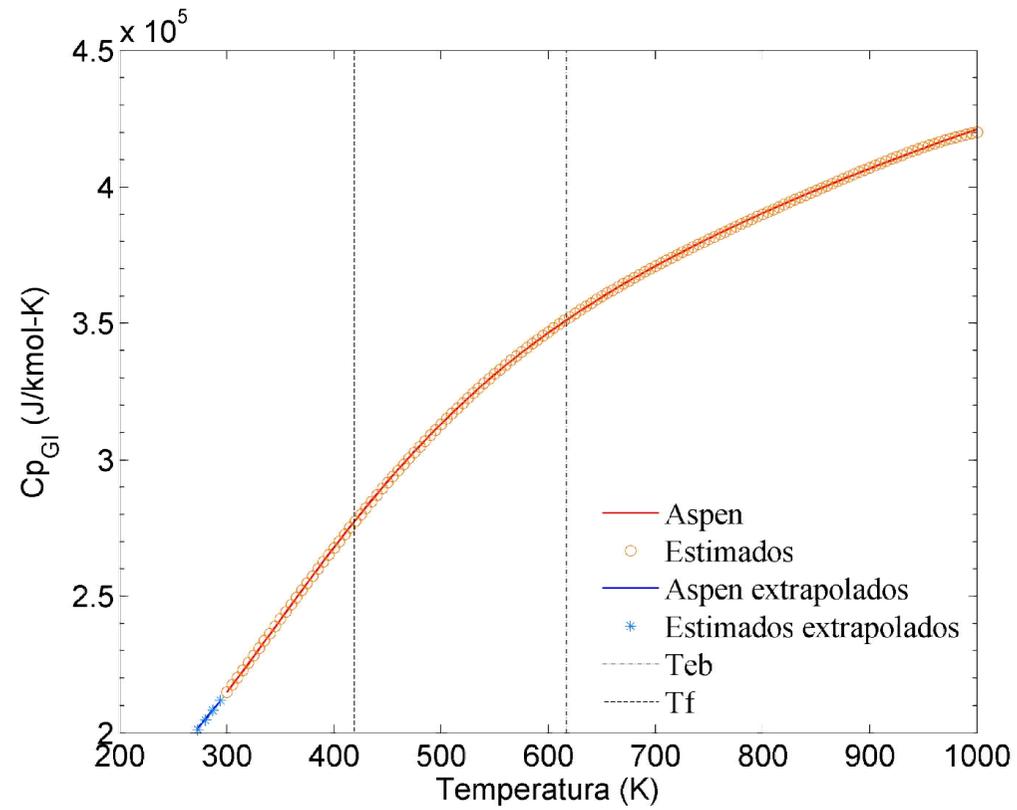


Figura 7-7 - Capacidade calorífica do gás ideal vs. Temperatura para dextrose

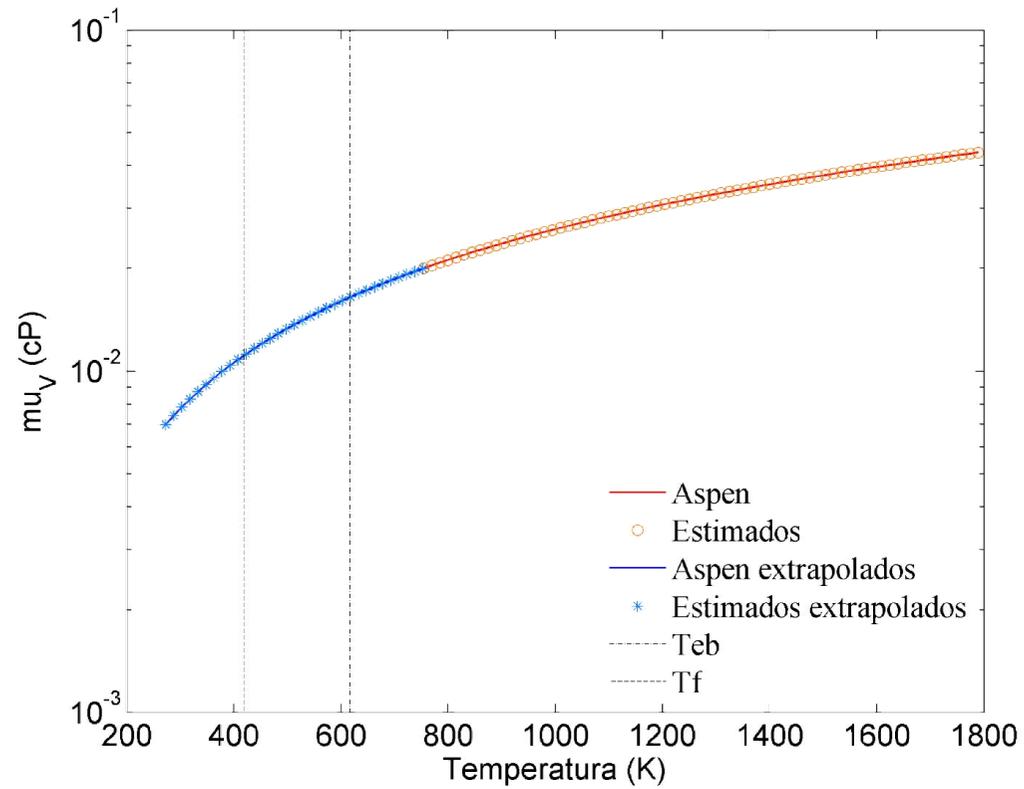


Figura 7-8 - Viscosidade do gás vs. Temperatura para dextrose (Viscosidade em escala logarítmica)

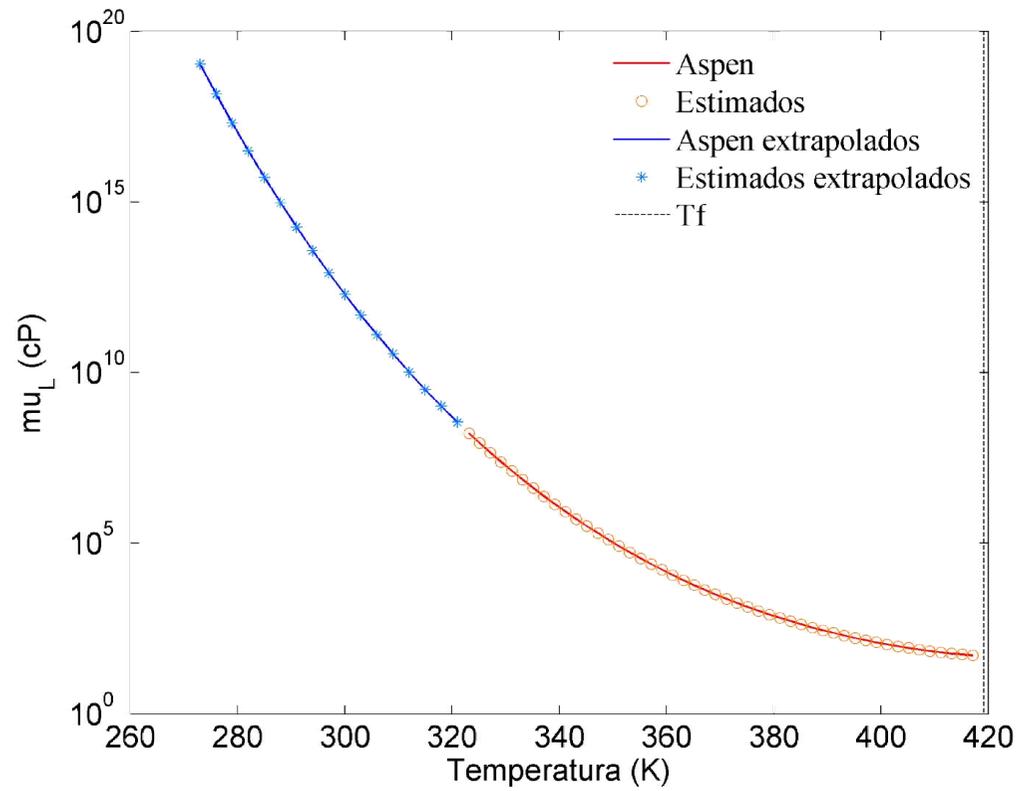


Figura 7-9 - Viscosidade do líquido vs. Temperatura para dextrose (Viscosidade em escala logarítmica)

