

**Uirajara Vieira Jr.**

**Análise Exergética de uma Planta Produtora de  
Acetaldeído**

**Dissertação apresentada à Escola  
Politécnica da Universidade de  
São Paulo para obtenção do título  
de Mestre em Engenharia**

**Área de concentração:  
Energia e Fluidos**

**Orientador:  
Silvio de Oliveira Júnior**

**São Paulo  
2004**

Uirajara Vieira Jr.

**Análise Exergética de uma Planta Produtora de  
Acetaldeído**

Dissertação apresentada à Escola  
Politécnica da Universidade de  
São Paulo para obtenção do título  
de Mestre em Engenharia

São Paulo  
2004

*À minha amada  
esposa e aos meus filhos*

## Agradecimentos

Nenhum trabalho é a realização de um esforço de apenas uma pessoa, e aqui não poderia ser diferente. Eu gostaria de agradecer as pessoas que através de sugestões, paciência ou apoio contribuíram para a conclusão deste trabalho.

Primeiro ao professor Silvio de Oliveira Jr. Pela oportunidade e confiança depositadas, mesmo nos momentos em que tudo parecia por um fio. Ainda pela tranquilidade e segurança transmitidas.

Aos professores da Faculdade de Engenharia Mecânica da EPUSP, em especial aos professores Guenther Carlos Krieger Filho e Jurandir Itizo Yanagihara, pelas sugestões e opiniões, sempre relevantes e transmitidas com cuidado.

Aos colegas da Copenor Cia Petroquímica do Nordeste SA, que possibilitaram e incentivaram a realização deste trabalho, em especial aos srs. Ronaldo Rego, Esteban Santic e Luis Cláudio Gaino.

Ao meu pai, eterno incentivador e vigilante dos meus prazos. À minha mãe, pela sua torcida e orações, não diminuídas pela distancia. A todos os meus familiares que participaram destes momentos, em especial a minha sogra.

Por fim, à minha amada esposa Elisa, pelo seu companheirismo e carinho, sempre suavizando o caminho. E aos meus filhos, incentivo e razão final de tudo.

## Resumo

Este trabalho propõe um modelo termodinâmico para avaliar a eficiência de um processo de produção industrial de acetaldeído via oxidação parcial de etanol, bem como uma alternativa de processamento com uso mais racional da energia térmica necessária. Empregou-se análise exergética como ferramenta de avaliação. Foi elaborado um modelo capaz de avaliar as propriedades termodinâmicas das misturas envolvidas no processo, considerando fase vapor ideal e fase líquida corrigida pela equação de Wilson. A pressão mais alta do sistema ocorre na torre de destilação de acetaldeído e é igual a 345 kPa. O sistema de equações não-linear, gerado pelos balanços de massa, energia e exergia da planta é resolvido simultaneamente pelo método de Newton, no software EES. As irreversibilidades da planta totalizam 1.076 kW, ou 5.165 kJ/kg de acetaldeído produzido, os principais pontos de geração de irreversibilidades são o reator, com 458 kW, a caldeira de recuperação, com 118 kW, a torre de absorção, com 105 kW e a torre de destilação, com 247 kW. O modelo alternativo sugerido apresenta 925 kW de irreversibilidade, o que representa 14,7% de redução de irreversibilidade. As principais mudanças sugeridas ocorreram na torres de absorção e destilação de acetaldeído. Uma nova rede de recuperação de calor também foi sugerida, o que provocou uma redução de 28 kW nas irreversibilidades.

Palavras chaves: energia, exergia, análise exergética, acetaldeído, modelagem, industrial

## Abstract

This work develops a thermodynamic model to assess the industrial acetaldehyde production by ethanol partial oxidation, and proposes another plant configuration in order to use the thermal energy more efficiently. Exergetic analysis was used as evaluation tool. The model was able to predict all relevant thermodynamics properties of the process streams. The vapor phase was considered ideal, while the non-ideality on liquid phase was corrected by Wilson equation. The highest pressure in the process occurs in the acetaldehyde distillation tower – 350 kPa. The non-linear equation system generated by the mass, energy and exergy balances is solved by a Newton algorithm, in the EES software. The irreversibility sums 1076 kW – 5165 kJ/kg acetaldehyde. The irreversibilities are mainly produced in the oxidation reactor (48kW), in the waste heat boiler (118kW), in the acetaldehyde absorption tower (105kW) and the distillation tower (247kW). The new approach reduces the irreversibilities to 925 kW, which represents 14,7%. The modifications were made in the absorption and distillation tower and a new heat exchanger network caused 28 kW reduction.

Key words: energy, exergy, exergetic analysis, acetaldehyde, modeling, industrial

## Nomenclatura

### Símbolos Latinos

<b><i>a, b, c, d</i></b>	coeficiente de polinômios
<b><i>A</i></b>	parâmetro equação de Wilson
<b><i>BL</i></b>	saída lateral de líquido de um estágio de equilíbrio [kmol/s]
<b><i>Cp</i></b>	calor específico a pressão constante [kJ/kmol.K]
<b><i>Cv</i></b>	calor específico a volume constante [kJ/kmol.K]
<b><i>ex</i></b>	exergia específica [kJ/kmol]
<b><i>Ex</i></b>	exergia [kJ]
<b><i>ExF</i></b>	exergia específica alimentação estágio de equilíbrio [kJ/kmol]
<b><i>ExL</i></b>	exergia específica do líquido [kJ/kmol]
<b><i>ExV</i></b>	exergia específica do vapor ou gás [kJ/kmol]
<b><i>F</i></b>	vazão de alimentação de um estágio de equilíbrio [kmol/s]
<b><i>g</i></b>	entalpia livre de Gibbs [kJ/kmol]
<b><i>h</i></b>	entalpia específica [kJ/kmol]
<b><i>H</i></b>	entalpia [kJ]
<b><i>HF</i></b>	entalpia específica alimentação estágio de equilíbrio [kJ/kmol]
<b><i>HL</i></b>	entalpia específica do líquido [kJ/kmol]
<b><i>HV</i></b>	entalpia específica do vapor ou gás [kJ/kmol]
<b><i>K</i></b>	coeficiente de partição líquido-vapor
<b><i>L</i></b>	fluxo de líquido de um estágio de equilíbrio [kmol/s]
<b><i>p</i></b>	pressão [kPa]
<b><i>P</i></b>	pressão de vapor [kPa]
<b><i>Q</i></b>	fluxo de calor [kW]
<b><i>R</i></b>	constante universal dos gases [8,314 kJ/kmol.K]
<b><i>RFLX</i></b>	vazão de refluxo da torre de destilação ( $k=9$ ) [kmol/s]
<b><i>s</i></b>	entropia específica [kJ/kmol.K]
<b><i>S</i></b>	entropia [kJ/kmol.K]
<b><i>T</i></b>	temperatura [K]
<b><i>U</i></b>	irreversibilidade [kW]
<b><i>UA</i></b>	capacidade de transferência de calor da superfície [kW/K]
<b><i>V</i></b>	fluxo de vapor de um estágio de equilíbrio [kmol/s]
<b><i>W</i></b>	trabalho [kW]

<b>x</b>	concentração da fase líquida [kmol/kmol]
<b>y</b>	concentração da fase vapor [kmol/kmol]
<b>z</b>	concentração de alimentação do estágio [kmol/kmol]

### Símbolos Gregos

$\alpha, \beta$	parâmetros binários da equação de Wilson
$\chi_2$	conversão de etanol
$\chi_4$	conversão de oxigênio
$\gamma$	coeficiente de atividade; razão entre $C_p/C_v$
$\eta_{ex}$	rendimento exergético
$\eta_1$	rendimento em acetaldeído
$\eta_{poli}$	rendimento politrópico
$\theta$	coeficiente de Carnot
$\sigma$	entropia produzida [kJ/K]
$\nu$	coeficiente estequiométrico

### Subscritos

<b>ex</b>	exergético
<b>fis</b>	parcela física da exergia
<b>g</b>	gás ou vapor
<b>i</b>	espécie química
<b>j</b>	estágio de equilíbrio
<b>k</b>	equipamento
<b>l</b>	líquido
<b>mis</b>	parcela variação exergia devido a mistura
<b>ref</b>	condição de referência
<b>quim</b>	parcela química da exergia
<b>1</b>	estado inicial, acetaldeído, esgotamento etanol
<b>2</b>	estado final, etanol, evaporador
<b>3</b>	água, soprador
<b>4</b>	oxigênio, pré-aquecedor mistura
<b>5</b>	nitrogênio, reator
<b>6</b>	hidrogênio, absorção de acetaldeído
<b>7</b>	dióxido de carbono, resfriamento intermediário



<b>8</b>	lavadora de gases
<b>9</b>	destilação de acetaldeído
<b>10</b>	caldeira de recuperação
<b>12</b>	pré-aquecedor de reciclo
<b>13</b>	resfriador efluente
<b>14</b>	pré-aquecedor reciclo
<b>15</b>	pré-aquecedor alimentação
<b>16</b>	resfriador líquido de lavagem
<b>17</b>	resfriador liquido de lavagem

### **Superescrito**

<b><i>b</i></b>	fora do volume de controle
<b><i>0</i></b>	referência (298 K, 101, 3 kPa)
<b>•</b>	quantidade por unidade de tempo [1/s]
<b>—</b>	valor médio

## Índice de Tabelas

Tabela 2.1: Capacidade de produção de acetaldeído na América do Sul, 4

Tabela 2.2: Identificação dos equipamentos, 5

Tabela 3.1: Componentes do modelo, 24

Tabela 3.2: Cp gás e valores padrão, 25

Tabela 3.3: Cp líquido e valores padrão, 26

Tabela 3.4: Pressão de vapor, 28

Tabela 3.5: Solubilidade dos gases, 29

Tabela 3.6: Parâmetros da equação de Wilson, 29

Tabela 4.1: Pontos escolhidos de medição, 39

Tabela 4.2: Valor medido versus estimado – vazões, 41

Tabela 4.3: Valor medido versus estimado – temperaturas, 41

Tabela 4.4: Valor medido versus estimado – pressões, 42

Tabela 4.5: Quadro resumo da simulação do modelo original, 44

Tabela 4.6: Quadro resumo da simulação do modelo alternativo, 59

Tabela 4.7: Potencia térmica do processo, 63

## Índice de Figuras

Figura 2.1: Fluxograma de processo, 9

Figura 3.1: Estágio de equilíbrio, 31

Figura 3.2: Modelo reator de acetaldeído, 36

Figura 4.1: Fluxograma de processo original, 40

Figura 4.2: Perfil de temperatura da torre de destilação de acetaldeído  
, 45

Figura 4.3: Fluxo interno da torre de destilação de acetaldeído, 46

Figura 4.4: Entalpia específica ao longo da torre de destilação de acetaldeído –  
configuração original, 46

Figura 4.5: Exergia específica ao longo da torre de destilação de acetaldeído –  
configuração original, 47

Figura 4.6: Perfil de concentração da torre de destilação de acetaldeído –  
configuração original, 47

Figura 4.7: Exergia destruída ao longo da torre de destilação de acetaldeído –  
configuração original, 48

Figura 4.8: Perfil de temperatura da torre de absorção de acetaldeído –  
configuração original, 51

Figura 4.9: Fluxo interno da torre de absorção de acetaldeído – configuração  
original, 49

Figura 4.10: Entalpia específica ao longo da torre de absorção de acetaldeído –  
configuração original, 50

Figura 4.11: Exergia específica ao longo da torre de absorção de acetaldeído –  
configuração original, 51

Figura 4.12: Perfil de concentração de líquido da torre de absorção de  
acetaldeído – configuração original, 51

Figura 4.13: Perfil de concentração de vapor da torre absorção de acetaldeído  
– configuração original, 52

Figura 4.14: Remoção de calor torre da absorção de acetaldeído –  
configuração original, 52

Figura 4.15: Exergia destruída ao longo da torre de absorção de acetaldeído –  
configuração original, 53

Figura 4.16: Perfil de temperatura da torre de esgotamento de etanol –  
configuração original, 54

Figura 4.17: Fluxo interno da torre de esgotamento de etanol – configuração  
original, 54

Figura 4.18: Entalpia específica ao longo da torre de esgotamento de etanol –  
configuração original, 55

Figura 4.19: Exergia específica ao longo da torre de esgotamento de etanol –  
configuração original, 55

Figura 4.20: Perfil de concentração da torre de esgotamento de etanol –  
configuração original, 55

Figura 4.21: Exergia destruída ao longo da torre de esgotamento de etanol – configuração original, 56

Figura 4.22: Fluxograma de processo alternativo, 58

Figura 4.23: Comparação irreversibilidade da torre de absorção (configuração original versus alternativa), 60

Figura 4.24: Comparação irreversibilidade da torre de destilação de acetaldeído (configuração. original versus alternativa), 61

Figura 4.25: 4.25: Perfil de concentração da torre de destilação – configuração alternativa, 62

## **Sumário**

### **Capítulo 1**

#### **Introdução, 1**

### **Capítulo 2**

#### **Revisão bibliográfica**

- 2.1 Produção industrial de acetaldeído, 3
- 2.2 Produção de acetaldeído via oxidação parcial de etanol, 5
- 2.3 Fundamentos da análise exergética, 10
  - 2.3.1 Introdução, 10
  - 2.3.2 Definição de exergia, 11
  - 2.3.3 Estado de referencia, 11
  - 2.3.4 Componentes da exergia, 12
  - 2.3.5 Balanço de exergia, 14
  - 2.3.6 Rendimento exergético, 15
  - 2.3.7 Análise termodinâmica de processo, 15

### **Capítulo 3**

#### **Modelo Termodinâmico**

- 3.1 Introdução, 23
- 3.2 Fase vapor, 24
- 3.3 Fase líquida, 26
- 3.4 Equilíbrio líquido vapor, 28
- 3.5 Coeficiente de atividade, 29
- 3.6 Modelo dos equipamentos, 30
  - 3.6.1 Introdução, 30
  - 3.6.2 Estágio de equilíbrio, 31
  - 3.6.3 Múltiplos estágios de equilíbrio, 33

- 3.6.4 Trocadores de calor, 33
- 3.6.5 Compressor, 5
- 3.6.6 Reator, 36
- 3.7 Premissas do modelo, 38

## **Capítulo 4**

### **Resultados e discussão**

- 4.1 Validação do modelo
  - 4.1.1 Introdução, 39
- 4.2 Resultados da simulação
  - 4.2.1 Introdução, 43
  - 4.2.2 Modelo original, 43
    - 4.2.2.1 Destilação de acetaldeído ( $k=9$ ), 45
    - 4.2.2.2 Absorção de acetaldeído ( $k=6$ ), 49
    - 4.2.2.3 Esgotamento de etanol ( $k=1$ ), 53
  - 4.2.3 Modelo Alternativo, 55

## **Capítulo 5**

### **Conclusões e recomendações**

- 5.1 Conclusões, 64
- 5.2 Sugestões, 65

### **Referencias bibliográficas, 67**

## **Apêndice I**

### **Dados de operação da planta de acetaldeído**

- AI.1 Vazões, A-1
- AI.2 Temperaturas, A-7
- AI.3 Pressões, A13

## ***Apêndice II***

### **Resultados da simulação da configuração original**

- AII.1 Introdução, AII-1
- AII.2 Balanço de massa, AII-2
- AII.3 Balanço de energia e exergia, AII-5
- AII.4 Simulação esgotamento de etanol ( $k=1$ ), AII-6
- AII.5 Simulação absorção de acetaldeído ( $k=6$ ), AII-8
- AII.6 Simulação destilação de acetaldeído ( $k=9$ ), AII-10

## ***Apêndice III***

### **Resultados da simulação modelo da configuração alternativa**

- AIII.1 Introdução, AIII-1
- AIII.2 Balanço de massa, AIII-2
- AIII.3 Simulação esgotamento de etanol ( $k=1$ ), AIII-6
- AIII.4 Simulação absorção de acetaldeído ( $k=6$ ), AIII-8
- AIII.5 Simulação destilação de acetaldeído ( $k=9$ ), AIII-10

## ***Apêndice IV***

### **Listagem do código EES**

- AIV.1 Lista de funções, AIV-1
- A.2 Primeiro bloco de equações, AIV-8
- A.3 Segundo bloco de equações, AIV-20
- A.3 Terceiro bloco de equações, AIV-28



## **Capítulo 1**

### **Introdução**

A análise exergética é uma aplicação sistemática das duas leis fundamentais da termodinâmica, em particular a segunda, para a análise e otimização energética de processos e sistemas industriais. É uma importante ferramenta que permite considerar a qualidade da energia e determinar os principais pontos de ineficiência no uso da energia num processo industrial.

