

Desenvolvimento de um programa computacional didático para o projeto de colunas de absorção

Nehemias Curvelo Pereira* e Marcelo Kaminski Lenzi

Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, Av. Colombo, 5790, 87020-900, Maringá-Paraná, Brazil. *Author for correspondence.

RESUMO. A absorção de gases é uma operação unitária da engenharia química na qual há a transferência de massa de uma corrente gasosa para uma corrente líquida. O princípio desta operação é simples e as dificuldades no dimensionamento das colunas de absorção estão associadas à execução de um conjunto de balanços de massa e de energia nas condições de operação do sistema. Elaborou-se, usando a linguagem de programação DELPHI, voltada ao ambiente WINDOWS, e algumas equações encontradas na literatura, um programa computacional de caráter didático para o projeto de torres de absorção isotérmicas, com diversos tipos de recheio e com operação em contracorrente. Os resultados são apresentados tanto em forma numérica como de gráficos, sendo possível sua impressão. Alguns exemplos tirados da literatura foram usados para testar a eficácia do software e observou-se que os erros apresentados pelos resultados do programa variam em torno de 5%.

Palavras-chave: absorção, programa computacional, torre isotérmica, torre de recheio.

ABSTRACT. Development of a didactic software to design absorption towers. The gas absorption is a unit operation of chemical engineering based on the mass transference of a component from a gas phase stream to a liquid one. This operation is very simple and the difficulties to design an absorption tower are associated with mass and energy balances which must be calculated under the conditions of the operating system. Using DELPHI language and some equations found in literature a didactic software was developed in order to project isothermal and countercurrent packed absorption towers. The results are presented in numeric form and a graphics, and it is also possible to print them. Some examples taken from literature were used to test the program efficiency whose results presented a 5% error variation.

Key words: absorption, software, packed tower, isothermal tower.

A absorção de gases é muito usada nas plantas industriais, principalmente as da área química, tanto na preparação da matéria-prima para a transformação como na purificação dos produtos obtidos. O princípio desta operação unitária é simples: baseia-se na transferência de um componente de uma mistura gasosa para um líquido absorvente, devido à solubilidade entre ambos e à diferença de concentração.

Apesar do princípio da absorção ser simples, no dimensionamento das colunas existem dificuldades principalmente relacionadas aos balanços de massa e energia que devem ser calculados com base nas condições de operação do sistema.

A partir das equações encontradas na literatura, foram elaboradas subrotinas para o projeto de torres de absorção isotérmicas, com diversos tipos de recheio e com operação em contracorrente e, com as

subrotinas, desenvolveu-se um programa computacional, usando-se a linguagem de programação DELPHI, voltada para o ambiente WINDOWS.

Devido ao seu caráter didático, este software pode ser usado por estudantes e profissionais da área de engenharia química sem dificuldades. Além disto, os resultados obtidos pelo mesmo apresentam boa precisão.

Transferência de massa

Considere-se um sistema formado por um gás e líquido imiscíveis e uma substância solúvel em ambos, por exemplo, ar, água e amônia. Quando estas substâncias forem colocadas em contato há uma tendência inicial de haver troca de certas grandezas, por exemplo massa. Entretanto, com o

passar do tempo, a taxa de transferência vai sendo reduzida até ser nula. Ao ser atingida esta situação, o sistema está em equilíbrio. A diferença entre a condição existente antes do estado de equilíbrio e a de equilíbrio propriamente dito denomina-se força motriz.

Alterando-se a concentração de algum dos constituintes, surgirá uma nova força motriz. Quando esta for anulada, o sistema terá atingido um novo estado de equilíbrio, diferente do anterior. Portanto, infinitos estados de equilíbrio estão associados a um sistema e à sua representação gráfica dá-se o nome de curva de equilíbrio.

Existem dois tipos básicos de mecanismos para a transferência de massa: condução e convecção. O tipo em estudo é a transferência de massa por convecção. Sherwood e Pigford (1952) definem este processo como sendo o transporte de massa entre o contorno de uma superfície e um fluido que se move ou entre dois fluidos que se movem quando relativamente miscíveis.

Para explicar o mecanismo de transferência de massa entre duas fases e através de uma interface, Foust *et al.* (1982) usam uma teoria baseada na idéia de resistência oferecida pelas fases líquida e gasosa. Qualquer que seja o método de contato, a transferência se faz pela reunião de duas fases diferentes para que o efeito ocorra nas interfaces de duas fases. A interface funciona como uma espécie de fronteira entre as fases. Tendo isso em vista, o processo de transferência ocorre em três etapas: na primeira, o soluto atravessa a resistência gasosa até chegar a interface; na segunda, atravessa a interface e na última, a resistência líquida.