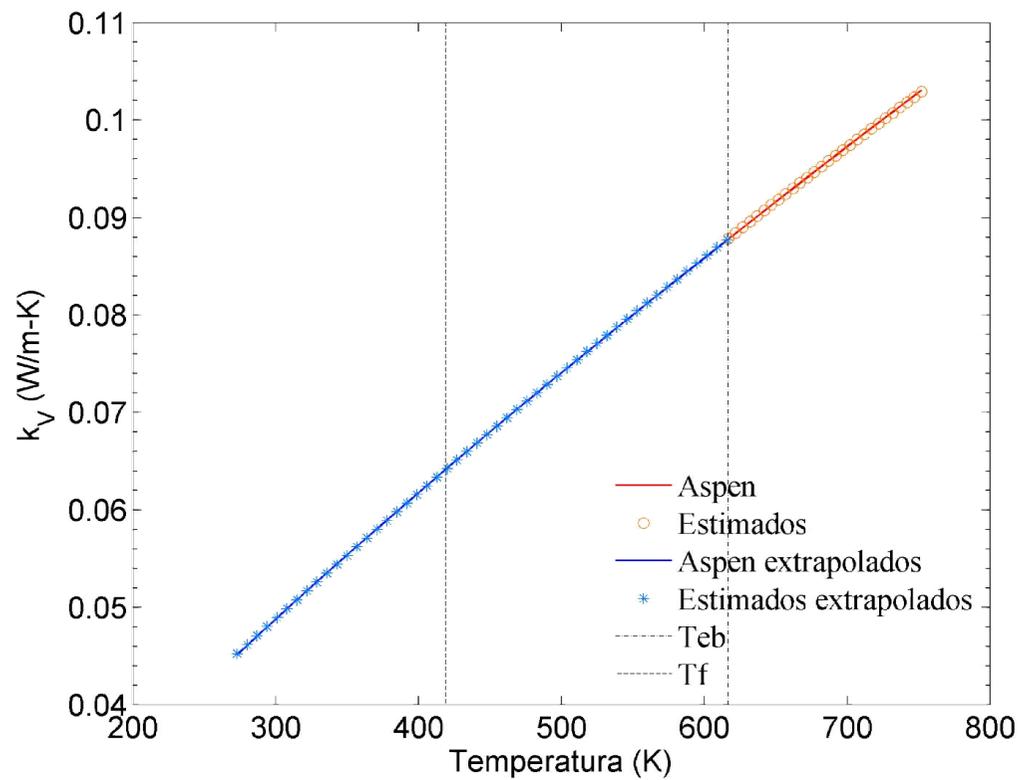


Figura 7-10 - Condutividade do gás vs. Temperatura para dextrose

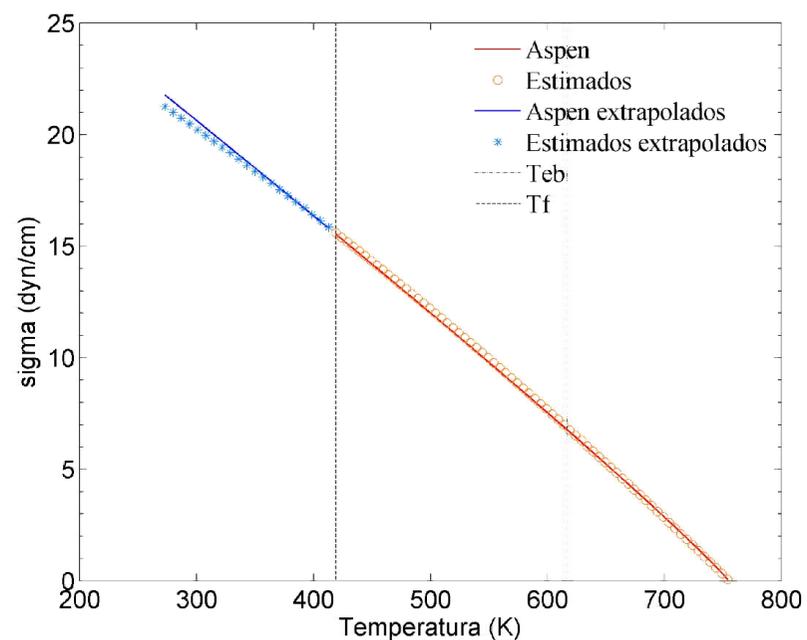


Figura 7-11 - Tensão superficial vs. Temperatura para dextrose

Tabela 7-3 - Propriedades da xilose

Nome	Xylose	$C_5H_{10}O_5$	Referencia
Propriedades físicas constantes	Massa molecular (g/mol)	150,13	Nist-trc_AspenDataBase
	Ponto de ebulição normal (K)	575,293	Nist-trc_AspenDataBase
	Ponto de congelamento (K)		
	Temperatura de ponto triplo (K)		
	Pressão de ponto triplo (kPa)		
	Temperatura crítica (K)	771	Nist-trc_AspenDataBase
	Pressão crítica (Pa)	$3,72 \times 10^6$	Nist-trc_AspenDataBase
	Volume crítica (m^3/mol)	$3,9158 \times 10^{-4}$	Nist-trc_AspenDataBase
	Compressão crítica	0,2273	Nist-trc_AspenDataBase
	Fator acêntrico	1,00052	Nist-trc_AspenDataBase

Tabela 7-3 - Propriedades da xilose (cont.)