O objetivo desta tese é duplo, primeiro criar um modelo termodinâmico capaz de estimar os balanços de massa e energia de uma planta química, bem como as irreversibilidades existentes no processo. O segundo objetivo é, utilizando as informações geradas pelo modelo, propor uma alternativa mais racional de processamento, de tal modo que a destruição de exergia do processo alternativo seja menor que a do original.

O processo utilizado como objeto de análise foi uma planta produtora de acetaldeído via oxidação parcial de etanol. Os dados operacionais da planta foram utilizados para comparação e validação do modelo termodinâmico desenvolvido.

No capítulo 2 é apresentado primeiro o processo de produção de acetaldeído via oxidação parcial de etanol, bem como um panorama da evolução desta tecnologia. Em seguida, neste mesmo capítulo, apresentam-se os fundamentos da análise exergética e os conceitos necessários para o seu entendimento.

Uma revisão dos trabalhos encontrados na literatura nos últimos anos encerra este capítulo.

O capítulo 3 apresenta o modelo termodinâmico desenvolvido. Aqui se demonstra como cada propriedade termodinâmica é avaliada e apresentam-se os parâmetros utilizados para avaliar estas propriedades.

No capítulo 4 os resultados numéricos do modelo termodinâmico, desenvolvido no capítulo anterior, são comparados com os dados operacionais da planta produtora de acetaldeído, a fim de validar o modelo, em seguida um novo esquema de processamento é sugerido e modelado. A destruição de exergia dos dois modelos é comparada, com o objetivo de definir qual o melhor arranjo, do ponto de vista termodinâmico. O desempenho dos principais equipamentos de separação é discutido em pormenores.

No capítulo 5 conclui a discussão iniciada anteriormente, definindo qual o esquema de processamento mais adequado. Sugestões de novas abordagens para continuação deste trabalho são apresentadas aqui.

## **Capítulo 2**

### **Revisão Bibliográfica**

#### **2.1 Produção industrial de acetaldeído**

Acetaldeído (algumas vezes chamado etanal) é um líquido incolor e pungente que possui ponto normal de ebulição igual a 294 K, o que demanda sistemas de armazenagem com pressões acima da ambiente (101,3 kPa). O acetaldeído é um intermediário químico que pode ser utilizado na produção de diversos outros químicos, destacando-se o ácido acético, ésteres acéticos, acetato de vinila, butiraldeído (este utilizado para produção n-butanol), piridina e pentaeritritol. O trabalho de JOHNSON et al. (1998) descreve os principais métodos de produção do acetaldeído, bem como a evolução da produção deste no mundo desde 1960.

Existem dois processos principais de produção de acetaldeído: a oxidação em fase líquida do etileno e a oxidação parcial do etanol. No primeiro destes processos faz-se uso de um catalisador de paládio e cloreto de cobre para promover a oxidação direta do etileno. Este processo foi desenvolvido no final dos anos 50 pela empresa Hoechst e Wacker-Chemie; o rendimento, entendido como a razão entre a quantidade de acetaldeído produzida e a de etanol consumida, está entre 93 e 94% do teórico. Toda a produção norte-americana, japonesa e da maior parte da Europa ocidental é realizada via oxidação de etileno. O etanol é utilizado como matéria prima para produção de acetaldeído na América Latina e em alguns locais da Ásia.

O outro processo principal de produção de acetaldeído é a oxidação parcial do etanol. Neste processo a oxidação ocorre durante a passagem da mistura de vapor de etanol e ar através de um leito catalítico de prata a uma temperatura entre 800 K e 900 K.

A tabela 2.1 mostra os principais produtores de acetaldeído na América do Sul.

**Tabela 2.1: Capacidade de produção de acetaldeído na América do Sul**

Companhia e local da	Capacidade anual	Notas
Atanor S/A; Argentina	5.000	Oxidação etanol
Cloretil Solventes; Brasil	4.500	Oxidação etanol
Elekeiroz; Brasil	16.000	Oxidação etanol;
Copenor; Brasil	5.000	Oxidação etanol
Rhodia; Brasil	26.000	Oxidação etanol
Oxiquim; Chile	3.200	Oxidação etanol
Total	59.700	

A produção de acetaldeído no mundo vem declinando desde 1964 devido principalmente a dois acontecimentos: primeiro a evolução da tecnologia de produção de ácido acético, não mais utilizando acetaldeído como matéria prima, mas metanol; e segundo a substituição do acetaldeído por propileno para produção de butiraldeído. Segundo JONHSON et al. (1998) os principais usos para o acetaldeído são a produção de bases de piridina para produção de defensivos agrícolas - principal consumo de acetaldeído nos EUA, perto de 40% - e a produção de pentaeritritol e ainda ácido acético – principal uso na América Latina.

## 2.2 Produção de acetaldeído via oxidação parcial de etanol

No texto que segue há uma descrição do processo de produção de acetaldeído via oxidação parcial de etanol. Um fluxograma simplificado do processo produtivo encontra-se presente também, a fim de auxiliar o entendimento da descrição. As correntes de fluxo são identificadas com números dentro de círculos, e os equipamentos principais através de números. A tabela 2.2 faz a relação entre os números identificadores dos equipamentos com os seus nomes e funções:

**Tabela 2.2: Identificação dos equipamentos**

k	Nome	k	Nome
1	Esgotamento de etanol	10	Caldeira de recuperação
2	Evaporador de mistura reacional	11	Equipamento não simulado
3	Soprador de ar	12	Pré-aquecedor de reciclo
4	Pré-aquecedor de mistura reacional	13	Resfriador de efluente
5	Reator	14	Pré-aquecedor de reciclo
6	Torre de absorção de acetaldeído	15	Pré-aquecedor de alimentação torre (k=9)
7	Resfriador intermediário	16	Resfriador de líquido de lavagem torre (k=6)
8	Lavadora de gases	17	Resfriador de líquido de lavagem torre (k=8)
9	Destiladora de acetaldeído		

O etanol com 94% de concentração em massa é alimentado no topo da torre de esgotamento de etanol (k=1); o vapor do topo desta torre, uma mistura etanol-água, alimenta o evaporador (k=2). Também se alimenta o evaporador com ar atmosférico através de um soprador, formando assim a mistura

reacional ar, etanol e água. A função deste evaporador é manter a mistura reacional concentrada, isto é, com excesso de etanol, de tal modo que a mesma esteja acima do limite superior de explosividade da mistura etanol-ar. O controle da mistura é feito através da temperatura, pressão e da concentração de etanol na fase líquida do evaporador, pois uma vez fixadas todas estas variáveis a concentração da fase vapor está definida.

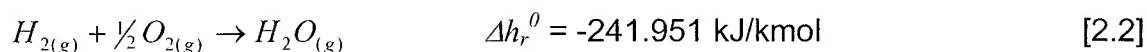
A mistura ar, etanol e água deixa o evaporador ( $k=2$ ) a aproximadamente 340 K e passa através de um trocador de calor ( $k=4$ ), onde é aquecida até 400 K com vapor de 550 kPa. O objetivo do aquecimento é ultrapassar a temperatura de orvalho da mistura e evitar que gotas de etanol ou água condensem sobre o leito catalítico.

Em seguida a mistura reacional entra no reator, onde o etanol será convertido a acetaldeído segundo a seguinte reação:

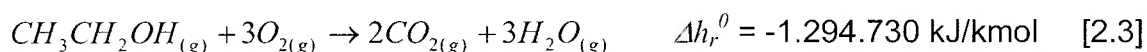


A reação [2.1] é endotérmica e, portanto necessita de energia para se manter.

A energia para sustentar a reação de desidrogenação é dada pela oxidação do hidrogênio,



A oxidação total do etanol também ocorre, mas em escala bem menor, contribuindo com energia para a reação de desidrogenação,



A reação se dá de forma adiabática sobre um leito catalítico de prata. A temperatura da corrente após reator está entre 800 K e 900 K. Uma caldeira de

recuperação de calor ( $k=10$ ) recebe saída do reator e resfria a mesma até 443 K, a energia removida é utilizada para geração de vapor de 550 kPa.

A conversão do etanol, no entanto é baixa, na ordem de 50%, sendo necessária a recuperação do mesmo após a reação. A mistura, após sair da caldeira de recuperação, alimenta uma torre de absorção ( $k=6$ ). A função deste equipamento é resfriar e condensar a água e o acetaldeído produzidos, bem como o etanol residual. Este resfriamento se faz por contato direto entre uma corrente fria de etanol e água proveniente da torre seguinte ( $k=9$ ). A remoção da energia é feita com água de resfriamento através de três trocadores de calor, dois resfriando a corrente que vem da torre ( $k=9$ ) e alimenta o topo da torre ( $k=6$ ), e outro que funciona como arrefecedor intermediário. Além destes trocadores de calor a torre ( $k=6$ ) possui serpentinas de resfriamento em todos os pratos. Os gases saem pelo topo da torre ( $k=6$ ) e o etanol, a água e o acetaldeído condensados pelo fundo. A corrente de fundo da torre ( $k=6$ ) alimenta a torre seguinte ( $k=9$ ) onde será efetuada a separação do acetaldeído dos outros dois componentes. Os gases, nitrogênio e oxigênio do ar, bem como dióxido de carbono e hidrogênio gerados durante a reação, escapam a 308 K pelo topo da ( $k=6$ ), levando junto etanol em equilíbrio. Para remover o etanol desta corrente resfriam-se os gases até 288 K num trocador de contato direto onde o fluido de arrefecimento é água a 285 K. O etanol condensado junto com a água é então recolhido e envidado para a torre ( $k=1$ ) onde o etanol será recuperado. Antes da corrente de etanol diluído entrar na torre ( $k=1$ ) esta é pré-aquecida pela corrente que deixa o fundo da ( $k=1$ ). Os gases isentos de etanol e acetaldeído são lançados na atmosfera.

O acetaldeído na coluna de destilação ( $k=9$ ) sai pelo topo a uma concentração superior a 99,5% em massa, enquanto que pelo fundo obtém-se uma mistura quase 1:1 de etanol e água. A corrente de fundo é parcialmente enviada para a ( $k=6$ ) como fluido de contato e o restante encaminhado para a coluna de esgotamento de etanol ( $k=1$ ), onde será recuperado. Aqui também a corrente de etanol e água antes de entrar na coluna ( $k=1$ ) passa por um trocador de calor onde irá pré-aquecer a corrente de etanol novo que alimenta o topo da coluna.

O fundo da coluna ( $k=1$ ) é praticamente água contaminada com um pouco de etanol, ácido acético (formado durante a reação em pequena quantidade) e outras pequenas impurezas do etanol. Esta água contaminada será enviada para tratamento de efluentes.



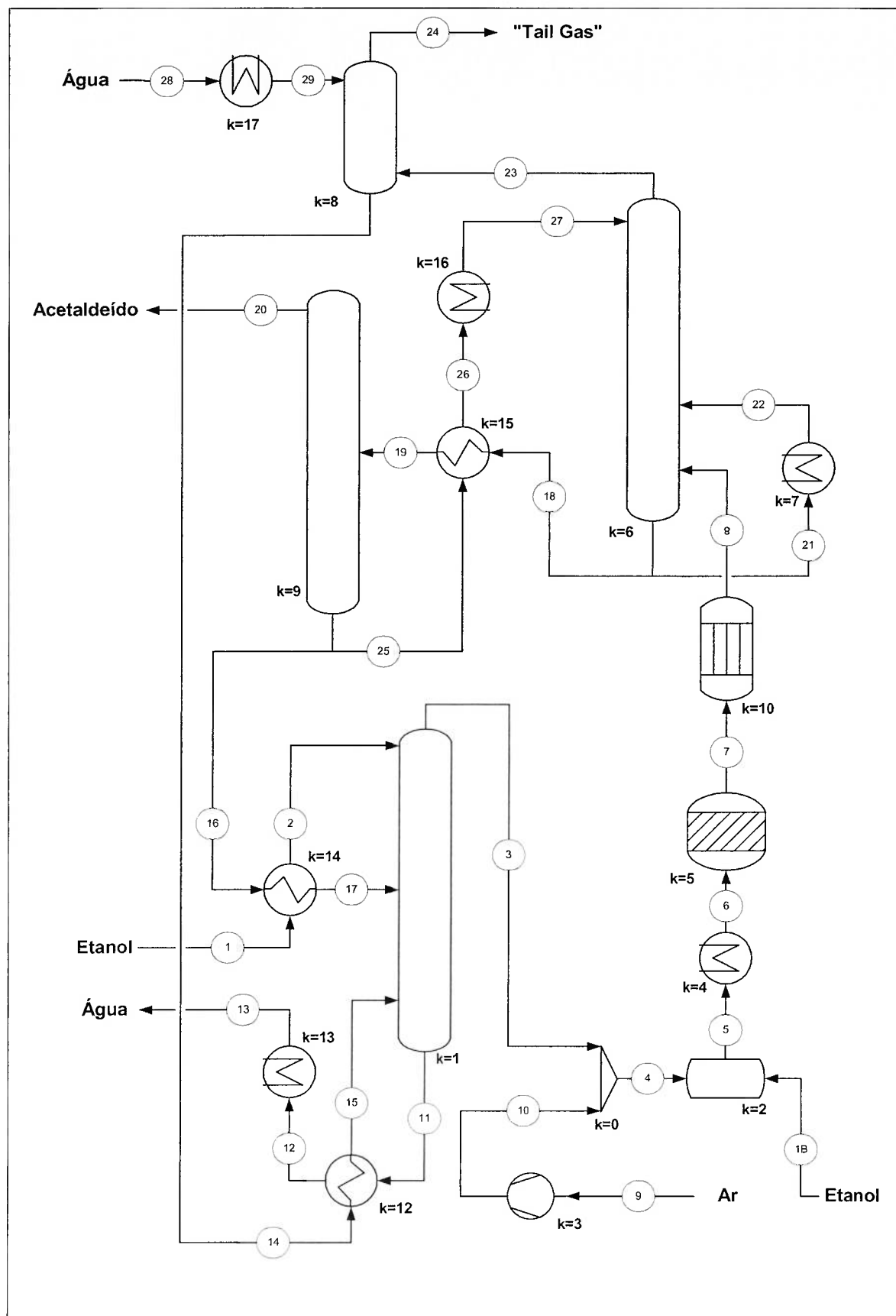


Fig 2.1: Fluxograma de processo

## 2.3 Fundamentos da análise exergética

### 2.3.1 Introdução

A exergia de um sistema reflete a sua capacidade de causar mudança, SZARGUT (1988); a análise exergética é um método universal para análise da eficiência de processos, térmicos ou não, baseado no conceito de exergia. Ela envolve uma certa quantidade computação numérica e pode ser aplicada em qualquer objeto físico ou sistema, desde carros e utensílios domésticos até refinarias de petróleo. A sua proposta é analisar e minimizar a destruição de exergia, que pode ser interpretada como a minimização do uso da energia. Quando se quer otimizar um processo o conceito de exergia dá indicação onde procurar.