A relação $N_A = K_{Ga} \cdot (p_{A1} - p_{A2})$ caracteriza a transferência de massa por convecção. Nesta equação, observa-se uma constante K_{Ga} (coeficiente de transferência de massa convectivo), que depende das propriedades do fluido, da dinâmica e geometria do escoamento. O coeficiente pode ser local, ou seja, tem validade somente para uma das fases, conforme afirmam Foust *et al.* (1982) e é de difícil determinação pois necessita do valor da composição na interface.

Pode-se, entretanto, usar a concentração do soluto em qualquer uma das fases. Neste caso, seria usado o coeficiente global de transferência de massa. Diferente do coeficiente local, o global vale para as duas fases, ou seja, engloba ao mesmo tempo, duas resistências, de acordo com Foust *et al.* (1982).

Estando a transferência em regime permanente, observa-se que a taxa de transferência de uma fase para outra é igual. Com isso, obtém-se a equação 1.

$$N_A = k_{Ga} \cdot (p_{AG} - p_{A,i}) = k_{La} \cdot (c_{A,i} - c_{A,L}) = K_{Ga} \cdot (p_{AG} - p_A^*) = K_{La} \cdot (c_A^* - c_{A,G}) \quad (1)$$

Onde os termos com sobrescrito (*) referem-se ao estado de equilíbrio; o subscrito (i), à interface; o subscrito (G), à fase gasosa e o subscrito (L), à fase líquida.

A Figura 1, apresentada por Welty *et al.* (1984:637), ilustra graficamente as resistências impostas pelas fases gasosa (ΔP) e líquida (ΔC), bem como uma curva de equilíbrio.

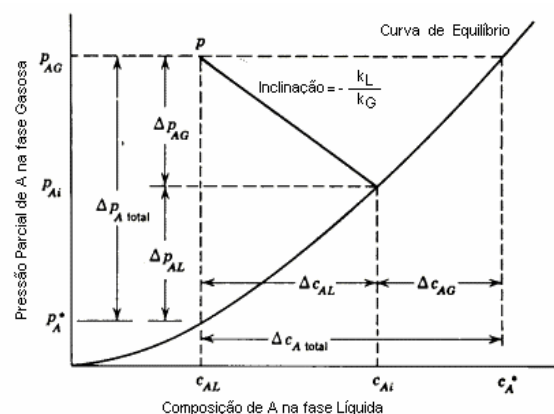


Figura 1. Ilustração das forças motrizes

As equações 2 e 3, apresentadas por Perry (1984:14-8), mostram como os coeficientes local e global de transferência de massa podem ser relacionados:

$$\frac{1}{K_{Ga}a} = \frac{1}{k_{Ga}a} + \frac{H}{k_{La}a} \quad (2)$$

$$\frac{1}{K_{La}a} = \frac{1}{H \cdot k_{Ga}a} + \frac{1}{k_{La}a} \quad (3)$$

onde H é a constante de Henry.

As equações anteriores foram deduzidas usando a diferença de pressão parcial e de concentração como parâmetros de força motriz, conforme ilustra a Figura 1. As equações 4 e 5 apresentadas por McCabe *et al.* (1993:702), foram deduzidas adotando-se diferenças de frações molares para força motriz - considerando y a fração molar do soluto na fase gasosa e x a fração molar do soluto na fase líquida, tem-se:

$$\frac{1}{K_{Ya}a} = \frac{1}{k_{Ya}a} + \frac{H}{k_{Xa}a} \quad (4)$$

$$\frac{1}{K_{Xa}a} = \frac{1}{H \cdot k_{Ya}a} + \frac{1}{k_{Xa}a} \quad (5)$$

Os valores numéricos dos coeficientes de transferência de massa podem ser estimados por diversas correlações. Foust *et al.* (1982:350) apresentam as equações 6, 7 e 8 para calcular os coeficientes locais de transferência de massa.

$$k_L = 0.0051 \left(\frac{G_L}{a_w \cdot \mu_L} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot \left(\frac{\mu_L}{\rho_L \cdot D_L} \right)^{-0.5} \cdot \left(\frac{\mu_L \cdot g}{\rho_L} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot (a_v \cdot D_p)^{0.4} \quad (6)$$

$$a_w = a_v \cdot \left[1 - \exp \left[-1.45 \left(\frac{\sigma_C}{\sigma} \right)^{0.75} \cdot \left(\frac{G_L}{a_v \cdot \mu_L} \right)^{0.1} \cdot \left(\frac{G_L \cdot a_v}{\rho_L^2 \cdot g} \right)^{-0.05} \cdot \left(\frac{G_L^2}{\rho_L \cdot \sigma \cdot a_v} \right)^{0.2} \right] \right] \quad (7)$$

$$k_G = \left(\frac{a_v \cdot D_v}{R \cdot T} \right) \cdot C_1 \cdot \left(\frac{G_v}{a_v \cdot \mu_v} \right)^{0.7} \cdot \left(\frac{\mu_v}{\rho_v \cdot D_v} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot (a_v \cdot D_p)^{-2.0} \quad (8)$$