Propriedades físicas função da temperatura	Pressão de vapor (Pa) 405,78<T<771K	$P_V = 1000 e^{\left(8,12 \ln(T) + \frac{215,82}{T} - 46,25 + 5,17 \cdot 10^{-18} T^2\right)}$	Nist-trc_AspenDataBase: [Pa] $\ln\left(\frac{P}{15,12952}\right) = -11,6608\left(1 - \frac{T}{771}\right) + 4,83224\left(1 - \frac{T}{771}\right)^{(3/2)} +$ $-10,2931\left(1 - \frac{T}{771}\right)^3 - 5,28259\left(1 - \frac{T}{771}\right)^6$
	Capacidade calorífica do Gás ideal (kJ/kmol-K) 200K<T<1000K	$Cp_G = -86,41 + 1,72T - 0,00356T^2 + 3,03 \cdot 10^{-6} T^3$ $-8,89 \cdot 10^{-10} T^4 - 4,37 \cdot 10^{-14} T^5$	Nist-trc_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_{G1} = 109548 + 319996 \left[\frac{-1150,67}{T} / \sinh\left(\frac{-1150,67}{T}\right) \right]^2 +$ $+ 208777 \left[\frac{520,941}{T} / \cosh\left(\frac{520,941}{T}\right) \right]^2$
	Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K) 250K<T<1000K	$Cp_L = 173$	Wooley R.J., Putsche V. (1996): [J/kmol-K] $Cp_L = 172857$
	Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP). 580K<T<1150K	$\mu_V = -8,34 \cdot 10^{-4} + 2,28 \cdot 10^{-5} T - 1,80 \cdot 10^{-9} T^2$ $-4,80 \cdot 10^{-13} T^3$	Nist-trc_AspenDataBase: [Pa.s] $\mu_V = -8,34 \cdot 10^{-7} + 2,28 \cdot 10^{-8} T - 1,80 \cdot 10^{-12} T^2$ $-4,80 \cdot 10^{-16} T^3$
	Viscosidade do líquido (cP), T em R 637K<T<934,65K	$\mu_L = 1000 e^{\left(-93,998 + \frac{22602}{T} + 9,5788 \ln T\right)}$	Dados CENPES: [Pa.s] $\mu_L = e^{\left(-88,36808 + \frac{1255,6}{T} + 9,57882 \ln T\right)}$
	Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K) 580K<T<1150K	$\kappa_V = -7,67 \cdot 10^{-3} + 3,94 \cdot 10^{-5} T + 1,56 \cdot 10^{-9} T^2$ $+ 2,60 \cdot 10^{-13} T^3$	Nist-trc_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_V = -7,67 \cdot 10^{-3} + 3,94 \cdot 10^{-5} T + 1,56 \cdot 10^{-9} T^2$ $+ 2,60 \cdot 10^{-13} T^3$
	Condutividade térmica do líquido (W/m-K) 410<T<690K	$\kappa_L = 0,315 - 3,64 \cdot 10^{-4} T + 1,77 \cdot 10^{-7} T^2$	Nist-trc_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_L = 0,315 - 3,64 \cdot 10^{-4} T + 1,77 \cdot 10^{-7} T^2$
	Tensão superficial (dyn/cm) 426<T<934,56K	$\sigma = 5043,71 - 0,10627 T$	Dados CENPES: [N/m] $\sigma = 0,0306766 \left(\frac{T_C - T}{T_C - T_B} \right)^{1,2222}$
Propriedades físicas somente em uma temperatura	Densidade do líquido (mol/cm ³)	0,010158, a 293 K	wolframalpha
	Calor de vaporização (kJ/kmol)	4267, a 300 K	Wooley R.J., Putsche V. (1996) : [J/kmol] $\Delta H_{vap} = 4,1868 \cdot 10^6 \left((1 - T / T_c) / (1 - 298 / T_c) \right)^{(0,38)}$

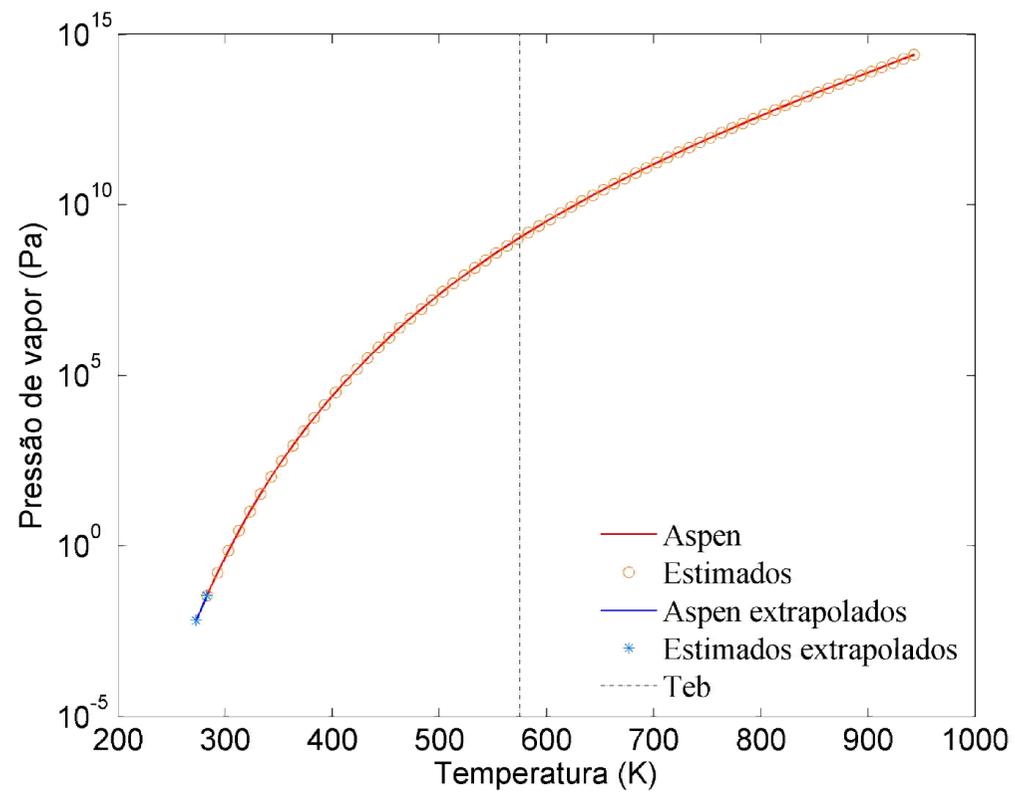


Figura 7-12 - Pressão de vapor vs. Temperatura para xilose (Pressão em escala logarítmica)