Embora Carnot tenha formulado a base do método da análise exergética ainda em 1824, a sua disseminação como ferramenta de análise começou apenas recentemente, DE JONG et al. (1996) sugere dois motivos: a abordagem matemática necessária para avaliação da exergia, e a dificuldade de interpretação do significado da eficiência exergética.

A utilização da análise exergética permite avaliar as ineficiências de processos industriais, mostrando claramente as irreversibilidades, normalmente causadas por processos como a combustão, a transferência de calor, a mistura, a perda de carga num escoamento, que através da análise energética convencional continuariam mascarados.

O desenvolvimento do método exergético, baseado em OLIVEIRA JR (1996), permite avaliar os valores de exergia associados a cada um dos fluxos, de massa e energia, de um processo. O conhecimento destes valores possibilita

estimar as perdas exegéticas de cada parte do processo, bem como a eficiência termodinâmica, tanto global como local.

### **2.3.2 Definição de exergia**

É a quantidade máxima de trabalho que um sistema qualquer pode realizar quando evolui do seu estado inicial para um estado de equilíbrio mecânico, térmico e químico com o meio de referência. Em outras palavras, se um determinado sistema, completamente definido em seu estado pela temperatura, pressão e potencial químico, fosse colocado em contato o meio ambiente (definido como estado de referência) através de uma máquina térmica ideal, o trabalho máximo realizado por esta máquina denominar-se-ia exergia.

### **2.3.3 Estado de referência**

Do parágrafo anterior tem-se que o conceito de exergia depende do estado de referência. Esta referência, por definição, é o meio ambiente. Entenda-se por meio ambiente as cercanias do sistema em questão, cujas propriedades que o definem (pressão, temperatura e potencial químico) não se alterem ao longo da interação com o sistema. O estado de referência é homogêneo, de modo que não possibilidade de realização trabalho através da interação entre partes que o compõe. O meio ambiente, assim como foi exposto, não existe no mundo real, sendo apenas uma idealização. Aproxima-se do modelo ideal o ar atmosférico padrão, os oceanos e outras grandes porções de água e a crosta terrestre.

O estado de referência pode ser restrito ou morto. No primeiro caso o sistema atinge o equilíbrio térmico e mecânico com o meio ambiente, ou seja possui a mesma temperatura e a mesma pressão, entretanto não possui o mesmo

potencial químico – as substâncias que constituem o sistema diferem em concentração do meio ambiente. Porém, caso permita-se que o sistema evolua de modo a atingir as mesmas condições de distribuição de substâncias que o meio ambiente, diz-se que este atingiu o estado morto, e a partir daí não é mais possível extrair qualquer trabalho da interação entre o sistema e o meio ambiente.

### 2.3.4 Componentes da exergia

A exergia total de uma corrente material multicomponente escoando em regime estacionário pode ser dividida em três contribuições principais: a exergia química, a exergia física e a variação exergia devido à mistura. Podem-se ainda acrescentar os efeitos da exergia cinética e potencial, porém na maioria dos sistemas estudados estes se encontram em repouso relativo ao meio ambiente, portanto a parcela cinética da exergia é nula, e as diferenças de altura são desprezíveis. Assim, o fluxo de exergia fica:

$$Ex = Ex_{quim} + Ex_{fis} + Ex_{mis} \quad [2.4]$$

A exergia química refere-se à parte total da exergia que resulta da diferença de potencial químico entre os constituintes puros do sistema e os componentes do meio ambiente, avaliados a pressão e temperatura de referência e na concentração apresentada pelo meio ambiente. A exergia química padrão em base molar a partir do estado de referência para uma substância existente no meio ambiente é definida abaixo:

$$ex_{ref,i}^0 = R.T_0 \cdot \ln \left( \frac{p_0}{p_{i,ref}} \right) \quad [2.5]$$

onde  $ex_{ref,i}^0$  representa a exergia química padrão da espécie  $i$ ,  $p_{i,ref}$  é a sua pressão parcial e  $p_0$  é a pressão total de referência e é igual a 101,3 kPa. A expressão geral pela qual a exergia química de um componente pode ser calculada, de acordo com a sua reação de formação, é dada por:

$$ex_i^0 = g_i^0 - \sum (\nu_j \cdot ex_{ref,j}^0) \quad [2.6]$$

onde  $g_i^0$  é a energia livre de Gibbs de reação de formação de  $i$  e  $\nu_j$  é o coeficiente estequiométrico para cada reagente da reação de formação.

A parcela física da exergia é o máximo trabalho que pode ser obtido de uma corrente se esta é trazida de seu estado inicial para o estado de equilíbrio térmico e mecânico – estado restrito.

$$ex_{fis} = (h - h^0) - T_0 (s - s^0) \quad [2.7]$$

A variação da exergia devido à mistura entre os componentes é dada por:

$$ex_{mis} = R \cdot T_0 \sum y_i \ln y_i \quad [2.8]$$

Substituindo as equações de [2.5] a [2.8] em [2.4], chega-se expressão geral da exergia de uma corrente multicomponente em estado estacionário:

$$ex = \sum_i y_i \cdot ex_i^0 + R T_0 \cdot \sum_i y_i \cdot \ln(y_i) + (h - h^0) - T_0 (s - s^0) \quad [2.9]$$

### 2.3.5 Balanço de exergia

A combinação linear entre a Primeira e Segunda leis da Termodinâmica resulta numa equação que modela o comportamento da propriedade exergia. Supondo um volume de controle qualquer, a aplicação da Primeira lei seria, para um escoamento em regime permanente:

$$\dot{Q} - \dot{W} = \dot{H}_{sai} - \dot{H}_{entra} \quad [2.10]$$

Em seguida, para o mesmo volume de controle, nas mesmas condições, o balanço de entropia é:

$$\frac{\dot{Q}}{T} + \dot{\sigma} = \dot{S}_{sai} - \dot{S}_{entra} \quad [2.11]$$

Multiplicando-se a equação anterior por  $(-T_0)$  e somando-se a equação [2.10] tem-se:

$$\left( \dot{H}_{sai} - T_0 \cdot \dot{S}_{sai} \right) - \left( \dot{H}_{entra} - T_0 \cdot \dot{S}_{entra} \right) - \dot{Q} \cdot \left( 1 - \frac{T_0}{T} \right) + \dot{W} + T_0 \cdot \dot{\sigma} = 0 \quad [2.12]$$

A equação acima é o balanço de exergia em torno de um volume de controle para escoamento permanente, e é formada pelos seguintes termos:

$$\dot{Ex}_{sai} - \dot{Ex}_{entra} - \dot{Ex}_{calor} + \dot{W}_{realizado} + \dot{Ex}_{destruída} = 0 \quad [2.13]$$

A última parcela da equação [2.13] representa a exergia destruída  $(T_0 \cdot \sigma)$  pelas irreversibilidades existentes no processo. A equação [2.12] mostra que a capacidade da energia em gerar trabalho degrada-se ao longo do processo, pois a geração de entropia rouba sempre uma parte desta capacidade, diminuindo a qualidade da energia.

### 2.3.6 Rendimento exergético

O rendimento exergético é um parâmetro que permite avaliar o rendimento de um sistema ou equipamento do ponto de vista termodinâmico. Existem diversas formas de se definir a eficiência exergética, algumas delas são:

Grau de perfeição:

$$\eta_p = \frac{\dot{Ex}_{produtos}}{\dot{Ex}_{alimentação}} \quad [2.14]$$

Rendimento exergético:

$$\eta_{ex} = \frac{\sum \dot{Ex}_{sai}}{\sum \dot{Ex}_{entra}} \quad [2.15]$$

Devido às várias formas de equacionar o rendimento, alguns pesquisadores procuraram definir um método geral para calcular o rendimento exergético.

Segundo estes autores o rendimento exergético pode ser encarado como a razão entre um produto gerado e o insumo utilizado.

### 2.3.7 Análise termodinâmica de processo

Os trabalhos de análise termodinâmica de processos podem ser divididos em três categorias, mais ou menos distintas umas das outras, a saber: (i) definição e estimativa dos estados de referência das substâncias químicas, bem como do meio ambiente; (ii) definição, avaliação e comparação dos critérios de eficiência exergética; e finalmente (iii) modelagem, simulação e otimização de processos através da minimização da exergia destruída. A sequência apresentada não foi casual, pois na verdade qualquer trabalho de modelagem, simulação e otimização emprega conceitos e definições das duas primeiras, que poderiam ser consideradas como mais fundamentais. A quantidade de trabalhos publicados nos últimos 10 anos (tempo de abrangência desta revisão) mostra um predomínio de trabalhos versando sobre modelagem e

otimização (aplicação) em relação aos outros dois temas (fundamentos), o que demonstra a maturidade e o vigor atual da análise exergética de processo.

A fim de avaliar a exergia de um determinado fluxo é necessário definir-se o meio ambiente ao qual este fluxo será comparado, bem como a exergia química padrão  $ex^0$  de cada substância que compõem este fluxo; uma das mais tradicionais compilações de exergia padrão e sistematização de avaliação de exergia é fornecida por KOTAS (1985) e define que a exergia de um fluxo de gás é:

$$ex_g = \sum_i y_i \cdot ex_{i,g}^0 + RT_0 \cdot \sum_i y_i \cdot \ln(y_i) + (h_g - h_g^0) - T_0 \cdot (s_g - s_g^0) \quad [2.16]$$

A exergia química padrão de cada substância é avaliada sempre contra um estado de referência, que muitas vezes é o ar atmosférico padrão (no caso dos gases), ou oceano ou a crosta terrestre. É possível, no entanto avaliar a exergia química padrão utilizando somente dados termodinâmicos ( $g_i^0$ ) definidos para os compostos puros, conforme procedimento definido por VAN GOOL (1998). A vantagem deste método é fazer uso de referencias universais e plenamente definidas. HINDERINK et al. (1996) propôs uma nova sistematização para avaliação da exergia de um fluxo de modo distinguir claramente a as divisões entre os componentes físicos e químicos da exergia, assim como a contribuição da mistura no resultado final; embora alterando a forma de avaliar os termos contributivos para o fluxo de exergia, o estado de referencia utilizado é o mesmo preconizado por SZARGUT et al. (1988). O procedimento de cálculo permite ser utilizado num simulador de processo comercial.



A interpretação da eficiência exergética, ao contrário da eficiência energética, não é perfeitamente claro para a maioria das pessoas. Uma consequência deste fato foi o atraso na generalização do uso da análise exergética como ferramenta de avaliação de processos. Uma das primeiras formas de avaliação de eficiência de acordo com a 2ª lei foi proposta por Grassman em 1950:

$$\eta_{ex} = \frac{\sum \dot{Ex}_{sai}}{\sum \dot{Ex}_{entra}} \quad [2.17]$$

Entretanto a equação [2.17] apresenta um problema: a parcela devido a exergia química é muito maior que as outras. Isto pode causar desde problemas numéricos, até perda de significado, quando, por exemplo, compara-se a eficiência de uma bomba transportando água com outra igual transportando óleo. A fim de superar este problema outras formas de avaliação da eficiência exergética são propostas, tais como a de DE JONG et al. (1996):

$$\eta_{ex} = \frac{\sum \dot{Ex}_{sai} - \sum \dot{Ex}_{qui,sai}}{\sum \dot{Ex}_{entra} - \sum \dot{Ex}_{qui,entra}} \quad [2.18]$$

SORIN et al. (1998) propôs uma maneira alternativa de avaliar a eficiência exergética, fazendo uso do conceito de exergia em trânsito: é a parcela da exergia que entra em determinado sistema e atravessa-o sem que sofra transformação alguma, isto é, não é consumida pelo sistema. Assim a eficiência exergética fica definida como:

$$\eta_{ex} = \frac{\sum \dot{Ex}_{sai} - \sum \dot{Ex}_{tr}}{\sum \dot{Ex}_{entra} - \sum \dot{Ex}_{tr}} = \frac{\dot{Ex}_{consumida}}{\dot{Ex}_{produzida}} \quad [2.19]$$

Outra definição ainda, utilizada por GALLO et al. (1998) diz que a eficiência exergética pode ser definida pela razão entre o efeito exergético desejado e o consumo de exergia necessário para realizá-lo. Embora eficiência necessite ser definida para cada subsistema avaliado – ela não é igual, por exemplo, para uma turbina e um trocador de calor – traz mais informação que a forma tradicional de representar a eficiência exergética, equação [2.5], pois faz uma ligação direta com conceitos econômicos e com o método da termoeconomia.

O objetivo da análise exergética é determinar onde a irreversibilidade de um processo pode ser reduzida, e não dizer como esta pode ser reduzida, permitindo-nos indicar as principais causas de imperfeições termodinâmicas em vários processos. A análise exergética, segundo SORIN et al. (2001) compara a performance de um processo real com o correspondente processo ideal avaliando as perdas (ou destruição) de exergia em cada unidade do processo, o que acaba por ser a principal falha da técnica: as perdas de exergia somente podem ser calculadas após a escolha da estrutura do processo e dos seus equipamentos. Assim, a análise exergética torna-se um procedimento iterativo, baseado parte no bom senso e experiência de quem o faz.

O procedimento para realizar a análise exergética é descrito e exemplificado por HINDERINK et al. (1996) ao avaliar uma planta de produção de metanol:

- Definir uma fronteira possível e igual para todos os processos a serem analisados;

- Modelar todos os processos de maneira semelhante e fazer hipóteses e suposições a respeito do modelo cuidadosamente, pois irão afetar diretamente nos resultados;
- Obter balanços materiais e energéticos consistentes;
- Calcular os fluxos de exergia, tanto materiais como aqueles associados a transferência de calor;
- Definir as correntes úteis e aquelas consideradas resíduos que deixam a fronteira do volume de controle;
- Calcular a destruição global de exergia;
- Determinar a destruição de exergia de cada sub-sistema;
- Priorizar as regiões para melhorias.

Nos últimos anos empregou-se continuamente a análise exergética na avaliação de diversos processos, tanto para geração de potência quanto de transformações químicas: DE OLIVEIRA JR. et al. (1997) avaliou a performance de uma plataforma marítima de produção de petróleo atribuindo a cada subsistema a sua participação na destruição global de exergia; na mesma linha GALLO et al. (1998) estudou uma unidade de cogeração; ERRERA et al. (1999) comparou dois processos diferentes de processamento de coque.

Dentre os equipamentos de separação utilizados no processamento químico que mais comumente apresentam grandes valores de destruição de exergia encontram-se as colunas de fracionamento, os evaporadores e os cristalizadores: BILLET (1989) descreve detalhadamente técnicas de aumento de eficiência exergética em sistemas de evaporadores e cristalizadores, tais

como re-compressão mecânica e térmica de vapor, uso de vários estágios de evaporação e cristalização e também bombas de calor. Neste mesmo trabalho o autor compara processos de dessanilização por evaporação contra técnicas de osmose reversa e eletrodialise, criando um critério termoeconômico de escolha de técnica de separação.