Onde:

a_v - área superficial do recheio por volume unitário do mesmo, [ft²/ft³]

a_w - área superficial do recheio molhado, [ft²/ft³]

C_1 - constante adimensional. $C_1=5,23$ para recheio maior que 0,5in; $C_1=2$ para recheio menor que 0,5in

D_L - coeficiente de difusão em fase líquida, [ft²/h]

D_v - coeficiente de difusão em fase gasosa, [ft²/h]

D_p - dimensão nominal do recheio, [ft]

g - aceleração da gravidade, [m/s²]

G_L - velocidade mássica em fase líquida, [kg/m²·s]

G_v - velocidade mássica em fase gasosa, [kg/m²·s]

k_L - coeficiente local de transferência de massa na fase líquida, [mol/s·m²·(mol/m³)]

k_G - coeficiente local de transferência de massa na fase gasosa, [mol/s·m²·Pa]

ρ_L - densidade do líquido, [kg/m³]

ρ_v - densidade do gás, [kg/m³]

μ_L - viscosidade do líquido, [kg/m·s]

μ_v - viscosidade do gás, [kg/m·s]

σ - tensão superficial do líquido, [dyn/cm]

σ_C - tensão superficial crítica do material do recheio, [dyn/cm]

Relacionando as equações 1, 2 e 3, pode-se determinar uma expressão para o cálculo de K_G a partir de k_G e k_L . Considerando a transferência de massa em regime permanente, pode-se igualar as equações dos dois últimos termos do lado direito da equação 1; obtém-se então a equação 9.

$$K_G \cdot (p_{Ag} - p_A^*) = K_L \cdot (c_A^* - c_{Ag})$$

$$K_L = K_G \cdot \left(\frac{p_{Ag} - p_A^*}{c_A^* - c_{Ag}} \right) \longrightarrow K_L = K_G \cdot \alpha \longrightarrow \alpha = \left(\frac{p_{Ag} - p_A^*}{c_A^* - c_{Ag}} \right) \quad (9)$$

Considerando-se o soluto em concentrações pequenas, pode-se admitir que o calor produzido pela transferência de massa de uma fase a outra é desprezível. Sendo assim, faz-se a hipótese de que a coluna de absorção opera em condições isotérmicas. Sendo a torre isotérmica, a solubilidade entre os componentes é a mesma. Consequentemente, o coeficiente de transferência de massa encontrado para um ponto da torre é o mesmo em qualquer local da mesma. Isolando-se H nas equações 2 e 3:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{H}{k_L} \longrightarrow H = \left(\frac{1}{K_G} - \frac{1}{k_G} \right) \cdot k_L \quad (10)$$

$$\frac{1}{K_L} = \frac{1}{H k_G} + \frac{1}{k_L} \longrightarrow H = \frac{1}{\left(\frac{1}{K_L} - \frac{1}{k_L} \right) \cdot k_G} \quad (11)$$

Por meio das equações 9, 10 e 11 chega-se à equação 12:

$$\left[\frac{k_L \cdot k_G}{\alpha \cdot K_G} - k_G - \frac{k_L}{\alpha} \right] = 0 \longrightarrow K_G = \frac{k_L \cdot k_G}{(\alpha \cdot k_G + k_L)} \quad (12)$$

onde k_L e k_G são determinados pelas equações 6, 7 e 8.

Como foi feita a hipótese de a torre operar em condições isotérmicas, o valor do coeficiente de transferência de massa obtido pela equação 12 é o mesmo para toda a coluna. Deve ser usado, portanto, um local da torre no qual são conhecidas as concentrações do soluto na fase líquida e na fase gasosa, bem como e as concentrações de equilíbrio, por exemplo os extremos da coluna, base ou topo.

O uso da equação 12 é limitado pelos seguintes fatores:

1. a maioria dos dados experimentais difere de $\pm 20\%$ do valor dos coeficientes locais de transferência de massa calculados pelas equações 6, 7 e 8;
2. a constante C_1 da equação 8 depende da dimensão do recheio, vale 5,23 para recheios maiores que 0,5in e 2,0 para recheios menores que 0,5in;
3. As equações 6, 7 e 8 são válidas para os seguintes recheios: anéis de Rasching (de 0,75 até 2in), anéis de Pall (1,0in), selas de Berl (de 0,50 até 1,50in), Esferas (de 0,50 até 1,0in) e Bastonetes (de 0,50 até 1,0in);

4. O valor de σ_C da equação 7 depende do material do recheio. Devem ser usados os seguintes valores: Carbono (56 dyn/cm), Cerâmica (61 dyn/cm), Vidro (73 dyn/cm), Parafina (20 dyn/cm), Polietileno (33 dyn/cm), Cloreto de Polivinila (40 dyn/cm), Aço (75 dyn/cm).