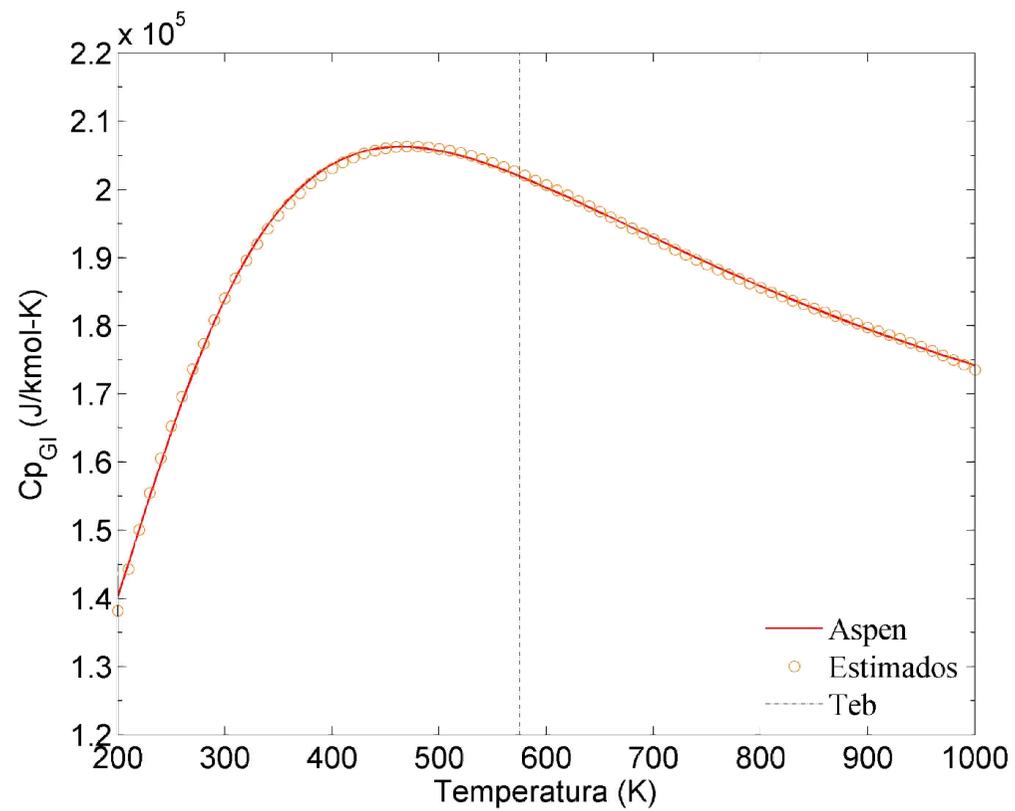


Figura 7-13 - Capacidade calorífica do gás ideal vs. Temperatura para xilose

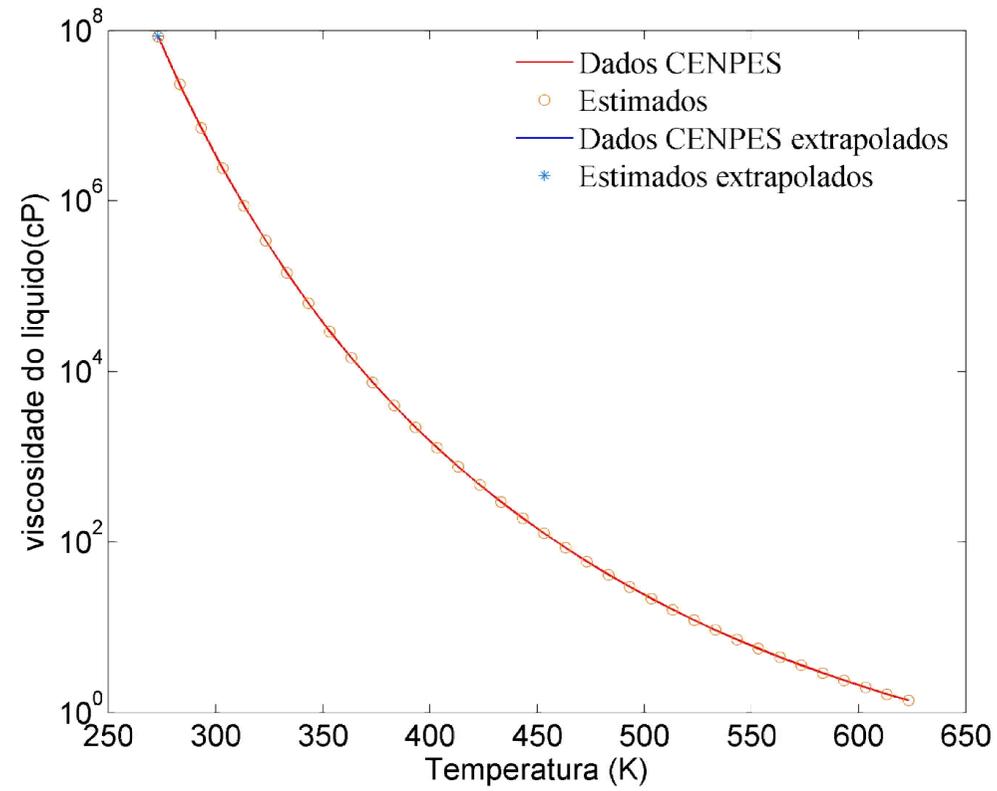


Figura 7-14 - Viscosidade do líquido vs. Temperatura para xilose (Viscosidade em escala logarítmica)

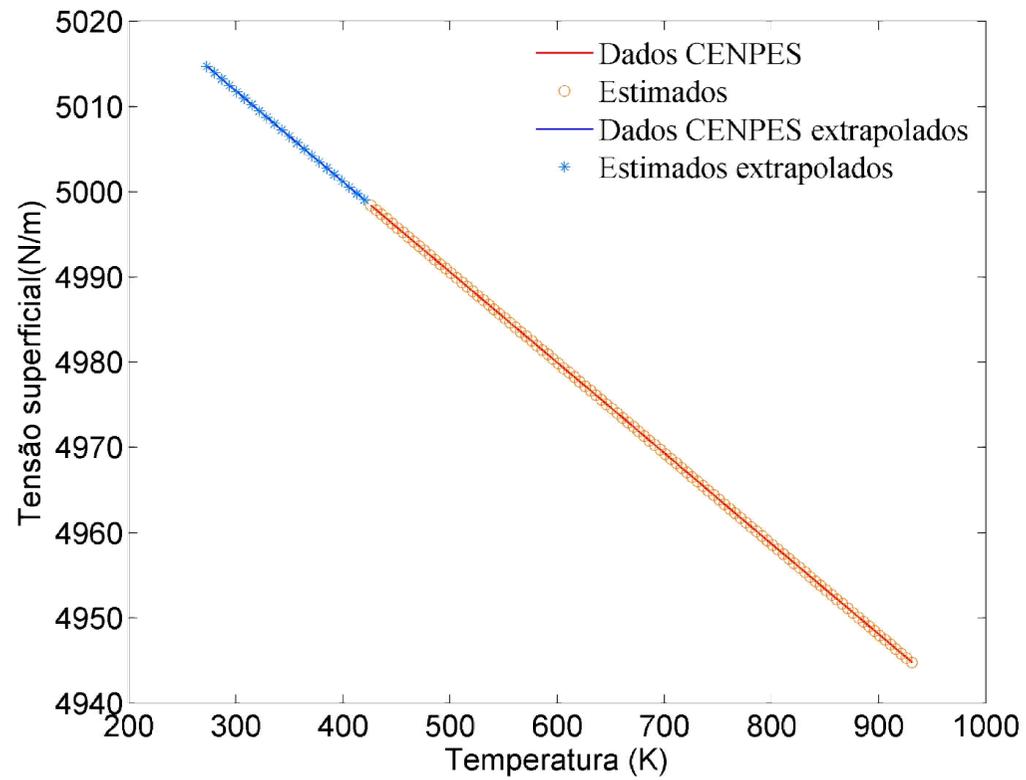


Figura 7-15 - Tensão superficial vs. Temperatura para xilose

Tabela 7-4 - Propriedades do Hidróxido de amônio

Nome	Ammonia Hydroxide	H ₅ NO	Referencia
Propriedades físicas constantes	Massa molecular (g/mol)	35,0458	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de ebulição normal (K)	271	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de congelamento (K)	194,15	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura de ponto triplo (K)	194,15	Pure11_AspenDataBase
	Pressão de ponto triplo (kPa)	0,751458	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura crítica (K)		
	Pressão crítica (Pa)		
	Volume crítica (m ³ /mol)		
	Compressão crítica		
	Fator acêntrico		
Propriedades físicas função da temperatura	Pressão de vapor (Pa) 194,15<T<449,85K	$P_V = 1000 e^{\left(-3,11 \ln(T) - \frac{4058}{T} + 42,99 + 8,37 \cdot 10^{-16} T^2\right)}$	Pure11_AspenDataBase: [Pa] $P_V = e^{\left(49,925 - \frac{4058,1}{T} - 3,1132 T^3 \cdot 1,756 \cdot 10^{-8}\right)}$
	Capacidade calorífica do Gás ideal (kJ/kmol-K) 300K<T<1000K	$Cp_G = 29,16 + 0,0894T + 1,42 \cdot 10^{-5} T^2 - 2,48 \cdot 10^{-8} T^3$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_{G_i} = 45190 + 96960 \left[\frac{1430}{T} / \sinh\left(\frac{1430}{T}\right) \right]^2 + 42620 \left[\frac{635}{T} / \cosh\left(\frac{635}{T}\right) \right]^2$
	Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K) T= 298,15 K	$Cp_L = 154,89$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_L = 154890$
	Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP)		
	Viscosidade do líquido (cP) T em R 273,16K<T<646,15K	$\mu_L = 1000 e^{\left(-280,727 + \frac{17982,31}{T} + 40,6176 \ln T - 0,04039 T^{0,942434}\right)}$	Dados CENPES: [Pa.s] $\mu_L = e^{\left(-245,69 + \frac{9763,5}{T} + 38,379 \ln T - 0,042743 T\right)}$
	Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K)		
	Condutividade térmica do líquido (W/m-K) 273,16K <T< 633,15K	$\kappa_L = -0,432 + 5,7255 \cdot 10^{-3} T - 8,078 \cdot 10^{-6} T^2 + 1,861 \cdot 10^{-9} T^3$	Dados CENPES: [W/m-K] $\kappa_L = -0,432 + 5,7255 \cdot 10^{-3} T - 8,078 \cdot 10^{-6} T^2 + 1,861 \cdot 10^{-9} T^3$
	Tensão superficial (dyn/cm)		

Tabela 7-4 - Propriedades do Hidróxido de amônio (cont.)