O trabalho mínimo de separação de uma mistura em seus constituintes puros é calculado através de:

$$W_{sep} = -R.T \sum x_i \ln(\gamma_i . x_i) \quad [2.20]$$

Esta relação é independente do método de separação e meramente descreve o reverso de um processo de mistura. A energia requerida por uma coluna de destilação é fornecida na forma de calor. A exergia descreve o potencial do calor em se converter em trabalho:

$$\dot{Ex} = \dot{Q} \left( 1 - \frac{T_0}{T_1} \right) \quad [2.21]$$

onde  $Q$  é a quantidade de calor transferido,  $T_1$  é a temperatura da fonte de calor e  $T_0$  é a temperatura ambiente (ou do estado de referência). A exergia destruída é calculada através da diferença de exergia entre a temperatura do calor que entra na coluna e a temperatura do calor que sai da coluna:

$$\dot{Ex}_{destruída} = \dot{Q} . T_0 \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad [2.22]$$

Assim, a necessidade de energia para efetuar a separação num processo de destilação não depende apenas da quantidade de calor  $Q$ , mas também das temperaturas  $T_1$  e  $T_2$ . Numa coluna de destilação um fluxo de calor  $Q_r$ ,

transferido a temperatura  $T_r$ , é necessário na base da coluna, e um fluxo  $Q_c$ , transferido a temperatura  $T_c$ , é removido pelo topo da coluna, assim:

$$\dot{Q}_r + \dot{Q}_c \cong 0 \quad \text{e} \quad T_r > T_c \quad [2.23]$$

A diferença de temperatura  $T_r - T_c$  está normalmente entre 5 e 20 K, assim a destruição de exergia é normalmente pequena, entretanto a demanda de calor para a coluna é usualmente satisfeita por uma corrente a uma temperatura  $T_1 > T_2$  e é removida por água de resfriamento a uma temperatura  $T_2 < T_c$ . Assim, grande quantidade de exergia é destruída pela coluna, muita além daquela necessária para promover a separação. A minimização da diferença de temperatura  $T_1 - T_2$  é uma dos meios de reduzir a destruição de exergia.

Outros métodos de otimização exergética foram compilados por STICHLMAIR et al. (1998), dentre eles:

- Escolha adequada da seqüência de separação;
- Integração, ou acoplamento, direto ou indireto entre colunas de destilação;
- Otimização da rede de trocadores de calor em torno das torres destilação.

Outras técnicas de minimização de destruição de exergia, em processos de destilação, são descritas por DOLDERSUM (1998):

- Segregação das correntes de alimentação das torres de destilação;
- Escolha adequada do prato de alimentação;
- Re-compressão do vapor de topo da coluna;

- Escolha adequada da retirada de líquido.

Na mesma linha de trabalho, BRUZZI et al. (1998) realizou a otimização do sistema de destilação de uma planta produtora de monômero de cloreto de vinila escolhendo adequadamente a seqüência de separação, bem como integrando a rede de trocadores. A economia alegada de consumo de vapor foi de 50%.

## Capítulo 3

### Modelo termodinâmico

#### 3.1 Introdução

Para modelar o comportamento termodinâmico da planta de acetaldeído restringiu-se o número de componentes nos 7 principais compostos que circulam na unidade. Embora haja mais componentes que os escolhidos, notadamente o ácido acético e o monóxido de carbono, a concentração destes outros é tão inferior que podem ser desprezadas sem que haja perda de significado ou mesmo de precisão nos cálculos.

A pressão máxima do processo ocorre na torre de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ) e é igual a 345 kPa. Como a pressão é moderada então se modelou a fase vapor como mistura ideal. Já a fase líquida não pode ser considerada ideal devido à presença de compostos como água e etanol. Para modelar a fase líquida optou-se pela equação de Wilson para avaliar os coeficientes de atividade.

Os gases dissolvidos foram modelados por meio de uma equação empírica. O reator foi modelado como caixa-preta. A exergia é calculada conforme procedimento descrito no Capítulo 2.

Os compostos escolhidos são apresentados na tabela seguinte, juntamente com um índice – este índice serve como identificação do produto durante os cálculos:

Tabela 3.1: Componentes do modelo

Índice ( <i>i</i> )	Componente
1	Acetaldeído
2	Etanol
3	Água
4	Oxigênio
5	Nitrogênio
6	Hidrogênio
7	Dióxido de carbono

### 3.2 Fase vapor

O modelo da fase vapor considera-na como ideal. Assim, a entalpia molar de qualquer mistura de gases e/ou vapores pode ser dada pela relação abaixo:

$$h_g = \sum_i y_i \cdot h_{i,g} \quad [3.1]$$

onde  $y_i$  é a fração molar do componente  $i$  na fase vapor e  $h_{i,g}$  é a entalpia molar do componente  $i$  na fase vapor;  $i$  varia de 1 até 7.

A entalpia molar de  $i$  ( $h_{i,g}$ ) é dada por:

$$h_{i,g} = h_{i,g}^0 + \int_{T_0}^T c_{p_{i,g}} dT \quad [3.2]$$

onde  $h_{i,g}^0$  é a entalpia molar padrão de formação do componente  $i$ ,  $C_{p_{i,g}}$  é o calor específico de  $i$ . A integração é realizada da temperatura de referência  $T_0$  até a temperatura desejada  $T$ . A variação do calor específico com a temperatura é representada por um polinômio:

$$c_{p_{i,g}} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 \quad [3.3]$$



as constantes  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  e  $d_i$  são específicas para cada componente.

**Tabela 3.2: Cp gás e valores padrão**

Cp gas [kJ/kmol.K] – fonte: PERRY et al. (1984)					valores padrão – fonte: KOTAS (1985)		
					$h_{i,g}^0$	$s_{i,g}^0$	$ex_{i,g}^0$
	$a$	$b$	$c$	$D$	[kJ/mol]	[kJ/mol.K]	[kJ/mol]
Acetaldeído	7,716	0,1823	-0,0001007	2,38E-08	-1,662E+05	2,638E+02	1,168E+06
Etanol	9,014	0,2141	-0,0000839	1,37E-09	-2,350E+05	2,816E+02	1,371E+06
Água	31,94	0,001436	0,00002432	-1,18E-08	-2,418E+05	1,888E+02	1,171E+04
Oxigênio	28,11	-0,00000368	0,00001746	-1,07E-08	0,000E+00	2,052E+02	3,970E+03
Nitrogênio	31,15	-0,01357	0,0000268	-1,17E-08	0,000E+00	1,916E+02	7,200E+02
Hidrogênio	32,24	0,001924	0,00001055	-3,60E-09	0,000E+00	1,307E+02	2,385E+05
Dióxido de carbono	19,8	0,07344	-0,00005602	1,72E-08	-3,938E+05	2,138E+02	2,014E+04

A entropia molar da mistura gasosa é calculada da seguinte maneira:

$$s_g = \sum_i y_i s_{i,g} - R \sum_i y_i \ln(y_i) \quad [3.4]$$

onde  $s_{i,g}$  é:

$$s_{i,g} = s_{i,g}^0 + \int_{T_0}^T \frac{C_{p,i,g}}{T} dT - R \int_{P_0}^P \frac{dP}{P} \quad [3.5]$$

Analogamente ao cálculo da entalpia, o valor  $s_{i,g}^0$  é a entropia padrão de formação na temperatura de referência  $T_0$ .

Conhecendo a entalpia  $h_{i,g}$  e a entropia  $s_{i,g}$  é possível então calcular a exergia  $ex_{i,g}$  através da relação abaixo:

$$ex_g = \sum_i y_i ex_{i,g}^0 + RT_0 \sum_i y_i \ln(y_i) + (h_g - h_g^0) - T_0 (s_g - s_g^0) \quad [3.6]$$

onde  $h_g^0$  e  $s_g^0$  são avaliadas na temperatura de referência  $T_0$  e  $ex_{i,g}^0$  é a exergia molar padrão de formação do componente  $i$ .

### 3.3 Fase líquida

A fase líquida não é considerada ideal. A entalpia molar da fase líquida é calculada por:

$$h_l = \sum_i x_i h_{i,l} + h^e \quad [3.7]$$

onde  $x_i$  é a fração molar do componente  $i$  na fase líquida e  $h_{i,l}$  é a entalpia molar do componente  $i$  na fase líquida e  $h^e$  é a entalpia molar em excesso. Tal como na fase vapor a entalpia molar de  $i$  é dada por:

$$h_{i,g} = h_{i,g}^0 + \int_{T_0}^T c_{p,i,g} dT \quad [3.8]$$

onde  $h_{i,l}^0$  é a entalpia molar padrão de formação do componente  $i$ ,  $C_{p,i,l}$  é o calor específico de  $i$ . A integração é realizada da temperatura de referência  $T_0$  até a temperatura desejada  $T$ . A variação do calor específico com a temperatura é representada por um polinômio:

$$c_{p,i,l} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + e_i T^4 \quad [3.9]$$

as constantes  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$ ,  $d_i$  e  $e_i$  são específicas para cada componente.

Tabela 3.3: Cp líquido e valores padrão

Cp líquido [kJ/kmol.K] – fonte						valores padrão – fonte: KOTAS (1985)		
PERRY et al (1984)						$h_{i,l}^0$	$s_{i,l}^0$	$ex_{i,l}^0$
	$a$	$b$	$c$	$D$	$e$	[kJ/mol]	[kJ/mol.K]	[kJ/mol]
Acetaldeído	1,150E+02	-4,330E-01	1,425E-03	0,000E+00	0,000E+00	-1,922E+05	1,602E+02	1,162E+06
Etanol	1,026E+02	-1,396E-01	-3,034E-05	2,039E-06	0,000E+00	-2,776E+05	1,607E+02	1,365E+06
Água	2,764E+02	-2,090E+00	8,125E-03	-1,412E-05	9,370E-09	-2,858E+05	7,000E+01	3,120E+03

A entalpia molar em excesso é dada por:

$$h^e = -RT^2 \left( \frac{\partial g^e / RT}{\partial T} \right)_{x,P} \quad [3.10]$$

onde  $g^e$  é a entalpia livre (de Gibbs) em excesso e é definida como:

$$g^e = RT \sum_i x_i \ln(\gamma_i) \quad [3.11]$$

onde  $\gamma_i$  é o coeficiente de atividade do componente  $i$ . Para calcular o coeficiente de atividade faz-se uso da equação de Wilson, que será detalhado em breve.

A entropia molar da fase líquida é definida como segue:

$$s_l = \sum_i x_i s_{i,l} - R \sum_i x_i \ln(x_i \gamma_i) + s^e \quad [3.12]$$

onde:

$$s_{i,l} = s_{i,l}^0 + \int_{T_0}^T \frac{c_{p,i,l}}{T} dT \quad [3.13]$$

$$s^e = \frac{h^e - g^e}{T} \quad [3.14]$$

$s_{i,l}^0$  é a entropia molar de  $i$  na fase líquida e  $s^e$  é a entropia molar em excesso. A exergia da fase líquida é finalmente calculada por:

$$ex_l = \sum_i x_i ex_{i,l}^0 + RT_0 \sum_i x_i \ln(x_i \gamma_i) + (h_l - h_l^0) - T_0 (s_l - s_l^0) \quad [3.15]$$

$ex_{i,l}^0$  é a exergia molar padrão de formação de  $i$ . As grandezas marcadas com  $^0$  são avaliadas na temperatura de referência  $T_0$ .

### 3.4 Equilíbrio líquido vapor

O equilíbrio líquido vapor é expresso através dos coeficientes de partição  $K_i$  que representam a razão entre as frações molares do composto  $i$  na fase vapor e líquida:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i \cdot P_i}{P} \quad [3.16]$$

onde  $P_i$  é a pressão de vapor  $i$ , que é dada por:

$$P_i = e^{a_i - b_i / (T + c_i)} \quad [3.17]$$

conhecida por equação de Antoine. As constantes que aparecem na equação acima são específicas para cada composto.

**Tabela 3.4: Pressão de vapor**

Pressão de vapor [kPa] – fonte: STICHLMAIR (1998)			
	$a$	$b$	$c$
Acetaldeído	9,977	2532	-39,20
Etanol	12,060	3668	-49,97
Água	11,960	3985	-39,72

Quando um dado composto possui temperatura crítica  $T_c$  abaixo da temperatura avaliada diz-se que este composto é um gás, e não mais um vapor, isto é, não há mais interface líquido-vapor e, portanto não há mais sentido em falar pressão de vapor. Assim para modelar um composto nesta condição faz-se necessário uma outra relação que não a representada por [3.16]. Nesta condição encontram-se, no caso específico da planta de acetaldeído, o oxigênio, o nitrogênio, o hidrogênio e o dióxido de carbono. Para modelar estes compostos utilizou-se uma equação empírica:

$$x_i = e^{[a_i + b_i \cdot 100/T + c_i \cdot \ln(100/T)]} \quad [3.19]$$

Tabela 3.5: Solubilidade dos gases

Solubilidade [kmol/kmol] – fonte: LIDE (2004)			
	a	b	c
Oxigênio	-66,74	87,48	24,45
Nitrogênio	-67,39	86,32	24,8
Hidrogênio	-48,16	55,28	16,89
Dióxido de carbono	-62,11	90,37	22,34

### 3.5 Coeficiente de atividade

O coeficiente de atividade  $\gamma_i$  é avaliado através da equação de Wilson. Esta equação faz uso de parâmetros binários para avaliar a mistura ternária acetaldeído, etanol e água. A equação de Wilson é a seguinte:

$$\ln(\gamma_i) = 1 - \ln\left(\sum_k x_k \cdot A_{i,k}\right) - \sum_l \frac{x_l \cdot A_{l,i}}{\sum_j x_j \cdot A_{l,j}} \quad [3.20]$$

$$A_{i,j} = \beta_{i,j} \cdot e^{-\alpha_{i,j}/RT} \quad [3.21]$$

Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  são específicos para cada par de compostos.

Tabela 3.6: Parâmetros da equação de Wilson

	$\beta_{ij}$ – fonte: STICHLMAIR (1998)			$\alpha_{ij}$ – fonte: STICHLMAIR (1998)		
	Acetaldeído	Etanol	Água	Acetaldeído	Etanol	Água
Acetaldeído	1	1,036	0,3191	0	162,6	-592,3
Etanol	0,9649	1	0,3079	-150,9	0	325,1
Água	3,133	3,247	1	1567	953,3	0

### 3.6 Modelo dos equipamentos

#### 3.6.1 Introdução

Utilizou-se a seguinte sistematização para atribuir nomes às variáveis utilizadas no código do simulador:

$$X_{i,j,k}$$

$X$  representa a fração molar do componente  $i$ , no estágio  $j$ , no equipamento  $k$ .

$$F_{j,k}$$

$F$  assume o lugar de fluxo molar, temperatura, pressão, entalpia, exergia, trabalho, fluxo de energia ou exergia destruída no estágio  $j$ , no equipamento  $k$ .