Projeto de torres de absorção

Uma torre ou coluna de absorção, em geral, possui a forma de um cilindro fechado. Neste cilindro são colocadas em contato as fases líquida e gasosa para que ocorra a transferência de massa, devido à força motriz existente. Portanto, a corrente de gás que entra na torre sai com uma concentração menor do soluto, enquanto que a corrente de líquido tem a concentração do soluto aumentada ao sair da coluna.

Quando as correntes de líquido e gás percorrem o interior da torre no mesmo sentido, a operação é denominada concorrente. Ao percorrerem em sentido contrário, tem-se a operação contracorrente. Existem diversos tipos de torres de absorção. A diferença entre os diversos modelos está na forma do interior da coluna, na maneira na qual as correntes líquida e gasosa são colocadas em contato, variando de acordo com a afinidade entre as substâncias.

O projeto das colunas de absorção consiste em, de acordo com a afinidade entre as substâncias e as dimensões do cilindro, determinar o tipo de coluna que será usado. Em seguida, deve-se estimar as dimensões do cilindro (diâmetro e altura) de acordo com as vazões de líquido e gás que devem circular na coluna para que haja a purificação desejada e não ocorra inundação da torre, sentido de escoamento (contracorrente ou concorrente), temperatura e pressão em que a torre deva operar.

Torres de recheio

Este modelo é encontrado com muita frequência em diversas indústrias. A coluna é recheada com material sólido para aumentar a superfície de contato entre as correntes de líquido e gás. Com isso aumenta a taxa de transferência de massa entre as fases. Esse tipo de torre é usado quando há um equilíbrio entre as resistências das fases líquida e gasosa.

Diversos fatores devem ser analisados na escolha do tipo de recheio, por exemplo, a resistência à corrosão, densidade, quantidade de vazios, etc. A Figura 2, apresentada por Foust *et al.* (1982), ilustra os três principais tipos de recheio.

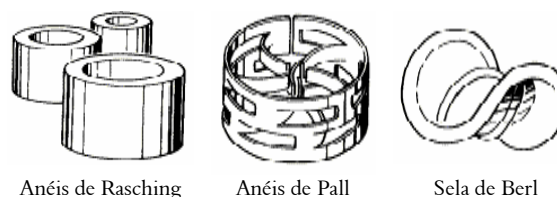


Figura 2. Ilustração dos principais tipos de recheios irregulares

Modelagem matemática - balanços de massa

Os balanços de massa envolvidos são simples e visam a determinar as vazões de gás e líquido, bem como a fração molar do soluto nas duas fases, ou seja, encontrar uma relação entre essas grandezas de modo que possam ser calculadas em qualquer ponto ao longo da coluna. A Figura 3, apresentada por Welty *et al.* (1984:676), mostra as grandezas acima explicadas nas seguintes posições: $Z=Z_2$ (Topo), $Z=Z$ (Qualquer altura entre topo e base), $Z=Z_1$ (Base).

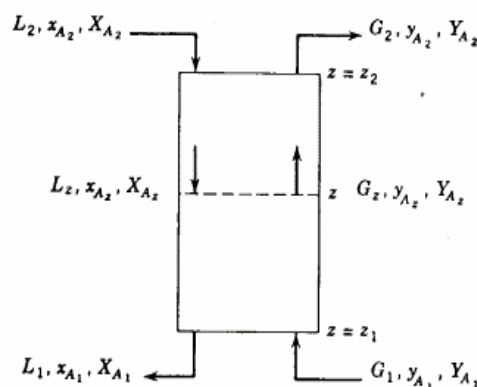


Figura 3. Ilustração das correntes na torre

Como o soluto passa de uma fase para outra, a vazão das fases líquida e gás são variáveis. Para evitar esse problema, Welty *et al.* (1984) sugerem a adoção de uma base de cálculo “solvente livre”. Neste caso, a vazão de gás é a quantidade de gás inerte (sem soluto) e a de líquido, de líquido inerte (sem soluto). Ocorre também uma alteração nos cálculos da fração molar que passa de (mol de soluto/mol total) para (mol de soluto/mol de líquido inerte) e (mol de soluto/mol de gás inerte). As equações 13 e 14 mostram os cálculos das frações molares

$$Y_A = \frac{y_A}{1 - y_A} \quad (13)$$

$$X_A = \frac{x_A}{1 - x_A} \quad (14)$$

Aplicando-se um balanço de massa total (entre z_1 e z_2) para o componente A, na torre da Figura 3, obtém-se:

$$G_S Y_{A1} + L_S X_{A2} = G_S Y_{A2} + L_S X_{A1} \rightarrow \frac{L_S}{G_S} = \frac{Y_{A1} - Y_{A2}}{X_{A1} - X_{A2}} \quad (15)$$

A equação 15 é a equação de uma reta, com coeficiente angular L_S/G_S . Ao se aplicar um balanço de massa total (entre z_1 e z), obtém-se a equação de uma reta com mesmo coeficiente angular da equação 15 e com o ponto (X_{A1}, Y_{A1}) em comum. Conclui-se, então, que ambas são iguais e podem ser usadas para determinar as frações X e Y em qualquer ponto da torre. Essa reta recebe o nome de Reta de Operação.