Propriedades físicas somente em uma temperatura	Densidade do líquido (mol/cm ³)	0,02374,a 288,15 K	Pure11_AspenDataBase
	Calor de vaporização (kJ/kmol)		

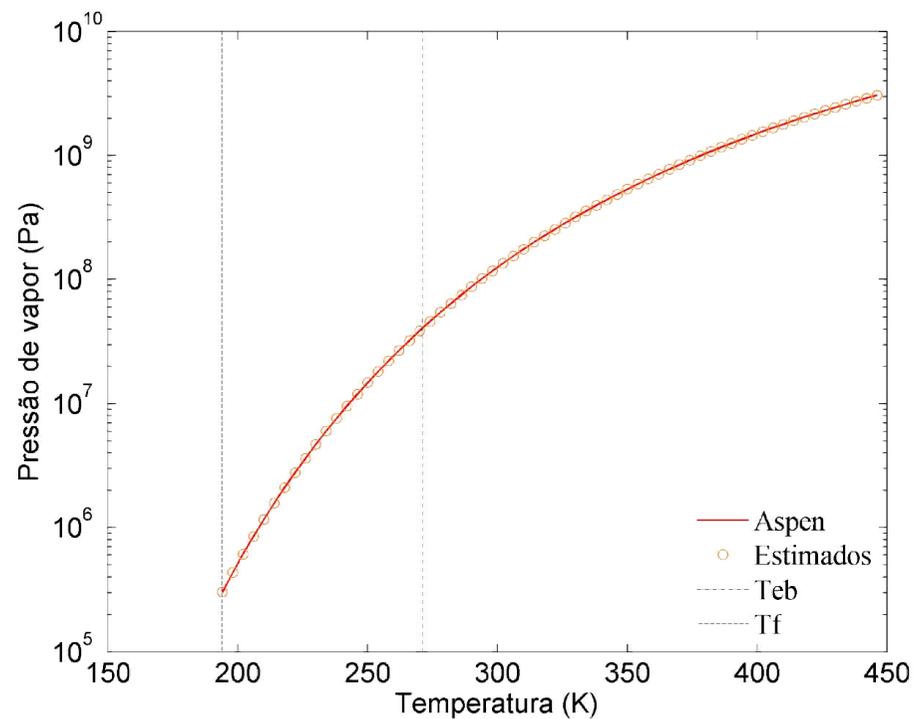


Figura 7-16 - Pressão de vapor vs. Temperatura para hidróxido de amônio (Pressão em escala logarítmica)

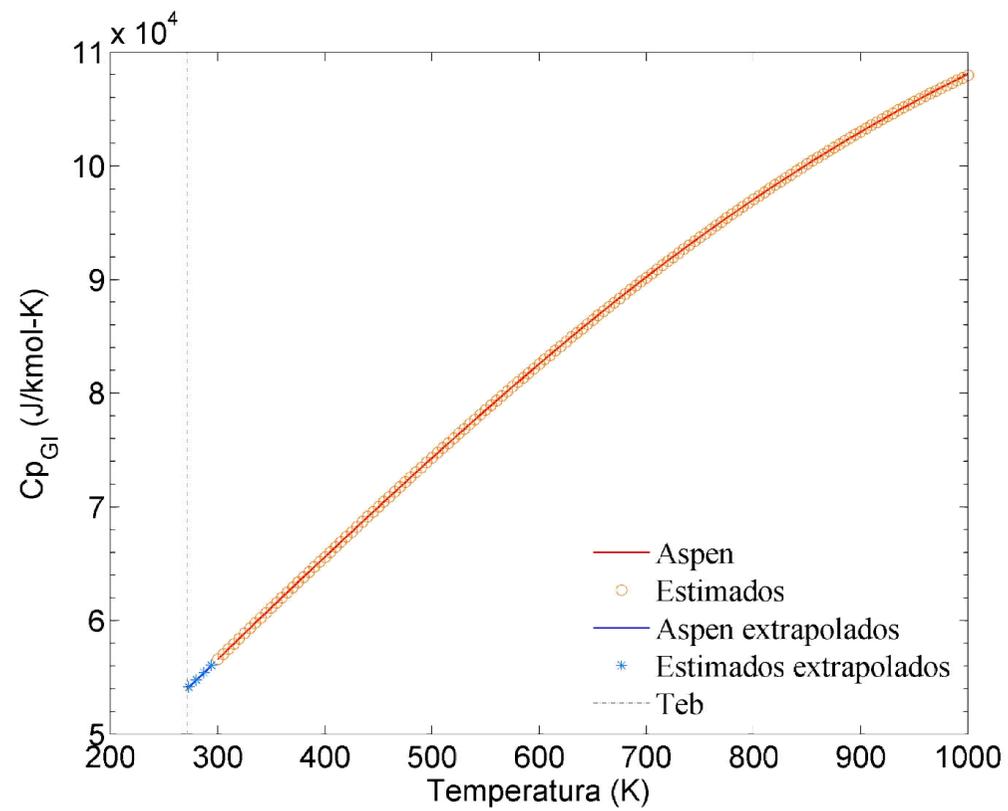


Figura 7-17 - Capacidade calorífica do gás ideal vs. Temperatura para hidróxido de amônio