Por exemplo, deseja-se representar a concentração molar de do acetaldeído ( $i=1$ ), na fase líquida ( $x$ ), do prato 40 ( $j=40$ ) da torre de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ):  $X_{i,j,k} = x_{1,40,9}$

Caso queira se representar, por exemplo, a entalpia molar do etanol ( $i=2$ ) na fase vapor ( $y$ ), do estágio 1 ( $j=1$ ) da torre de absorção de acetaldeído ( $k=6$ ):

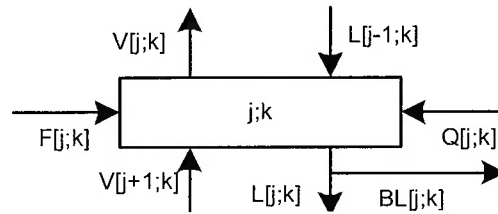
$$X_{i,j}.F_{j,k} = y_{2,1,6}.HV_{1,6}$$

A correspondência entre os compostos e o índice  $i$  já foi apresentada na Tabela 3.1, enquanto a correspondência entre os equipamentos e o índice  $k$  aparece na Tabela 2.2 do capítulo anterior.

### 3.6.2 Estágio de equilíbrio

Estágio de equilíbrio é toda a operação cujas correntes de saída encontram-se em equilíbrio termodinâmico entre si. O esquema abaixo (figura 3.1) representa um estágio de equilíbrio.

Fig 3.1: Estágio de equilíbrio



As correntes que deixam o estágio  $V_{ij}$  e  $L_{ij}$ , que representam o fluxo molar da espécie  $i$  na fase vapor e líquida respectivamente, estão em equilíbrio termodinâmico, isto é obedecem as seguintes relações:

$$y_{i,j,k} - x_{i,j,k} \cdot K_{i,j,k} = 0 \quad [3.22]$$

$$\sum_i x_{i,j,k} - 1 = 0 \quad [3.23]$$

$$\sum_i y_{i,j,k} - 1 = 0 \quad [3.24]$$

$$x_{i,j-1,k} \cdot L_{j-1,k} + y_{i,j+1,k} \cdot V_{j+1,k} + z_{i,j,k} \cdot F_{j,k} - x_{i,j,k} \cdot (L_{j,k} + BL_{j,k}) - y_{i,j,k} \cdot V_{j,k} = 0 \quad [3.25]$$

$$h_{l,j-1,k} \cdot L_{j-1,k} + h_{g,j+1,k} \cdot V_{j+1,k} + h_{l,j,k} \cdot F_{j,k} - h_{l,j,k} \cdot (L_{j,k} + BL_{j,k}) - h_{g,j,k} \cdot V_{j,k} + Q_{j,k} = 0 \quad [3.26]$$

onde  $i$  é o número de componentes (1 a 7),  $j$  é o número de estágios de equilíbrio – no caso  $j = 1$  – e  $k$  é o número identificador da unidade a que pertencem os estágios de separação. A primeira relação diz respeito ao equilíbrio de fases, as três seguintes [3.23], [3.24] e [3.25] são as equações da

continuidade (balanço de massa) e a última [3.26] é o balanço de energia do estágio.

Para resolver o sistema de equações não-lineares exposto acima é necessário definir todas as correntes de entrada  $L_{j-1;k}$ ,  $V_{j+1;k}$  e  $F_{j;k}$ , as concentrações destas correntes,  $x_{ij-1;k}$ ,  $y_{ij+1;k}$  e  $z_{ij;k}$ , a pressão do estágio  $p_{j;k}$ , a carga térmica do estágio  $Q_{j;k}$  e a relação  $BL_{j;k}/L_{j;k}$ . A resposta do sistema equações será a concentração de equilíbrio tanto na fase líquida como na fase vapor  $x_{ij;k}$  e  $y_{ij;k}$ , os fluxos molares  $L_{j;k}$ ,  $V_{j;k}$  e também a temperatura do estágio  $T_{j;k}$ .

Além dos balanços acima, também se quer avaliar destruição de exergia gerada em cada estágio. Faz-se isto resolvendo o balanço de exergia do estágio.

$$ex_{l_{j-1,k}} \cdot L_{j-1,k} + ex_{g_{j+1,k}} \cdot V_{j+1,k} + ex_{f_{j,k}} \cdot F_{j,k} - ex_{l_{j,k}} \cdot (L_{j,k} + BL_{j,k}) - ex_{g_{j,k}} \cdot V_{j,k} + Q_{j,k} \cdot \theta_{j,k} = U_{j,k} \quad [3.27]$$

onde  $\theta_{j,k}$  é o fator de Carnot e  $U_{j,k}$  é a destruição de exergia. O fator de Carnot é definido como:

$$\theta_{j,k} = 1 - \frac{T_0}{T_{j,k}^b} \quad [3.28]$$

onde  $T_{j,k}^b$  é a temperatura na fronteira, na qual ocorre a transferência de calor. A temperatura  $T_{j,k}^b$  não é igual a temperatura  $T_{j,k}$  —esta última é a temperatura dentro do estágio. Por exemplo, se um determinado estágio apresenta uma temperatura de equilíbrio de 348 K e está recebendo energia de um vapor de água que condensa a 428 K, então  $T^b = 428 \text{ K}$ .

O evaporador ( $k=2$ ) é modelado como um estágio de equilíbrio.



### 3.6.3 Múltiplos estágios de equilíbrio

A associação seqüencial de dois ou mais estágios de equilíbrio resulta num sistema de equações não-lineares similar ao obtido quando a separação é efetuada num único estágio. A única diferença é o tamanho do sistema, que é proporcional ao número de estágios. As equações de [3.22] a [3.27] podem ser utilizadas, basta que  $j$  varie de 1 até  $m$ , onde  $m$  representa o número de estágios de separação.

As torres de separação ( $k=1$ ), ( $k=6$ ) e ( $k=9$ ) são representadas como múltiplos estágios de equilíbrio.

### 3.6.4 Trocadores de calor

Foram divididos em três classes diferentes os equipamentos de troca térmica da planta. Na primeira classe estão todos aqueles trocadores que efetuam transferências de energia entre fluidos de processos – ou seja, trocadores que envolvam apenas correntes do “lado do processo”, e não das utilidades (vapor ou água de resfriamento).

Na segunda classe de trocadores estão aqueles que trocam calor contra um fluido em mudança de fase, como o vapor de aquecimento. Por exemplo, os refeedores e evaporadores da planta. Na última estão todos os trocadores de calor que cedem calor para água de resfriamento.

Na primeira categoria de trocadores obedecem ao seguinte conjunto de equações:

$$h_{l1,k} \cdot L_{1,k} - h_{l2,k} \cdot L_{2,k} + Q_{j,k} = 0 \quad \text{fluido frio} \quad [3.29]$$

$$h_{l3,k} \cdot L_{3,k} - h_{l4,k} \cdot L_{4,k} - Q_{j,k} = 0 \quad \text{fluido quente} \quad [3.30]$$

$$Q_{j,k} - (UA)_{j,k} \cdot \frac{1}{2} \cdot [(T_3 - T_1) + (T_4 - T_2)] = 0 \quad [3.31]$$

As duas primeiras equações são os balanços de energia para cada um dos lados dos trocadores; a equação [3.31] relaciona o calor trocado  $Q_{j,k}$  com a capacidade de transferência de calor de uma determinada superfície  $(UA)_{j,k}$ .

A exergia destruída neste trocador é dada por:

$$ex_{l1,k} \cdot L_{1,k} + ex_{l3,k} \cdot L_{3,k} - ex_{l2,k} \cdot L_{2,k} - ex_{l4,k} \cdot L_{4,k} = U_{j,k} \quad [3.32]$$

Fazendo uso deste equacionamento não é necessário avaliar o fator de Carnot para cada trocador.

Para um trocador que é isotérmico num dos lados – caso dos refeedores – o equacionamento é mais simples:

$$h_{l1,k} \cdot L_{1,k} - h_{l2,k} \cdot L_{2,k} + Q_{j,k} = 0 \quad [3.33]$$

$$Q_{j,k} - (UA)_{j,k} \cdot \frac{1}{2} \cdot [(T_S - T_1) + (T_S - T_2)] = 0 \quad [3.34]$$

onde  $T_S$  é a temperatura do vapor de aquecimento.

A destruição de exergia é então calculada por:

$$ex_{l1,k} \cdot L_{1,k} - ex_{l2,k} \cdot L_{2,k} + Q_{j,k} \cdot \theta_{j,k} = U_{j,k} \quad [3.35]$$

$$\theta_{j,k} = 1 - \frac{T_0}{T_S} \quad [3.36]$$

No último caso encontram-se aqueles trocadores onde o fluido frio é água de resfriamento que entra no trocador a uma temperatura  $T_1$  e sai a  $T_2$ . As equações do balanço de energia são as mesmas que as utilizadas no primeiro caso. Entretanto a destruição de exergia é equacionada da seguinte maneira:

$$ex_{l3,k} \cdot L_{3,k} - ex_{l4,k} \cdot L_{4,k} + Q_{j,k} \cdot \theta_{j,k} = U_{j,k} \quad [3.37]$$

$$\theta_{j:k} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} Q_{j,k} \cdot \theta_{j,k} \cdot dT}{(T_2 - T_1) \cdot Q_{j,k}} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} (T - T_1) \cdot \left(1 - \frac{T_0}{T}\right) \cdot dT}{(T_2 - T_1) \cdot (T_2 - T_1)} = \frac{\left[ \frac{T_2^2 - T_1^2}{2} - (T_2 - T_1)(T_1 + T_0) + T_1 \cdot T_0 \cdot \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) \right]}{(T_2 - T_1)^2} \quad [3.38]$$

Todos os trocadores da planta, inclusive os refeedores das torres e a caldeira de recuperação encontram-se num destes três modelos descritos acima.

### 3.6.5 Compressor

O trabalho exercido pelo soprador de ar é aquele necessário para levar o ar atmosférico da pressão  $p_1$  até  $p_2$ , supondo que a compressão se dá num processo politrópico e o ar se comporta como um gás ideal.

O balanço de energia em torno do soprador é igual a:

$$h_{g1,k} \cdot V_{1,k} - h_{g2,k} \cdot V_{2,k} + W_{j,k} = 0 \quad [3.39]$$

onde:

$$h_{g2,k} = \bar{c}_p \cdot T_1 \left( \left( \frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\zeta-1}{\zeta}} - 1 \right) \quad [3.40]$$

$$\zeta = \frac{1}{1 - \frac{\gamma - 1}{\eta_{poli} \cdot \gamma}} \quad [3.42]$$

$$R = \bar{c}_p - \bar{c}_v \quad [3.43]$$

$$\gamma = \frac{\bar{c}_p}{\bar{c}_v} \quad [3.44]$$

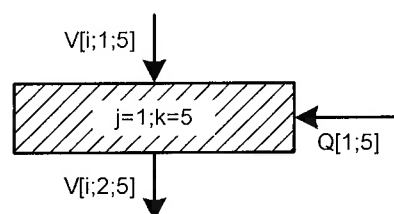
$$\bar{T} = \frac{T_2 + T_1}{2} \quad [3.45]$$

$$\bar{c}_p = \sum_i y_i \cdot c_{p_i}(\bar{T}) \quad [3.46]$$

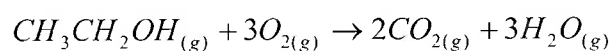
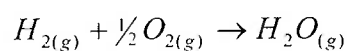
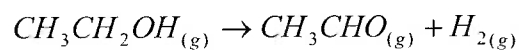
### 3.6.6 Reator

O reator de acetaldeído foi modelado como uma caixa-preta, isto é, as equações utilizadas descrevem apenas a variação molar dos reagentes e produtos de acordo com conversão e rendimento previamente determinados; em razão disto não é possível prever a performance do reator em situações diferentes daquelas originalmente projetadas: temperatura de alimentação igual a 400 K, pressão de 135 kPa e relação molar entre etanol e ar igual a 0,88 kmol/kmol.

Figura 3.2.: Modelo reator acetaldeído



O reator segue as seguintes relações estequiométricas



Para as condições de entrada estipuladas no parágrafo anterior, obtêm-se os seguintes valores para conversão do etanol ( $\chi_2$ ) e do oxigênio ( $\chi_4$ ) e rendimento em acetaldeído ( $\eta_1$ ):

$$\eta_1 = \frac{y_{1,2,5} \cdot V_{2,5} - y_{1,1,5} \cdot V_{1,5}}{\chi_2 \cdot V_{1,5}} = 98,42\% \quad [3.47]$$

$$\chi_2 = \frac{y_{2,1,5} \cdot V_{1,5} - y_{2,2,5} \cdot V_{2,5}}{y_{2,1,5} \cdot V_{1,5}} = 57,85\% \quad [3.48]$$

$$\chi_4 = \frac{y_{4,1,5} \cdot V_{1,5} - y_{4,2,5} \cdot V_{2,5}}{y_{4,1,5} \cdot V_{1,5}} = 75,95\% \quad [3.49]$$

Combinando as definições acima com as relações estequiométricas chega-se a:

$$y_{1,2,5} = (y_{1,1,5} + \eta_1 \cdot \chi_2) \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [3.50]$$

$$y_{2,2,5} = y_{2,1,5} \cdot (1 - \chi_2) \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [3.51]$$

$$y_{3,2,5} = [y_{3,1,5} + 2 \cdot \chi_4 - 3 \cdot \chi_2 \cdot y_{2,1,5} \cdot (1 - \eta_1)] \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [3.52]$$

$$y_{4,2,5} = y_{4,1,5} \cdot (1 - \chi_4) \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [3.53]$$

$$y_{5,2,5} = y_{5,1,5} \cdot \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [3.54]$$

$$y_{6,2,5} = [y_{6,1,5} - 2 \cdot y_{4,1,5} \cdot \chi_4 + y_{2,1,5} \cdot \chi_2 \cdot (6 - 5 \cdot \eta_1)] \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [4.55]$$

$$y_{7,2,5} = \left[ y_{7,1,5} + 2 \cdot y_{2,1,5} \cdot \chi_2 \cdot (1 - \eta_1) \right] \left( \frac{V_{1,5}}{V_{2,5}} \right) \quad [4.56]$$

Necessita-se ainda do balanço de massa e do balanço de energia para um reator adiabático para determinar todo o sistema:

$$\sum_i \left( y_{i,2,5} \frac{V_{2,5}}{V_{1,5}} \right) = 1 \quad [3.57]$$

$$HV_{1,5} \cdot V_{1,5} - HV_{2,5} \cdot V_{2,5} = 0 \quad [3.58]$$

### 3.7 Premissas do modelo

O modelo apresentado possui as seguintes premissas:

- Estado estacionário.
- Fase vapor ideal, fase líquida não ideal, com a correção da lei de Raoult descrita pela equação de Wilson.
- Solubilidade dos gases dependente apenas da temperatura.
- Os volumes de controle são perfeitamente isolados.
- Condições homogêneas dentro de cada estágio de separação.
- Ausência de curto-circuito ou arraste nos estágios de separação

## Capítulo 4

### Resultados e discussão

#### 4.1 Validação do modelo

##### 4.1.1 Introdução

A fim de validar o modelo proposto comparou-se dados obtidos da planta analisada e os valores previstos pelo modelo. Os dados da planta são oriundos do banco de dados do sistema digital de controle e correspondem às medições realizadas pela instrumentação. Escolheu-se um período de tempo no qual a planta operou de maneira estável e em regime permanente, entre 28/12/2000 e 04/01/2001, o que gerou 167 leituras para cada um dos 36 pontos escolhidos de medição. A tabela 4.1 dá a relação dos pontos escolhidos de medição e faz referência com o fluxograma de processo (Fig 4.1) e com o balanço de massa (Apêndice II, AII.2).