Considerando-se o fenômeno da absorção, quando a Reta de Operação e a Curva de Equilíbrio são plotadas em um mesmo gráfico, todos os pontos da reta de operação estão acima dos da curva de equilíbrio, como mostra a Figura 4, apresentada por Welty *et al.* (1984:680). Como todos os pontos da Reta de Operação estão acima da Curva de Equilíbrio, existem forças motrizes. Com isso, o sistema não está em equilíbrio e deverá ocorrer transferência de massa para que o estado de equilíbrio seja atingido.

Pode-se variar a inclinação na reta de operação até uma situação limite à qual ainda permite a absorção (todos os pontos da reta de operação estão acima dos da curva de equilíbrio). Esta ocorre quando a reta de operação tangencia a curva de equilíbrio. A esta inclinação da curva de equilíbrio dá-se o nome de Razão $(L/G)_{\text{MÍNIMA}}$.

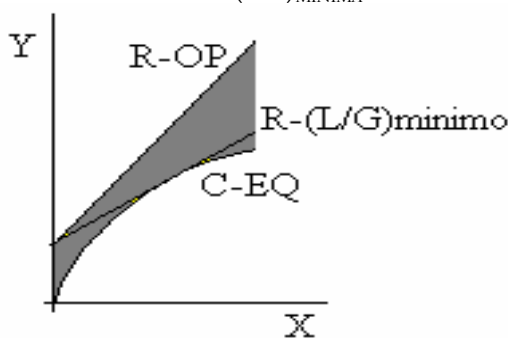


Figura 4. Ilustração das curvas de uma operação de absorção

Aplicando-se um balanço de massa em um elemento de altura dz da coluna de absorção da Figura 3, obtém-se:

$$G \cdot dy = N \cdot A \cdot dz \quad (16)$$

Onde G é a vazão de gás (base livre), A é a área da seção transversal da torre, dz elemento de altura, dy elemento de fração molar e N é a taxa de transferência do soluto.

Considerando-se a taxa de transferência de soluto em termos de frações molares:

$$N = K_G \cdot (Y - Y^*) \quad (17)$$

Substituindo-se a equação 17 na equação 16 e isolando-se dz e integrando-se a equação resultante:

$$\int_0^z dz = \frac{G}{A \cdot K_y a} \cdot \int_{Y_{\text{BASE}}}^{Y_{\text{TOPO}}} \frac{dY}{Y - Y^*} \rightarrow z = \frac{G}{A \cdot K_y a} \cdot \int_{Y_{\text{BASE}}}^{Y_{\text{TOPO}}} \frac{dY}{Y - Y^*} \quad (18)$$

A equação 18 é usada no cálculo da altura de recheio da torre. A integral é dada pela soma do inverso da diferença entre o valor da fração molar existente na torre e a fração molar de equilíbrio, com valores de fração molar entre o valor do topo e da base da coluna. Este intervalo pode ser visualizado na Figura 4, como sendo a área cinza entre a reta de operação e a curva de equilíbrio.

Programa computacional

A partir das equações encontradas na literatura, desenvolveu-se um programa computacional para o cálculo da altura de torre de absorção. O programa foi construído com linguagem DELPHI, voltada ao ambiente WINDOWS.

Este software, devido ao seu caráter didático, pode ser usado por estudantes e profissionais para estimar a altura de uma torre de absorção isotérmica, com vários tipos de recheio e com operação em contracorrente.

A Figura 5 ilustra o diagrama de blocos do programa.

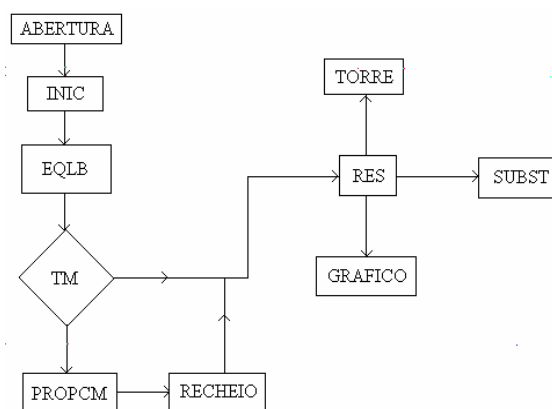


Figura 5. Ilustração do diagrama de blocos

Bloco - Abertura. Ao ser iniciado o programa, o bloco Abertura do diagrama de blocos, mostrado na Figura 5, é visualizado em uma tela de abertura. Esta tela tem por função mostrar ao usuário que o programa está sendo iniciado e informar qual o objetivo do programa: o projeto de colunas de absorção.