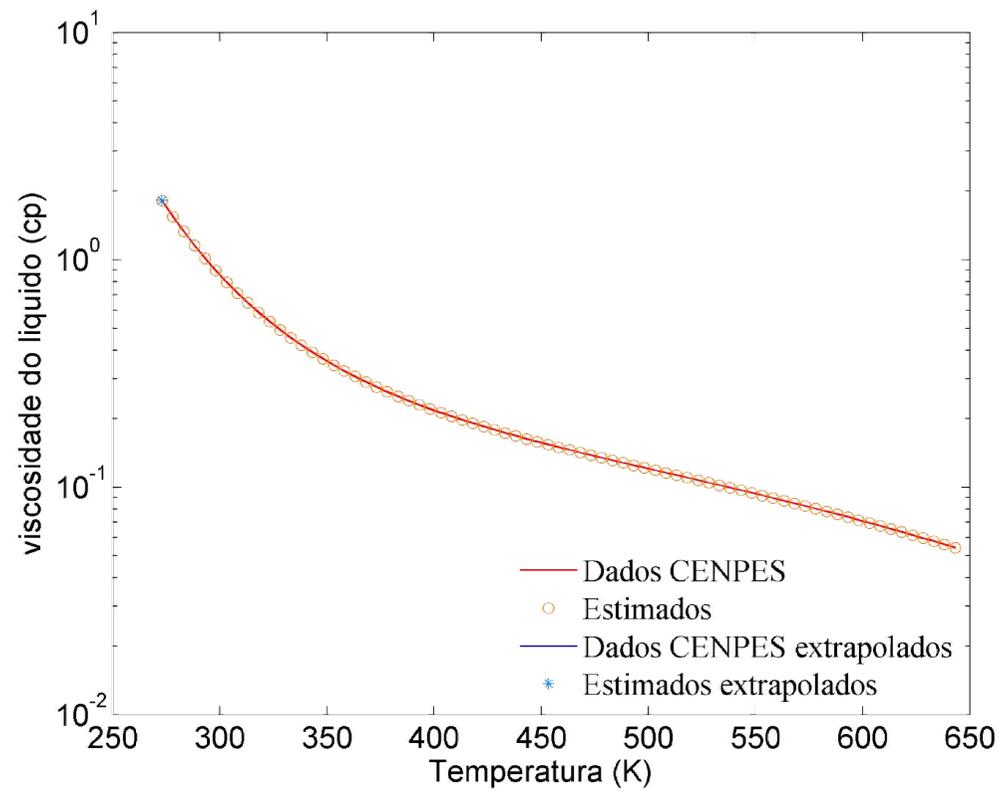


Figura 7-18 - Viscosidade do líquido vs. Temperatura para hidróxido de amônio (Viscosidade em escala logarítmica)

Tabela 7-5 - Propriedades do Hidróxido de cálcio

Nome	Calciumhydroxide	Ca(OH) ₂	Referencia
Propriedades físicas constantes	Massa molecular (g/mol)	74,09	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de ebulição normal (K)		
	Ponto de congelamento (K)	1381,15	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura de ponto triplo (K)	1381,15	Pure11_AspenDataBase
	Pressão de ponto triplo (kPa)		
	Temperatura crítica (K)	2000	Pure11_AspenDataBase
	Pressão crítica (Pa)	5 x10 ⁶	Pure11_AspenDataBase
	Volume crítica (m ³ /mol)	1 x10 ⁻⁴	Pure11_AspenDataBase
	Compressão crítica	0,2	Pure11_AspenDataBase
	Fator acêntrico	0	Pure11_AspenDataBase
Propriedades físicas função da temperatura	Pressão de vapor (Pa)		
	Capacidade calorífica do Gás ideal (kJ/kmol-K) 100K<T<1500K	$Cp_G = -10,012 + 0,622T - 0,00175T^2 + 2,55 \cdot 10^{-6} T^3 - 1,84 \cdot 10^{-9} T^4 + 5,24 \cdot 10^{-13} T^5$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_{Gi} = 39800 + 60250 \left[\frac{1055}{T} / \sinh\left(\frac{1055}{T}\right) \right]^2 + 74200 \left[\frac{410,5}{T} / \cosh\left(\frac{410,5}{T}\right) \right]^2$
	Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K)		
	Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP)		
	Viscosidade do líquido (cP) T em R 273,16K<T<646,15K	$\mu_L = 1000 e^{\left(-263,43 + \frac{17123,6}{T} + 35,897 \ln T + 0,042665 T^{0,9365}\right)}$	Dados CENPES: [Pa.s] $\mu_L = e^{\left(-245,69 + \frac{9763,5}{T} + 38,379 \ln T - 0,042743 T\right)}$
	Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K)		
Condutividade térmica do líquido (W/m-K) 273,15K <T< 633,15	$\kappa_L = -0,432 + 5,7255 \cdot 10^{-3} T - 8,08 \cdot 10^{-6} T^2 + 1,861 \cdot 10^{-9} T^3$	Dados CENPES: [W/m-K] $\kappa_L = -0,432 + 5,7255 \cdot 10^{-3} T - 8,08 \cdot 10^{-6} T^2 + 1,861 \cdot 10^{-9} T^3$	
Tensão superficial (dyn/cm)			

Tabela 7-5 - Propriedades do Hidróxido de cálcio (cont.)

Propriedades físicas somente em uma temperatura	Densidade do líquido (mol/cm ³)	54296,029 a 373 K	Dados CENPES
	Calor de vaporização (kJ/kmol)		
	Tensão superficial		
	Constante dielétrica		
	Índice reflexivo		
Propriedades físicas do sólido	Capacidade calorífica do sólido (kJ/kmol-K) 500K <T< 700K	$C_{p_s} = -2,1208 \cdot 10^5 - 20,044T + 0,316715T^2 - 3,6817 \cdot 10^{-4} T^3 + 1,66415 \cdot 10^{-7} T^4$	Dados CENPES: [J/kmol-K] $C_{p_s} = -2,1208 \cdot 10^8 - 2,0044 \cdot 10^4 T + 316,715T^2 - 0,3681667T^3 + 1,66415 \cdot 10^{-4} T^4$
	Densidade do sólido (mol/cm ³)	28739,7 , a 373 K	Dados CENPES

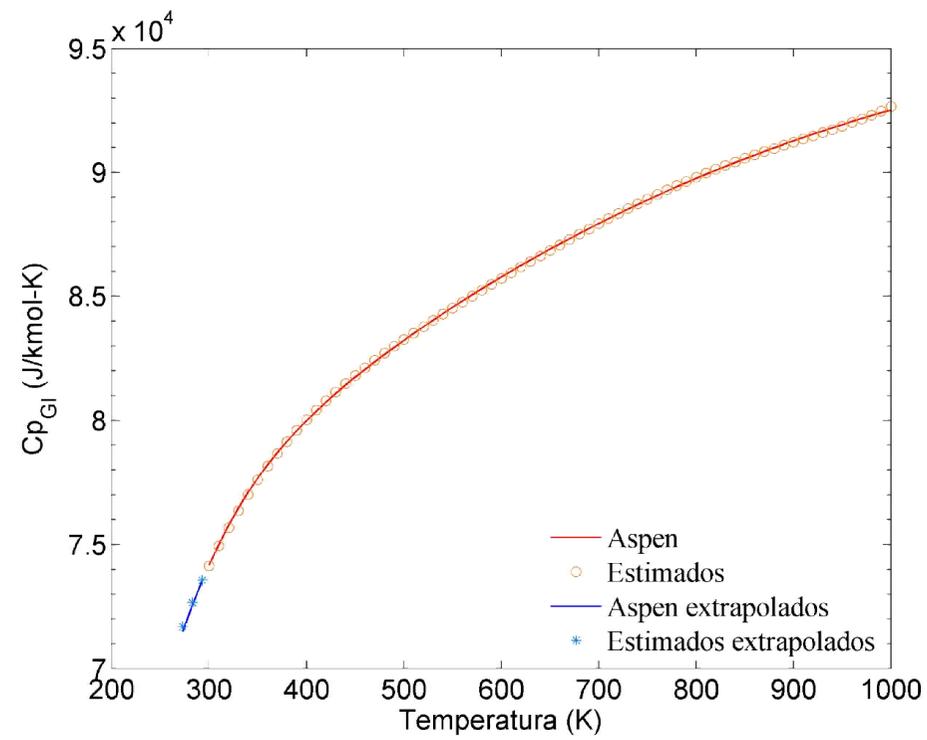


Figura 7-19 - Capacidade calorífica do gás ideal vs. Temperatura para hidróxido de cálcio