Tabela 4.1: Pontos escolhidos de medição

Medida	Correntes													
	1	1B	20	9	19	27	21	18+21	29	RFLX	16+25	QR[1]	QR[9]	
[kg/h]	7	10	5	6	29	24	22	19	21	14	20	25	3	11
[°C]														
[kgf/cm <sup>2</sup> ]	10	5	7	8	24									

QR[1] e QR[9] representam a potencia térmica dos refeedores das torres de destilação (k=1) e (k=9), respectivamente. RFLX é o refluxo da torre de destilação de acetaldeído (k=9) e as somas 18+21 e 16+25 são as vazões de fundo das torres (k=6) e (k=9), respectivamente.

Fig 4.1: Fluxograma de processo original

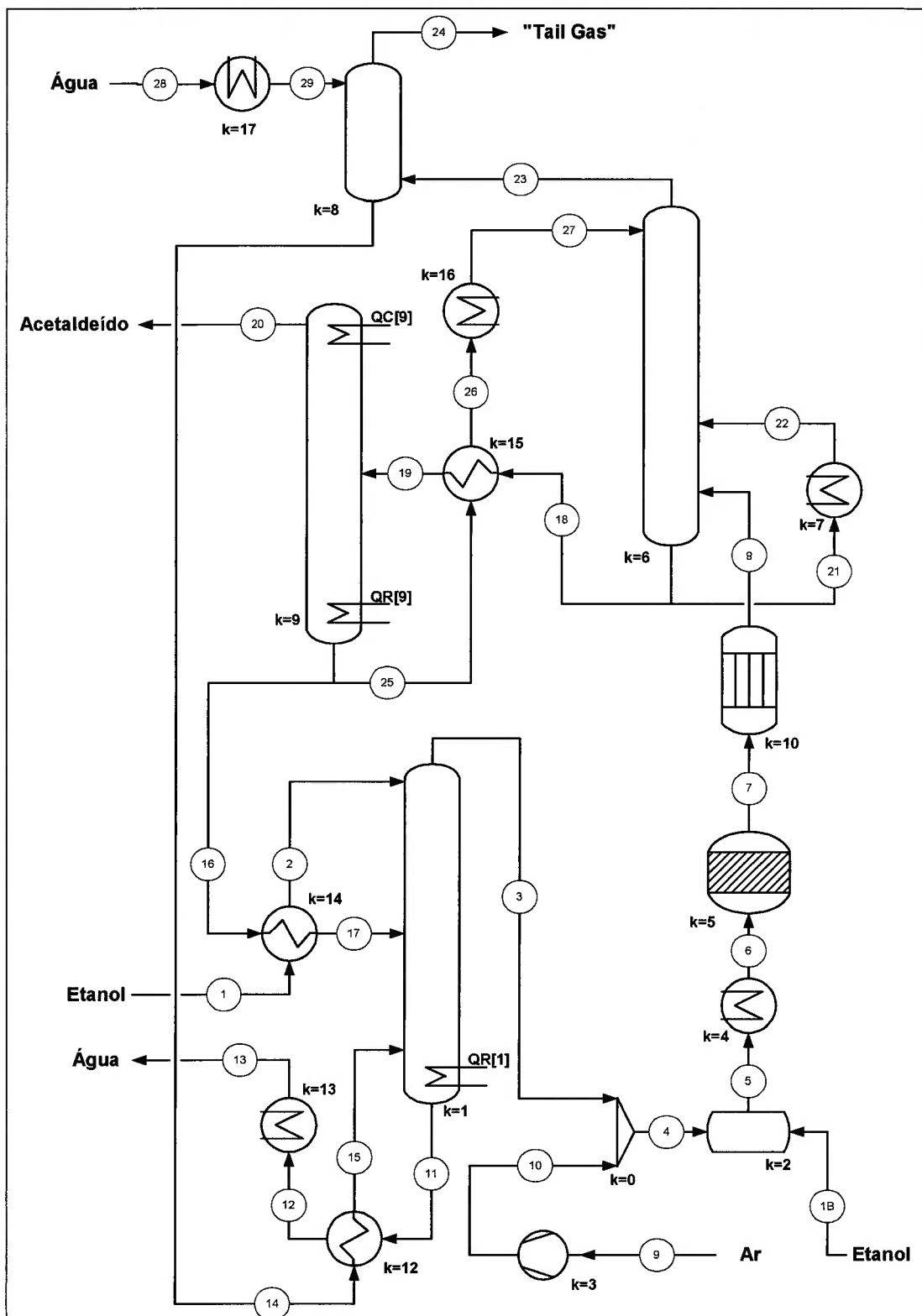




Tabela 4.2: Valor medido versus estimado - vazões

Vazões [kg/h]				
Corrente	Valor medido		Valor estimado	Desvio (estimado-estimado)/medido
	Media	Desvio padrão		
1	600	1	595	-0,7%
1B	288	89	293	1,6%
1+1B	888	89	888	0,0%
20	725	206	755	4,2%
9	1320	47	1324	0,3%
19	7684	294	6608	-14,0%
27	5051	167	5019	-0,6%
21	40007	164	41975	4,9%
18+21	47692	344	48584	1,9%
29	1155	83	1155	0,0%
RFLX	2430	129	2639	8,6%
16+25	5863	230	5890	0,5%
16	811	87	871	7,4%
k=1	695	27	649	-6,7%
k=9	1361	105	1337	-1,7%
Media				0,4%
Desvio padrão				5,5%

Tabela 4.3: Valor medido versus estimado - temperaturas

Temperaturas [K]				
Corrente	Valor medido		Valor estimado	Desvio (estimado-estimado)/medido
	Media	Desvio padrão		
7	841,1	3,9	817,0	-2,9%
10	338,0	2,4	339,6	0,5%
5	340,0	0,1	341,6	0,5%
6	402,2	0,3	402,0	-0,1%
29	285,9	2,7	286,0	0,0%
24	290,9	6,7	297,2	2,2%
22	305,1	2,3	299,6	-1,8%
19	350,9	0,0	353,0	0,6%
21	331,9	1,6	315,0	-5,1%
14	300,7	7,1	314,0	4,4%
20	326,4	1,0	326,5	0,0%
25	384,8	0,8	392,0	1,9%
3	355,7	1,2	362,3	1,9%
11	379,3	1,7	384,9	1,5%
Media				0,3%
Desvio padrão				2,3%

Tabela 4.4: Valor medido versus estimado - pressões

Pressões [kgf/cm <sup>2</sup> abs]				
Corrente	Valor medido		Valor estimado	Desvio (estimado-estimado)/previsto
	Media	Desvio padrão		
10	1,36	0,004	1,40	2,7%
5	1,30	0,003	1,30	-0,4%
7	1,33	0,002	1,30	-2,0%
8	1,30	0,002	1,30	0,3%
24	1,15	0,000	1,15	0,0%
Media				0,1%
Desvio padrão				1,5%

Observando as diferenças entre os valores médios das medições e os estimados pode-se assumir que o modelo reproduz os valores medidos com um desvio global médio de  $0,67\% \pm 3,5\%$ .

Os dados originais utilizados para gerar as tabelas acima se encontram no Apêndice I, os resultados do modelo também utilizados nas tabela anteriores, estão no Apêndice II.

## **4.2 Resultados da simulação**

### **4.2.1 Introdução**

Dois modelos distintos foram testados, o primeiro deles corresponde à planta original, e foi utilizado para validação; o segundo modelo é uma alternativa ao original e é uma proposta de racionalização do uso da energia e de diminuição da destruição de exergia.

Nas seções seguintes constam as discussões a respeito de ambos os modelos, bem como dos principais equipamentos envolvidos. Primeiro se abordará o modelo original, cujo fluxograma já foi apresentado (Fig 4.1), mostrando como se dá o processo e a destruição de exergia através do mesmo, e também esmiuçando cada um dos equipamentos. Em seguida, mostrar-se-á a alternativa proposta, bem como os resultados apresentados por esta.

### **4.2.2 Configuração original**

Os balanços de massa e energia do modelo original se encontram no Apêndice II. Um quadro resumo dos resultados obtidos é fornecido em seguida; neste quadro constam os fluxos de massa, energia e exergia através de cada um dos equipamentos da planta, bem como as irreversibilidades) associadas a cada um destes equipamentos.

Tabela 4.5: Quadro resumo da simulação da configuração original

K = unidade	F <sub>entra</sub>	F <sub>sai</sub>	$\Sigma(F.h)_{entra}$	$\Sigma(F.h)_{sai}$	$\Sigma Q$	$\Sigma(F.ex)_{entra}$	$\Sigma(F.ex)_{sai}$	$\Sigma Q_{\theta}$	U	f
	[kmol/s]	[kmol/s]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[%kW]
K = 0	0,0218	0,0218	-2.150	-2.150	0	9.703	9.669	0	34	3,2%
k = 1	0,0314	0,0314	-8.701	-8.340	360	9.872	9.947	114	39	3,6%
k = 2	0,0237	0,0237	-2.687	-2.611	76	11.934	11.934	19	19	1,8%
k = 3	0,0129	0,0129	-99	-83	16	2	13	16	4	0,4%
k = 4	0,0237	0,0237	-2.611	-2.543	68	11.934	11.947	21	7	0,7%
k = 5	0,0237	0,0270	-2.543	-2.544	0	11.951	11.493	0	458	42,6%
k = 6	0,4778	0,4779	-127.588	-127.604	-18	247.663	247.557	-1	105	9,7%
k = 7	0,4015	0,4015	-109.948	-110.535	-587	212.737	212.728	-9	0	0,0%
k = 8	0,0310	0,0310	-5.456	-5.456	0	1.384	1.380	0	4	0,4%
k = 9	0,0632	0,0632	-17.060	-16.831	224	33.538	33.595	304	247	22,9%
k = 10	0,0270	0,0270	-2.544	-3.094	-550	11.493	11.208	-167	118	11,0%
k = 12	0,0225	0,0225	-6.272	-6.365	-93	257	242	-12	3	0,3%
k = 13	0,0225	0,0225	-6.365	-6.413	-48	242	239	0	2	0,2%
k = 14	0,0087	0,0087	-2.368	-2.386	-18	4.201	4.198	-1	3	0,3%
k = 15	0,0632	0,0632	-17.310	-17.070	239	33.492	33.515	44	21	1,9%
k = 16	0,0500	0,0500	-13.873	-14.051	-178	24.149	24.136	-2	12	1,1%
k = 17	0,0178	0,0178	-5.093	-5.109	-16	56	56	0	0	0,0%
K = global	0,0366	0,0395	-332.670	-333.187	-523	624.607	623.855	324	1.076	100%

A tabela 4.5 mostra que a principal irreversibilidade, 458 kW e 42,6% do total da planta, se dá no reator de oxidação de etanol (k=5), o que já era esperado uma vez que as reações de oxidação em fase gasosa e em alta temperatura normalmente ocorrem muito longe do equilíbrio. A segunda maior causa de irreversibilidade no processo é a torre de destilação de acetaldeído (k=9), que contribui com 347 kW e 22,9% do total, e em seguida vem a caldeira de recuperação de calor (k=10), com 118 kW e 11,0%, e a torre de absorção de acetaldeído (k=6), com 105 kW e 9,7%.

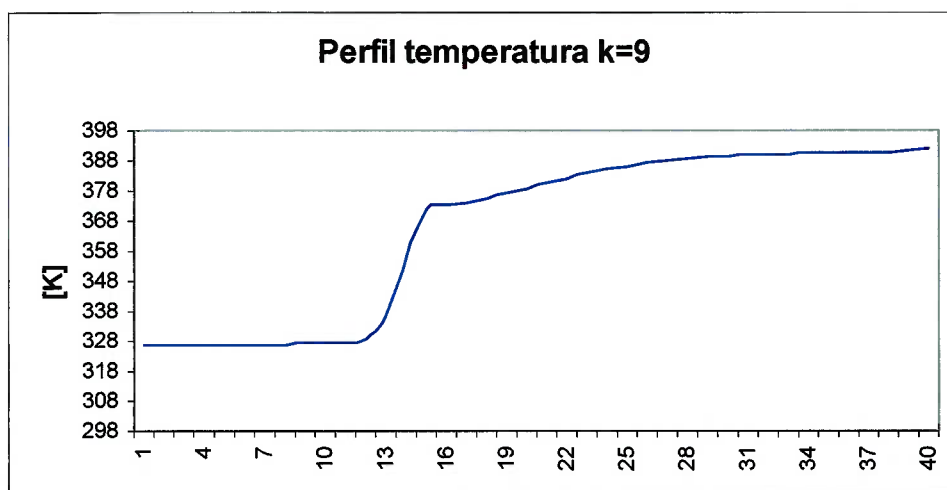
Dois dos principais elementos causadores de irreversibilidades, o reator e a caldeira de recuperação, não serão analisados em detalhes porque estes equipamentos definem todo o processo de produção de acetaldeído via oxidação parcial de etanol. Alterar um destes elementos causaria uma mudança tecnológica, que não se pretende estudar aqui.

As análises mais detalhadas se restringirão aos equipamentos de separação (torres de destilação e absorção) e a rede de trocadores de calor.

#### 4.2.2.1 Destilação de acetaldeído (k=9)

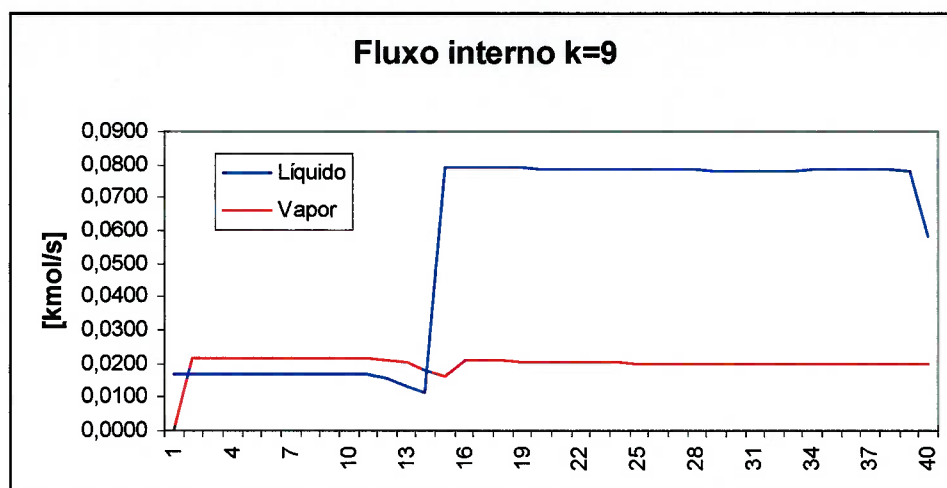
O objetivo deste equipamento é separar o acetaldeído da água e do etanol não reagido. O acetaldeído é retirado no topo da torre de destilação com concentração superior a 99,5% molar, enquanto que no fundo saem água e etanol, na proporção aproximada de 2:1 molar. A torre possui 40 pratos teóricos de separação e opera com 345 kPa no fundo e 320 kPa no último prato. Os valores numéricos completos da simulação desta torre estão no Apêndice II por motivos de simplicidade. O prato teórico 1 representa o condensador e o último, o número 40, corresponde ao refeedor, assim o perfil de temperatura cresce do topo para o fundo, conforme a figura 4.2 abaixo:

Fig 4.2: Perfil de temperatura da torre de destilação de acetaldeído



A alimentação ocorre no prato 15, e é partir dele que ocorre uma rápida mudança no perfil de temperatura.