Bloco - Inic. Neste bloco devem ser fornecidos os valores de algumas propriedades que vão ser utilizadas nos cálculos e já é feito o balanço de massa para determinar com que fração de soluto sai o líquido absorvente e a equação da reta de operação.

Ao ser iniciado o bloco, aparece a tela indicada na Figura 6. Nela devem ser fornecidos dados sobre a **torre**: temperatura - [°F], pressão - [atm] e diâmetro - [ft].

Figura 6. Ilustração da tela de dados da torre

Conforme se pode observar na Figura 6, há possibilidade de consultar um tópico de ajuda existente no programa (basta clicar o botão ajuda). Neste bloco, devem, ainda, ser fornecidos dados sobre o gás no qual está o soluto que será absorvido (nome, vazão de entrada - [ft³/h] e peso molecular - [lb/lbmol]). Em seguida, tem-se acesso à tela na qual devem ser fornecidos dados do **líquido** que vai absorver o soluto que entra com o gás na base da torre (nome, a vazão de entrada - [lb/h] e o peso molecular - [lb/lbmol]). Continuando-se a execução do programa, é mostrada outra tela para fornecimento de dados. Agora, o soluto que vai ser transferido de uma fase para outra é que deve ter suas propriedades fornecidas (nome, peso molecular - [lb/lbmol], fração no líquido de entrada, gás de entrada e gás de saída em [lbmol-soluto/lbmol-mistura]).

Bloco - EQLB. Esta parte do programa é de fundamental importância, pois está relacionada aos dados de equilíbrio. Devem ser fornecidos os dados de equilíbrio nas seguintes unidades: X - [lbmol soluto/lbmol solvente líquido] e Y - [lbmol soluto/lbmol solvente gasoso].

Neste bloco é feito o ajuste dos dados de equilíbrio fornecidos pelo usuário, por meio do método dos mínimos quadrados, de modo que se obtenha a melhor equação que os represente. Os tipos de ajustes feitos são apresentados por Ruggerio e Lopes (1988) e estão na Tabela 1.

Tabela 1. Tabela das equações de ajuste dos dados de equilíbrio

Nome	Equação
Parábola	$\alpha_1 + \alpha_2 \cdot x + \alpha_3 \cdot x^2$
Reta	$\alpha_1 + \alpha_2 \cdot x$
Logarítmica	$\alpha_1 + \alpha_2 \cdot \ln x$
Geométrica	$\alpha_1 \cdot x^{\alpha_2}$
Exponencial	$\alpha_1 \cdot \alpha_2^x$
Exponencial	$\alpha_1 + \alpha_2 \cdot \exp(x)$
Exponencial	$\alpha_1 \cdot \exp(-\alpha_2 \cdot x)$

É feita uma seleção dos ajustes e onde apenas o melhor é usado. Esta seleção é baseada nos seguintes critérios:

1. não apresentar valores negativos;
2. TODOS os valores do ajuste devem ser menores que os da reta de operação (caso este critério e o anterior não sejam satisfeitos para nenhum dos ajustes, o programa é abortado, ou seja, termina a execução);
3. classificar os modelos aprovados nos critérios 1 e 2 da menor para a maior soma dos mínimos quadrados e usar aquele que tiver a menor soma.

A Figura 7 ilustra a tela do bloco EQLB. Deve-se observar que há o campo para fornecer os dados de equilíbrio. As colunas da matriz podem ser adicionadas ou excluídas, de acordo com a quantidade de pontos que o usuário possui, mas o programa aceita no máximo 100 pares.

Figura 7. Ilustração da tela do bloco EQLB

Bloco - TM. Nesta parte do programa deve ser fornecido ou calculado o valor do coeficiente global de transferência de massa em termos de frações molares na fase gasosa ($K_y a$ com unidades [lbmol/h.ft³.ΔY]). Com este valor, neste bloco mesmo, é calculada a altura da torre (é efetuada uma integral, usando-se a regra de Simpson e 1001 pontos).

Caso o usuário escolha fornecer o valor do coeficiente de transferência de massa, o programa passa direto para o gerenciador de respostas, cujo funcionamento será explicado mais adiante. Entretanto, caso seja escolhido calcular o valor do coeficiente de transferência, o programa passa por dois outros blocos (PROPCM e RECHEIO), volta a este bloco para calcular o valor da altura da torre e, só então, é que o programa passa para o gerenciador de respostas.