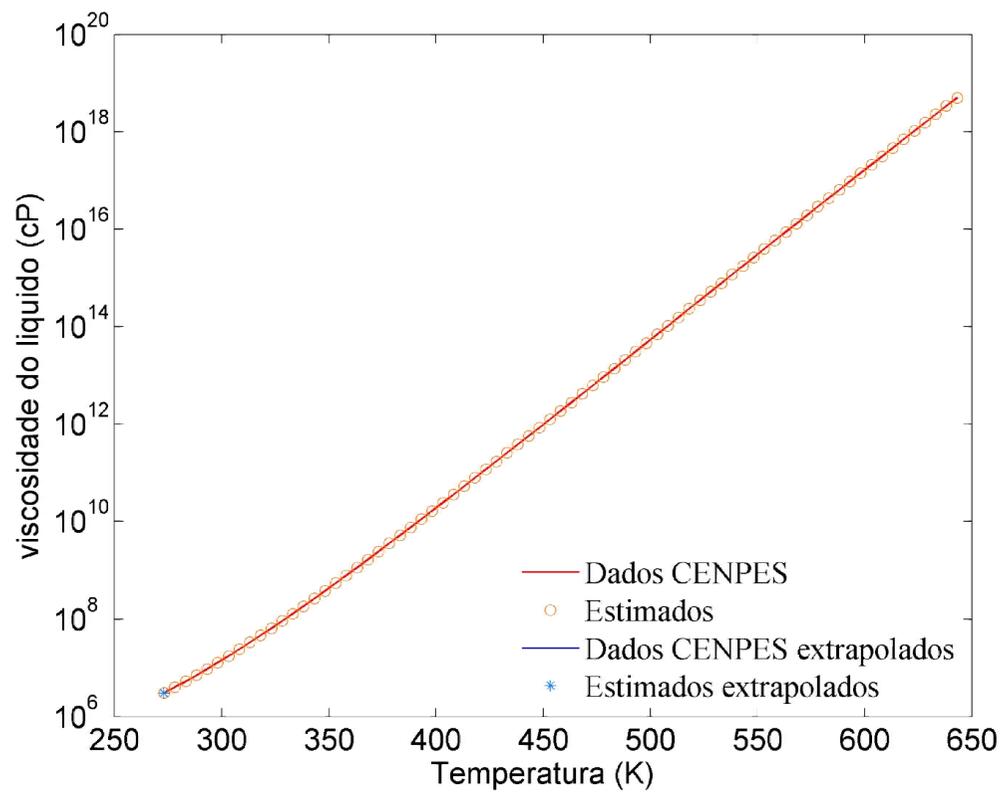


Figura 7-20 - Viscosidade do líquido vs. Temperatura para hidróxido de cálcio (Viscosidade em escala logarítmica)

Componentes sólidos:

Tabela 7-6 - Propriedades do óxido de silício (quartzo)

Nome	SilliconDioxide	SiO ₂	Referencia
Propriedades físicas constantes	Massa molecular (g/mol)	60,084	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de ebulição normal (K)	2503,2	Pure11_AspenDataBase
	Ponto de congelamento (K)	1696	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura de ponto triplo (K)	1696	Pure11_AspenDataBase
	Pressão de ponto triplo (kPa)	0,019804	Pure11_AspenDataBase
	Temperatura crítica (K)	3780	Pure11_AspenDataBase
	Pressão crítica (Pa)	3160000	Pure11_AspenDataBase
	Volume crítica (m ³ /mol)	0.163	Pure11_AspenDataBase
	Compressão crítica	0,0164	Pure11_AspenDataBase
	Fator acêntrico		

Tabela 7-6 - Propriedades do óxido de silício (quartzo) (cont.)

Propriedades físicas função da temperatura	Pressão de vapor (Pa) 1696K<T< 2503,2K	$P_V = 1000 e^{\left(-17,666 \ln(T) - \frac{77310}{T} + 172,88 + 1,57 \cdot 10^{-16} T^2\right)}$	Pure11_AspenDataBase: [Pa] $P_V = e^{\left(49,925 - \frac{4058,1}{T} - 3,1132 T^3 + 1,756 \cdot 10^{-8}\right)}$
	Capacidade calorífica do Gás ideal (kJ/kmol-K) 300K<T<1000K	$Cp_G = 23,43 + 0,0935T - 1,00 \cdot 10^{-4} T^2 + 5,48 \cdot 10^{-8} T^3 + -1,48 \cdot 10^{-11} T^4 + 1,57 \cdot 10^{-15} T^5$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_{Gi} = 30218 + 32086 \left[\frac{810,02}{T} / \sinh\left(\frac{810,02}{T}\right) \right]^2 + 22061 \left[\frac{335,48}{T} / \cosh\left(\frac{335,48}{T}\right) \right]^2$
	Capacidade calorífica do líquido (kJ/kmol-K) 2000K<T< 3780K	$Cp_L = 85,77$	Pure11_AspenDataBase: [J/kmol-K] $Cp_L = 85772$
	Viscosidade do gás, a baixas pressões (cP)		
	Viscosidade do líquido (cP) 1696K<T< 2643,49K	$\mu_L = 1000 e^{\left(670,64 - \frac{59759}{T} - 79,99 \ln T + 2,00 \cdot 10^{-10} T^2 + 2,994\right)}$	Pure11_AspenDataBase: [Pa.s] $\mu_L = e^{\left(630,02 - \frac{33163}{T} - 79,917 \ln T + 1,104 \cdot 10^{-9} T^3\right)}$
	Condutividade térmica do gás, a baixas pressões (W/m-K)		
	Condutividade térmica do líquido (W/m-K) T=2000 K	$\kappa_L = 2$	Pure11_AspenDataBase: [W/m-K] $\kappa_L = 2$
	Tensão superficial (dyn/cm) T=2073 K	$\sigma = 307$	Pure11_AspenDataBase: [N/m] $\sigma = 0,307$
Propriedades físicas somente em uma temperatura	Densidade do líquido (mol/cm ³)	0,0651, a 300K	Pure11_AspenDataBase: [kmol/cm ³] $\rho = \frac{0,10055}{0,037824 \left(1 + \left(1 - \frac{T}{3780}\right)^{0,28571}\right)}$
	Calor de vaporização (kJ/kmol)		
Propriedades físicas do sólido	Capacidade calorífica do sólido (kJ/kmol-K) 53,4K <T< 847	$Cp_S = -6,1207 \cdot 10^4 - 6,6113T + 0,12842T^2 - 1,1225 \cdot 10^{-4} T^3 + 4,411 \cdot 10^{-8} T^4$	Dados CENPES: [J/kmol-K] $Cp_S = -6,1207 \cdot 10^7 - 6,6113T \cdot 10^3 + 128,42T^2 - 0,11225T^3 + 4,411 \cdot 10^{-5} T^4$
	Densidade do sólido (mol/cm ³)	0,044 , a 300K	Pure11_AspenDataBase: [kmol/cm ³] $\rho_S = 44,561 - 0,0016238T$