Fig 4.3: Fluxo interno da torre de destilação de acetaldeído



Os perfis de entalpia, exergia e concentração ao longo da torre de destilação de acetaldeído são apresentados a seguir, nas figuras 4.4, 4.5 e 4.6:

Fig 4.4: Entalpia específica ao longo da torre de destilação de acetaldeído – configuração original

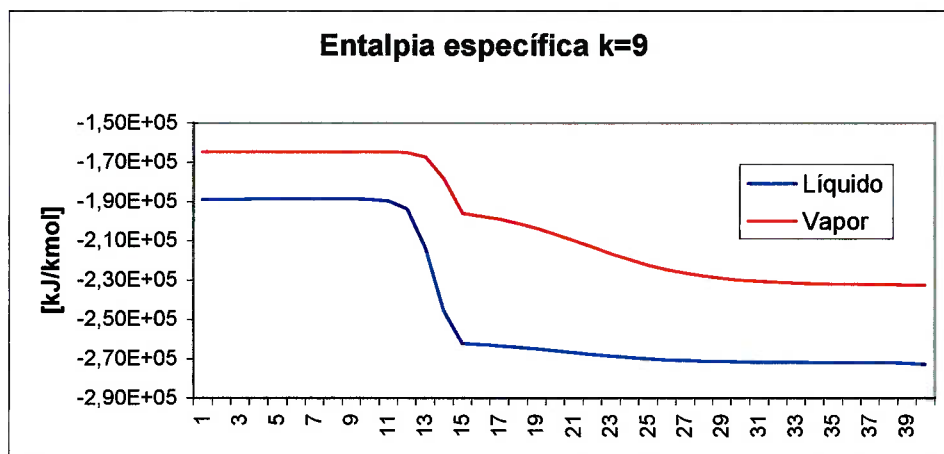


Fig 4.5: Exergia específica ao longo da torre de destilação de acetaldeído – configuração original

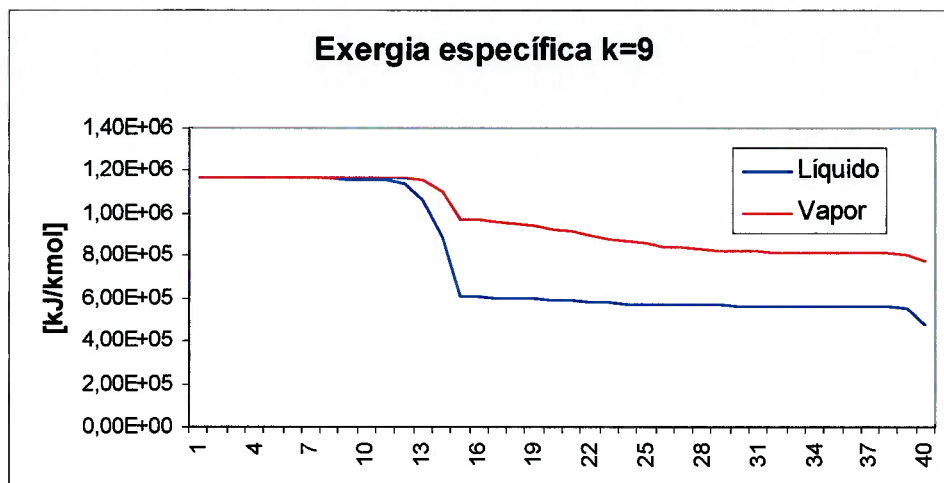
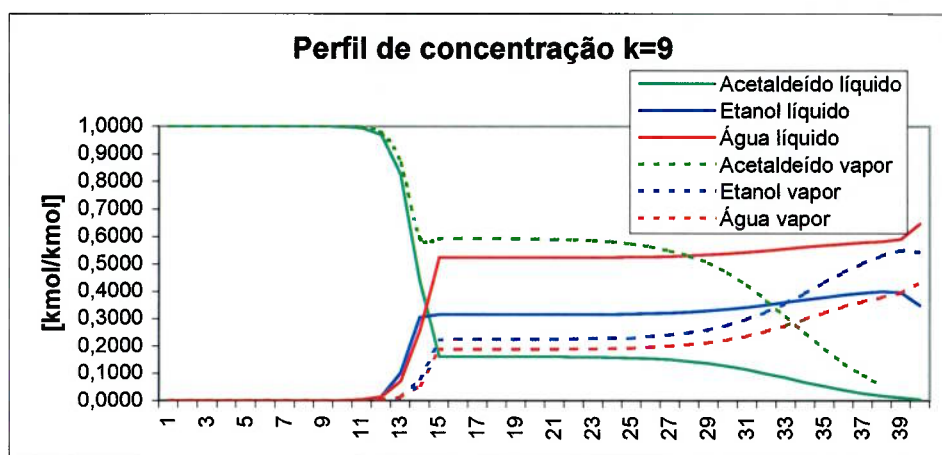


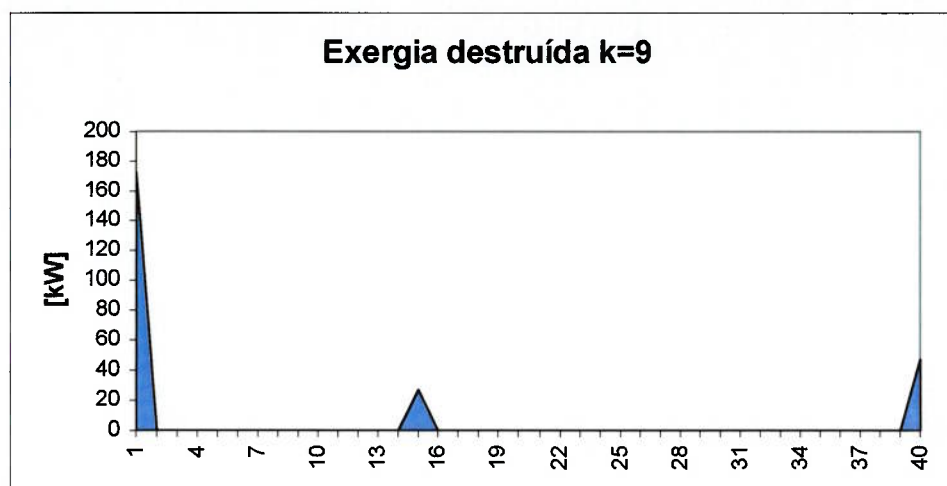
Fig 4.6: Perfil de concentração da torre de destilação de acetaldeído – configuração original



Tanto a entalpia específica ( $\text{kJ/kmol}$ ), quanto a exergia específica ( $\text{kJ/kmol}$ ) são maiores quanto mais alto o estágio de separação (menor o número identificador do estágio). Este comportamento deve-se ao fato que a coluna concentra um produto puro no topo e a parcela química da exergia é muitas vezes maior que a parcela física, que decresce com a diminuição da temperatura; o perfil de concentração corrobora esta interpretação. Um ponto interessante é que apenas parte dos estágios de equilíbrio é utilizada efetivamente para promover a separação, pois a partir do prato 10, a concentração atinge quase os 100%.

A destruição da exergia ao longo da coluna é visualizada na figura 4.7:

Fig 4.7: Exergia destruída ao longo da torre de destilação de acetaldeído – configuração original



Três são os locais onde ocorrem as irreversibilidades, no condensador, no refeedor e ao redor do ponto de alimentação. A irreversibilidade do condensador deve-se a troca de 518,7 kW entre o fluido que condensa e o refrigerante a uma diferença de temperatura finita de 20K. A irreversibilidade causada pela alimentação deve-se a diferença de concentração entre a corrente alimentada (7,58% acetaldeído, 32,35% etanol e 60,02 água) e a concentração presente no prato (16,14% acetaldeído, 31,47% etanol e 52,39% água), bem como a diferença entre a temperatura de alimentação (353K) e a temperatura do prato (372K). Por último, no refeedor destrói-se 46,9 kW de exergia, devido também a troca de 742,9 kW entre o vapor de aquecimento a 428 K e o prato a 392K.

#### 4.2.2.2 Absorção de acetaldeído (k=6)

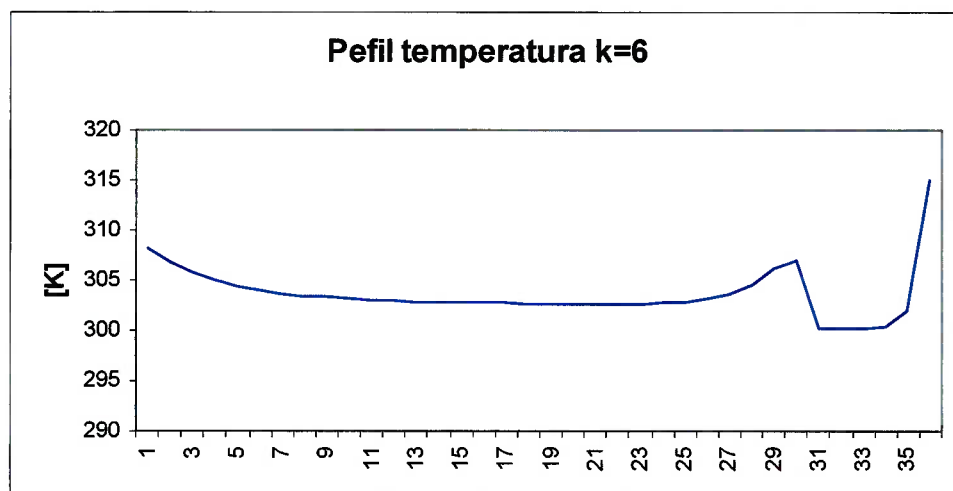
O objetivo desta operação é primeiro resfriar e condensar a corrente de gás quente proveniente da caldeira de recuperação, e segundo é tornar a corrente de gás exausto livre de acetaldeído e etanol.



O gás quente proveniente da caldeira de recuperação entra no fundo da torre de absorção e é resfriado com uma solução alcoólica fria. O calor de condensação do acetaldeído, etanol e água é removido através de um trocador lateral ( $k=7$ ) através do qual o líquido do fundo da torre de absorção passa e é reenviado para uma parte mais alta da torre de absorção. Além deste trocador de calor lateral, há ainda serpentinas com água de resfriamento em cada um dos pratos da torre de absorção, de modo que se pode remover calor em cada um dos pratos.

O perfil de temperatura da torre de absorção ( $k=6$ ) deveria comportar-se da seguinte maneira: quanto mais próximo do fundo, mais quente deveria ser o estágio, uma vez que a única fonte de calor é o gás quente que entra pelo fundo da torre. Entretanto não é isto que se observa na figura 4.8 abaixo:

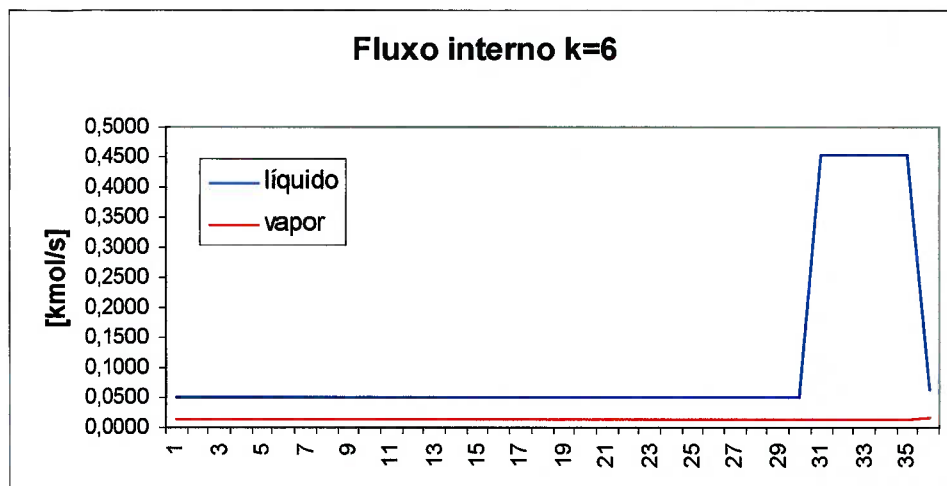
Fig 4.8: Perfil de temperatura da torre de absorção de acetaldeído – configuração original



Este comportamento da temperatura se dá devido à recirculação de parte do líquido do fundo da torre, que é resfriada num trocador lateral e alimentada novamente na torre na altura do prato 31. A leve elevação da temperatura na parte mais alta da torre deve-se à entrada da solução alcoólica de absorção a

uma temperatura maior que a temperatura dos gases que sobem através da torre.

Fig 4.9: Fluxo interno da torre de absorção de acetaldeído – configuração original



O grande salto de fluxo interno de líquido na parte inferior da torre de absorção se deve à recirculação utilizada para o resfriamento da corrente de gás.

Fig 4.10: Entalpia específica ao longo da torre de absorção de acetaldeído – configuração original

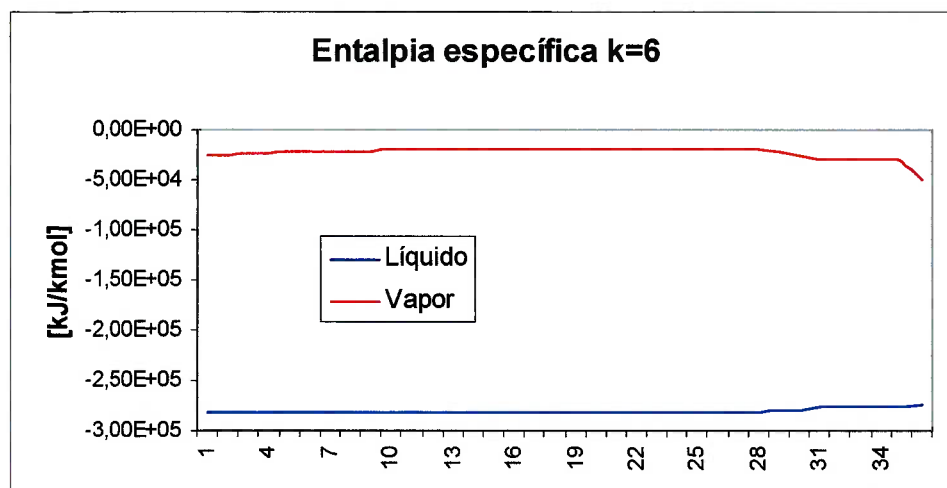
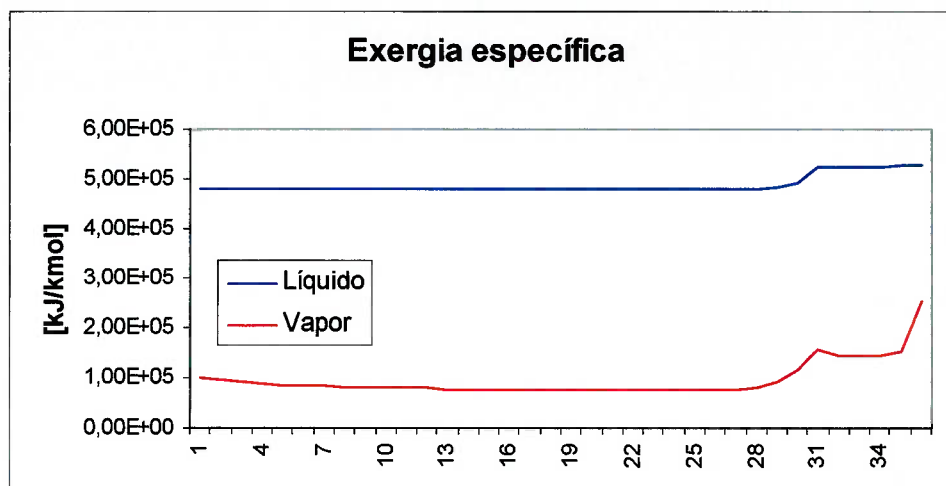