Bloco - PROPCM. O programa só acessa este bloco se o usuário decidiu que o valor do coeficiente de transferência de massa deve ser calculado. Este bloco serve para fornecer os valores das propriedades do **líquido** (densidade - $[\text{lb/ft}^3]$; viscosidade - $[\text{lb/ft.h}]$; tensão superficial - $[\text{dyn/cm}]$), do **gás** (densidade - $[\text{lb/ft}^3]$; viscosidade - $[\text{lb/ft.h}]$) e do **soluto** (densidade - $[\text{lb/ft}^3]$; difusividade no gás - $[\text{ft}^2/\text{h}]$; difusividade no líquido - $[\text{ft}^2/\text{h}]$) e **aceleração da gravidade** - $[\text{m/s}^2]$ que a correlação necessita. Deve-se salientar que as propriedades do gás, do líquido e do soluto devem estar na temperatura de operação da torre.

Este bloco converte os dados de equilíbrio e as frações dos extremos da torre de fração molar para concentração no caso da fase líquida e pressão parcial no caso da fase gasosa e ajusta os dados de equilíbrio nessas novas unidades usando o método dos mínimos quadrados. Continuando-se a execução do programa (o usuário clicou o botão CONTINUAR) o programa passa para o próximo bloco RECHEIO.

Bloco - Recheio. Nesta tela nenhum valor é fornecido, o único trabalho que o usuário tem é escolher qual a forma, material e dimensão para o recheio da torre. Deve-se ter em mente que estas três propriedades devem ser escolhidas para formar uma combinação que a correlação tenha condições de calcular o valor dos coeficientes locais de transferência.

É neste bloco que o coeficiente global de transferência de massa é calculado. A correlação fornece os valores dos coeficientes locais de transferência de massa (k_L e k_G). Com o melhor modelo determinando o bloco anterior (PROPCM), relacionando os dados de equilíbrio em termos de concentração e fração molar, determina-se a concentração e a pressão parcial do soluto na interface de transferência (c^* e p^*), com estes valores determina-se K_G por meio da equação 15 e com K_G determina-se K_{Ya} .

A Figura 8 ilustra a tela deste bloco. Dando sequência à execução do programa, este volta ao bloco TM (como já foi explicado), para então passar para o bloco RES (gerenciador de resultados).



Figura 8. Ilustração da tela do bloco Recheio

Bloco - RES. Como foi dito anteriormente, este bloco é o gerenciador de resultados, isto é, a partir dele é que se pode ter acesso a todos os resultados obtidos pelo programa. Estes são apresentados em três blocos (TORRE, SUBSTÂNCIAS, GRÁFICO), cujo funcionamento será detalhado em breve. Neste bloco tem-se a função de impressão dos resultados numéricos.

Bloco - Torre. Este bloco é responsável pela apresentação dos resultados referentes à torre em si, como diâmetro, pressão, temperatura, altura, forma do recheio, material do recheio, dimensão do recheio e o valor do coeficiente de transferência de massa K_{Ya} .

Bloco - Subst. Este bloco é responsável pelo cálculo de uma importante propriedade: $(L/G)_{\text{MÍNIMO}}$ e pela apresentação dos resultados referentes às substâncias em operação na torre, como os nomes do líquido, do gás, do soluto, os valores de $(L/G)_{\text{ATUAL}}$ e $(L/G)_{\text{MÍNIMO}}$, das vazões de entrada do gás e do líquido na torre, e os valores da fração molar do soluto no líquido e no gás nos pontos de entrada e saída da torre.

Bloco - Gráfico. Este bloco é responsável pela apresentação dos principais gráficos que existem na operação de absorção: curva de equilíbrio, reta de operação e reta com $(L/G)_{\text{MÍNIMO}}$. A Figura 9 mostra esta tela.

O botão GRÁFICO é usado para construir o gráfico (são calculados 1000 pontos com as equações de cada curva e estes são ligados entre si por um segmento de reta) e o botão IMPRIMIR quando se deseja ter uma cópia impressa do mesmo.

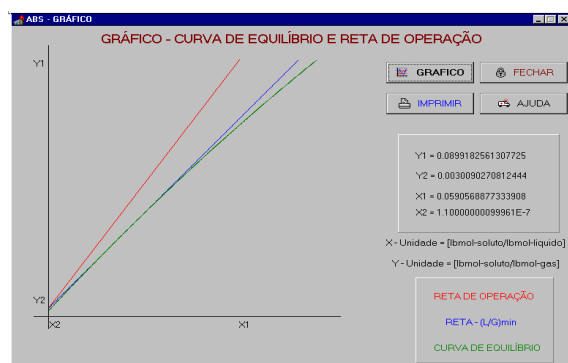


Figura 9. Ilustração da tela de resultados gráficos

Resultados

A referência (Welty, J.R.; Wicks, C.E. e Wilson, R.E. *Fundamentals of Heat Momentum and Mass Transfer*, New York: John Wiley & Sons, 1984) apresenta um exemplo, no qual deve-se determinar a altura de uma torre de absorção. O valor obtido pelos autores para a altura da coluna é de 11ft. Abaixo estão os dados fornecidos para o cálculo da altura da torre:

Temperatura: 68°F

Pressão: 1 atm

Diâmetro: 0,506 ft

Gás: AR

PM: 28,9 lb/lbmol

Vazão de Entrada: 23400 ft³/h

Líquido: Água

PM: 18 lb/lbmol

Vazão de Entrada: 1476 lb/h

Soluto: Amônia

PM: 17 lb/lbmol

Fração Molar na Entrada de Líquido: 0,0

Fração Molar na Entrada de Gás: 0,0825

Fração Molar na Saída de Gás: 0,003

Coefficiente Global de Transferência de Massa - $K_{ya} = 276$ lbmol/h.ft³.ΔY

Tabela 2. Dados de equilíbrio ÁGUA, AR, AMÔNIA a 68°F e 1 atm

Fração Molar	1	2	3	4	5
X - [lbmol -amônia / lbmol- água]	0,0164	0,0252	0,0349	0,0455	0,0722
Y - [lbmol -amônia / lbmol- água]	0,021	0,032	0,042	0,053	0,080

O software desenvolvido obtém um valor de 10,68ft para a altura da torre operada com as condições acima. A diferença entre o valor obtido pelo software e o fornecido por Welty *et al.* (1984:693) é muito pequena e deve-se, fundamentalmente, à forma de cálculo da integral.

O programa apresenta, ainda, resultados gráficos. Mais exatamente, são construídas três curvas referentes à Reta de Operação, Reta com inclinação igual a $(L/G)_{\text{MÍNIMO}}$ e Curva de Equilíbrio. Tal gráfico pode ser visto na Figura 9.

Uma análise da Figura 9 mostra que os gráficos traçados pelo programa estão de acordo com a teoria da absorção: não há nenhum valor negativo, a reta de operação não é secante à curva de equilíbrio, a reta com inclinação igual a $(L/G)_{\text{MÍNIMO}}$ possui inclinação menor que a reta de operação é tangente à curva de equilíbrio.

Não foram encontrados dados teóricos para analisar os resultados quando o usuário deseja que o programa calcule o valor do coeficiente global de transferência de massa. Entretanto, quando essa situação ocorre, o valor calculado para a altura apresenta um maior erro. Isto se deve ao fato de ser usada uma correlação experimental para o cálculo do coeficiente global de transferência de massa e as correlações usadas no programa (apresentadas por Foust *et al.*, 1982) podem apresentar desvios de até 20%. Outro fator de erro está na confiabilidade dos valores fornecidos para propriedades das substâncias em operação na torre, como densidade, viscosidade, coeficiente de difusão e outros.

Este programa é uma ferramenta que pode ser utilizada para o aprendizado e simulação do projeto de colunas de absorção com determinadas características, tais como: torre de recheio, operação isotérmica e em contracorrente e absorção de um componente e em regime permanente. Como foi desenvolvido em ambiente WINDOWS, este software possui uma interface amigável com o usuário. Os resultados apresentados apresentam boa precisão quando o valor do coeficiente global de transferência de massa for fornecido. Caso este valor tiver que ser calculado por uma das correlações utilizadas pelo programa, a precisão dos resultados é menor, pela imprecisão das mesmas.

Referências bibliográficas

- Cantu, M. *Dominando o Delphi 2: a Bíblia*. São Paulo: Makron Books do Brasil, 1997.
- Coulson, J.M.; Richardson, J.F.; Backhurst, J.R.; Harker, J.H. *Chemical engineering—particle technology and separation process*. London: Butterworth-Heinemann, 1993.
- Foust, A.S.; Wenzel, L.A.; Clump, C.W.; Maus, L.; Anderson, L.B. *Princípios da operações unitárias*. Rio de Janeiro: LTC, 1982.
- McCabe, W.L.; Smith, J.C.; Harriott, P. *Unit operation of chemical engineering*. Singapore: McGraw-Hill Book, 1993.
- Perry, R.H. *Perry's Chemical engineers' handbook*. Singapore: McGraw-Hill Book, 1984.

Treybal, R.E. *Mass-transfer operations*. New York: McGraw-Hill Book, 1980.

Ruggerio, M.A.G.; Lopes, V.L.R. *Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais*. São Paulo: McGraw-Hill, 1988.

Sherwood, T.K.; Pigford, R.L. *Absorption and extraction*. New York: McGraw-Hill Book, 1952.

Welty, J.R.; Wicks, C.E.; Wilson, R.E. *Fundamentals of heat momentum and mass transfer*. New York: John Wiley & Sons, 1984.

Received on November 13, 1998.

Accepted on November 28, 1998.