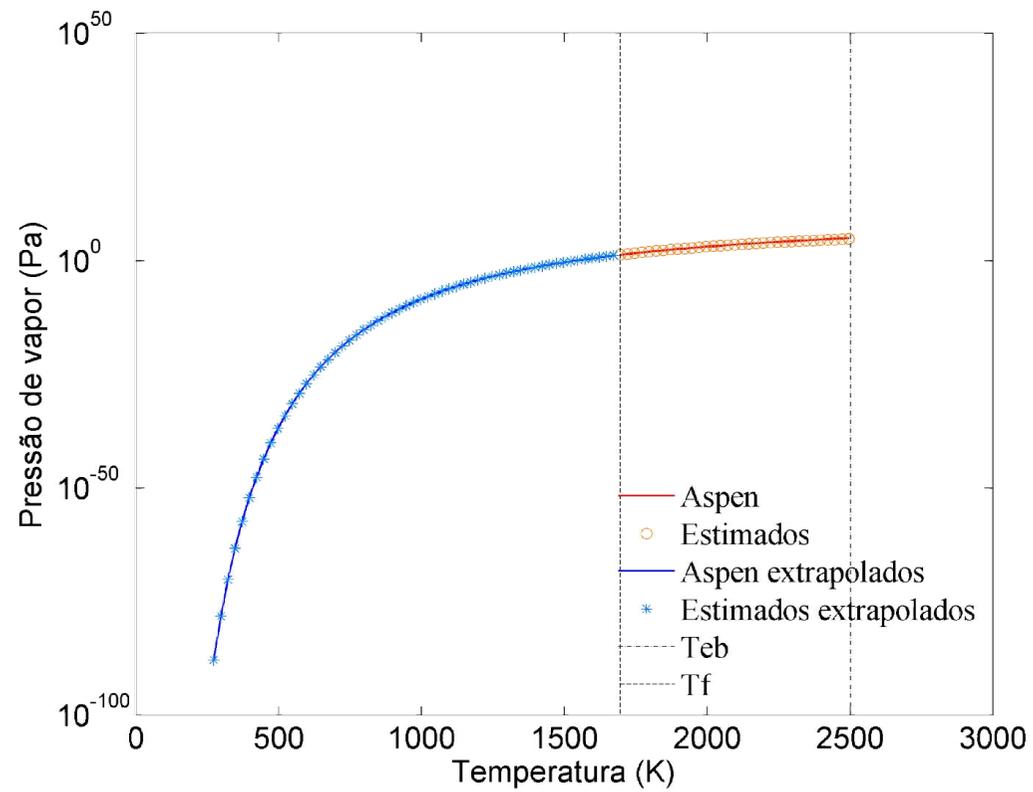


Figura 7-21- Pressão de vapor vs. Temperatura para oxido de silício (Pressão em escala logarítmica)

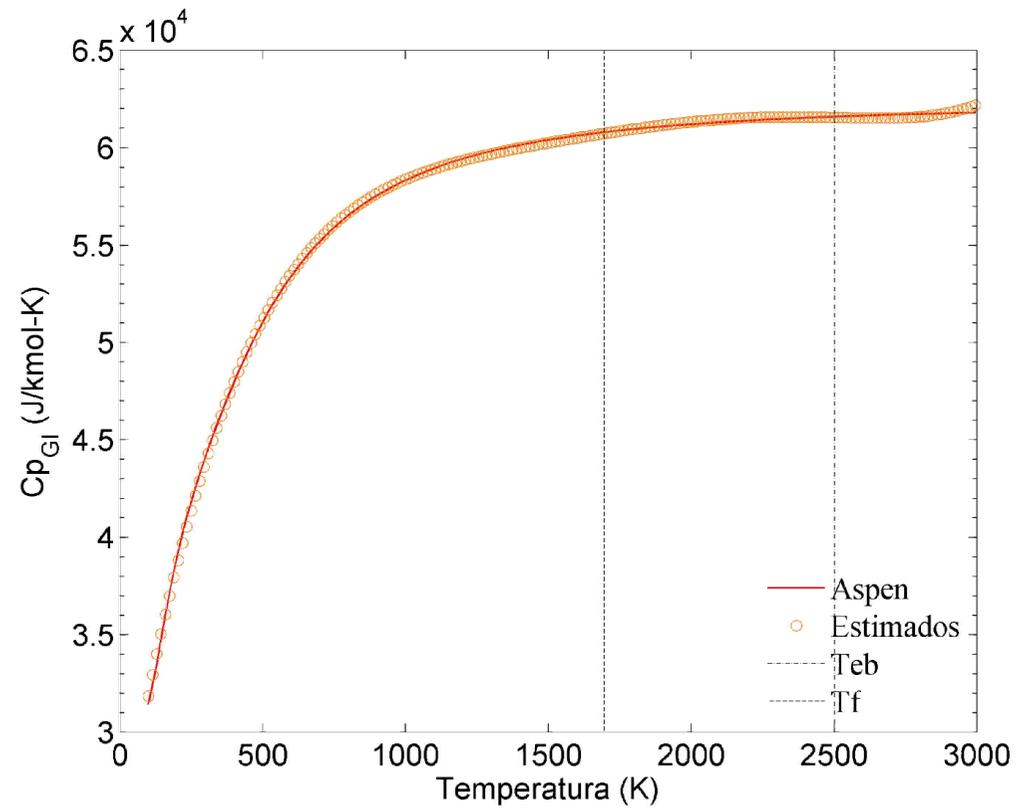


Figura 7-22 - Capacidade calorífica do gás ideal vs. Temperatura para oxido de silício

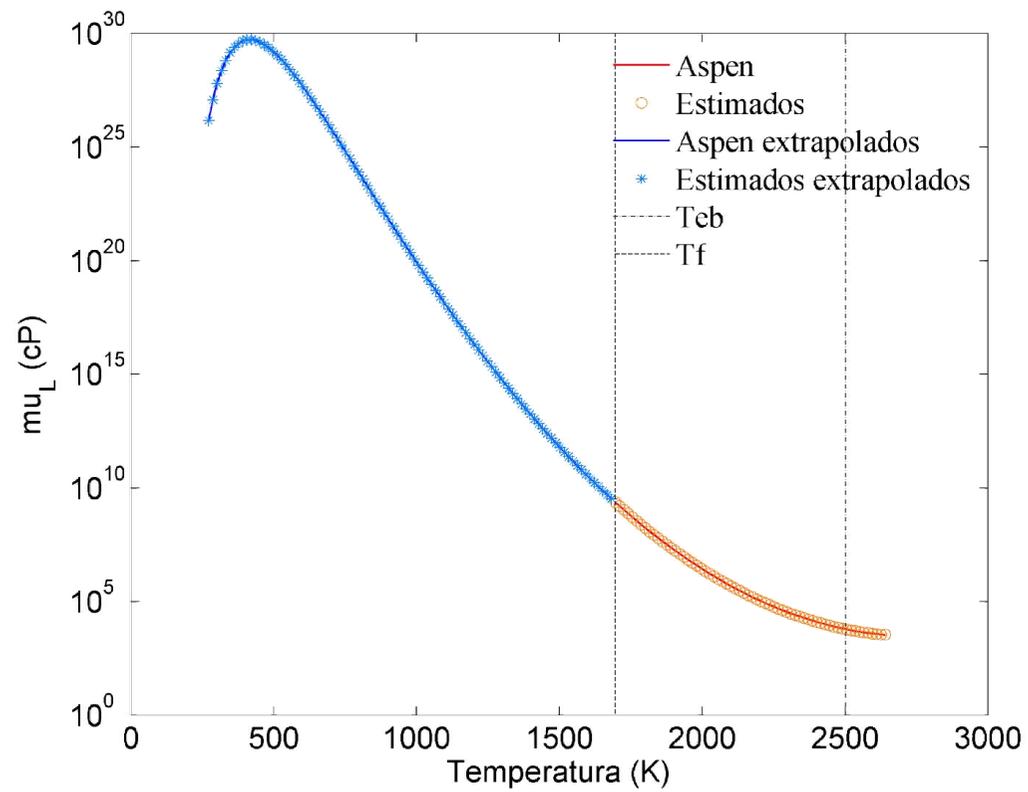


Figura 7-23 - Viscosidade do líquido vs. Temperatura para oxido de silício (Viscosidade em escala logarítmica)