Fig 4.11: Exergia específica ao longo da torre de absorção de acetaldeído – configuração original



Deve-se notar que no caso da torre de absorção a exergia específica do líquido é maior que a do gás, e isto se deve à parcela química da exergia, pois a fase vapor é composta principalmente de nitrogênio e hidrogênio, compostos com exergia química menores que as do acetaldeído e etanol, presentes em grande quantidade na fase líquida. Isto é claramente mostrado nos perfis de concentração das fases vapor e líquida que circulam através da coluna de absorção, mostrados nos gráficos 4.12 e 4.13:

Fig 4.12: Perfil de concentração de líquido da torre de absorção de acetaldeído – configuração original

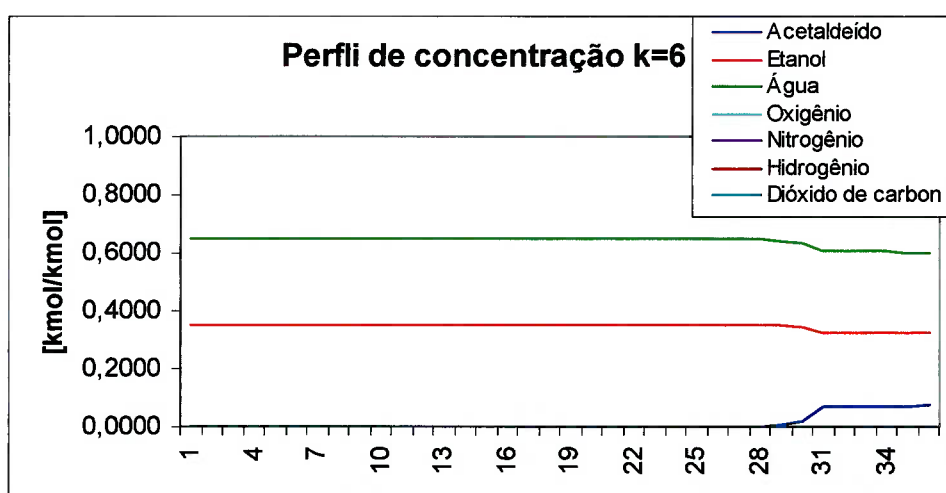
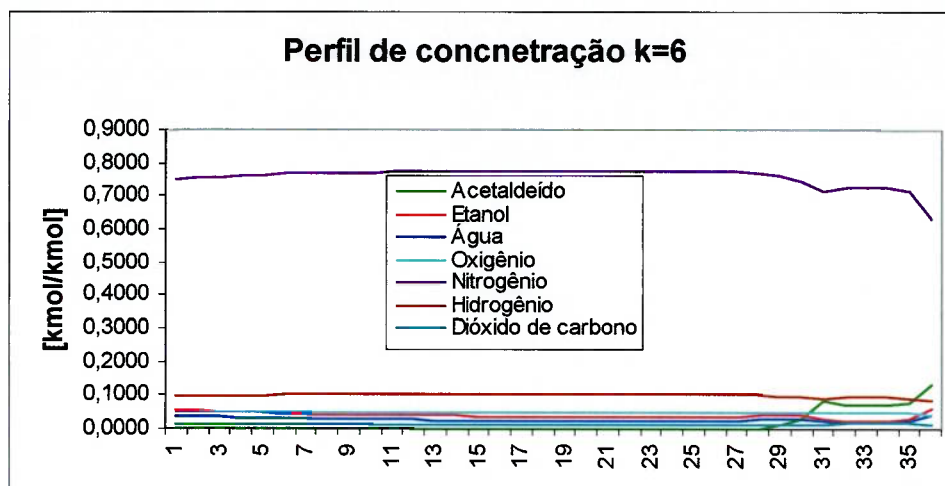
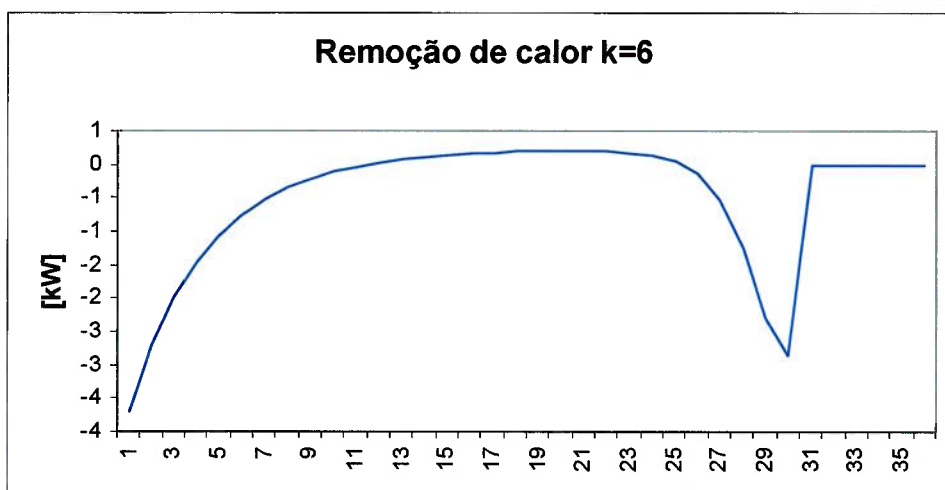


Fig 4.13: Perfil de concentração de vapor da torre absorção de acetaldeído – configuração original



A coluna de absorção não é adiabática, mas há remoção de calor em cada uma dos estágios, realizado por meio de serpentinas com água de resfriamento. A remoção de calor da coluna ocorre principalmente na parte superior, devido a entrada de produto quente pelo topo, e no fundo da torre onde a temperatura da torre é mais alta.

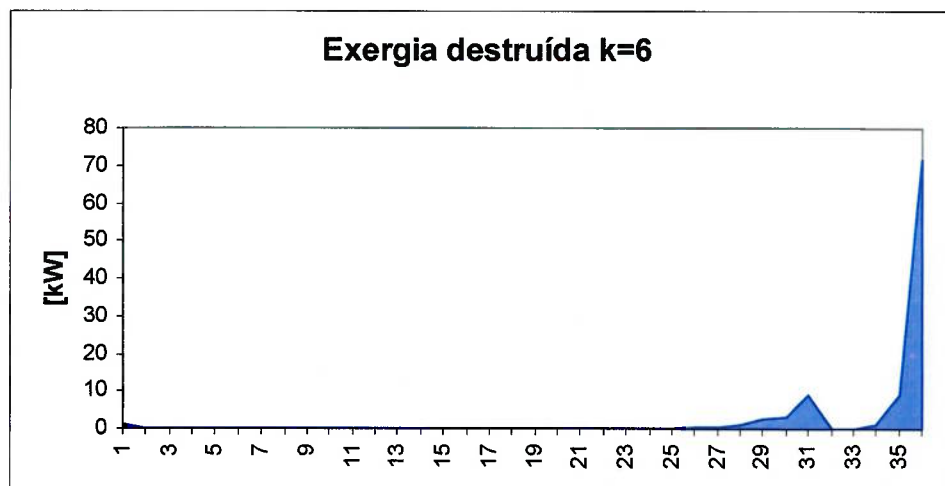
Fig 4.14: Remoção de calor torre da absorção de acetaldeído – configuração original



A destruição de exergia na torre de absorção é mostrada na figura seguinte,

4.15:

Fig 4.15: Exergia destruída ao longo da torre de absorção de acetaldeído – configuração original



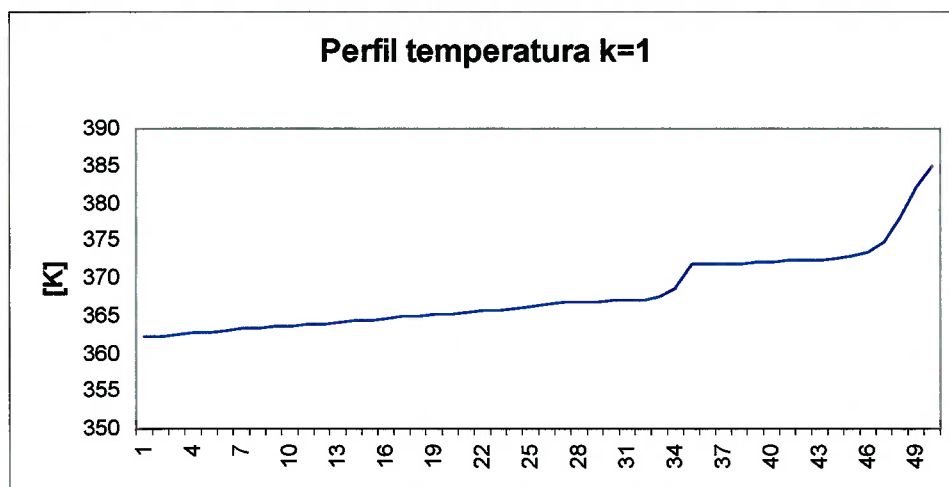
A maior parte da irreversibilidade (97,7kW) ocorre nos primeiros 9 estágios de separação, devido à grande diferença de potencial químico: o fluido que entra num determinado estágio está muito longe de estar em equilíbrio com aquele que deixa o estágio de separação. Esta diferença ocorre devido a dois fatores, primeiro o gás que entra está com concentração e temperatura muito diferentes daquelas do fluido que deixa a torre – ver balanço de massa e energia do Apêndice - segundo a recirculação lateral promove a mistura de componentes que já haviam sido separados.

#### 4.2.2.3 Torre de esgotamento de etanol (k=1)

O objetivo desta operação é recuperar todas as correntes de solução alcoólicas existentes no processo. As correntes, mistura com diversas proporções de etanol e água, alimentam a torre de destilação, e água isenta de etanol deixa o fundo da torre como efluente, enquanto pelo topo escapa uma mistura de aproximadamente 90% de etanol.

O perfil de temperatura da torre de esgotamento é dado na figura 4.16 abaixo:

Fig 4.16: Perfil de temperatura da torre de esgotamento de etanol – configuração original



As variações abruptas da temperatura são causadas pela entrada de líquido nos estágios onde ocorrem estas mudanças. O gráfico dos fluxos internos de vapor e líquido mostra claramente as perturbações causadas pelas alimentações intermediárias.

Fig 4.17: Fluxo interno da torre de esgotamento de etanol – configuração original

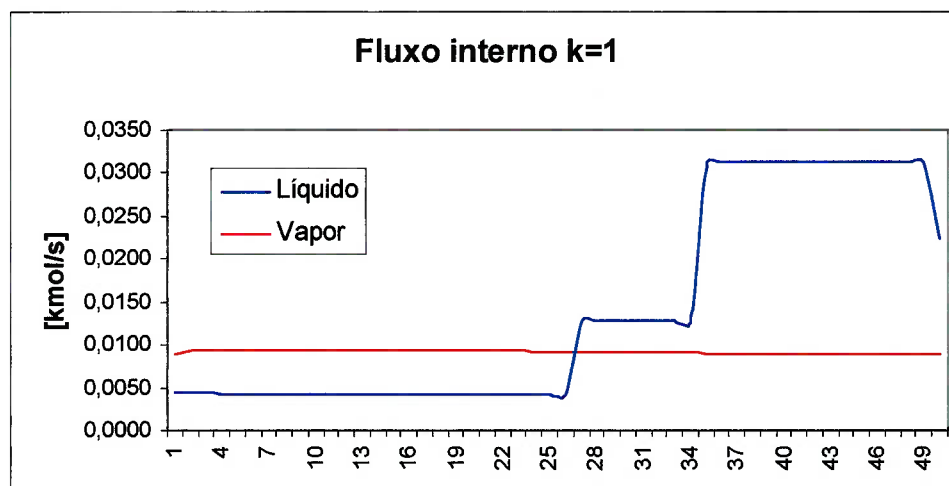


Fig 4.18: Entalpia específica ao longo da torre de esgotamento de etanol – configuração original

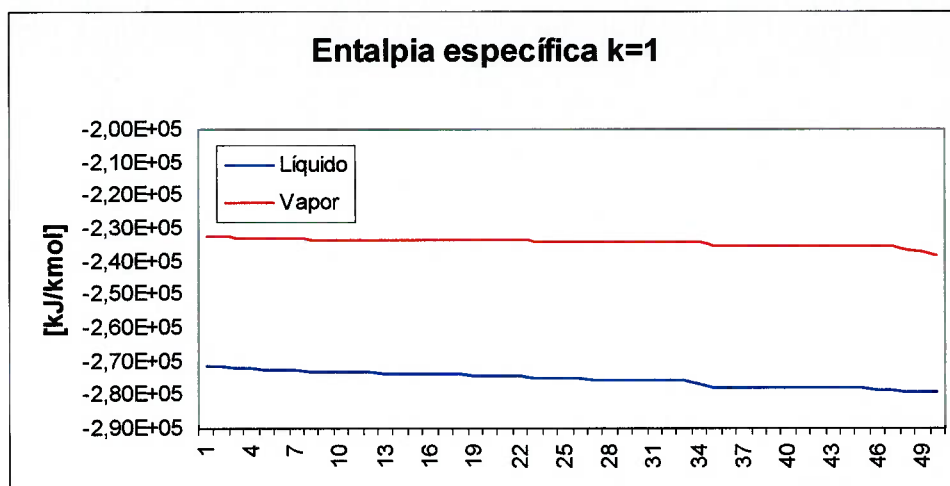


Fig 4.19: Exergia específica ao longo da torre de esgotamento de etanol – configuração original

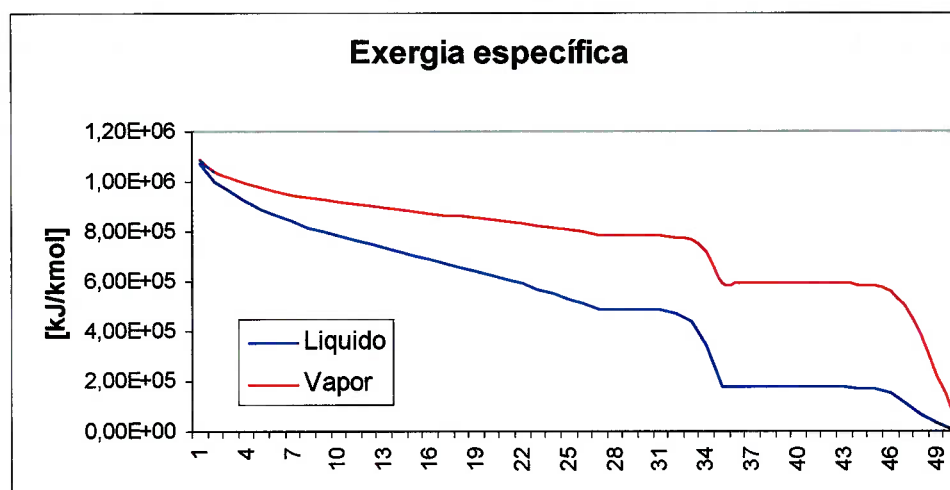
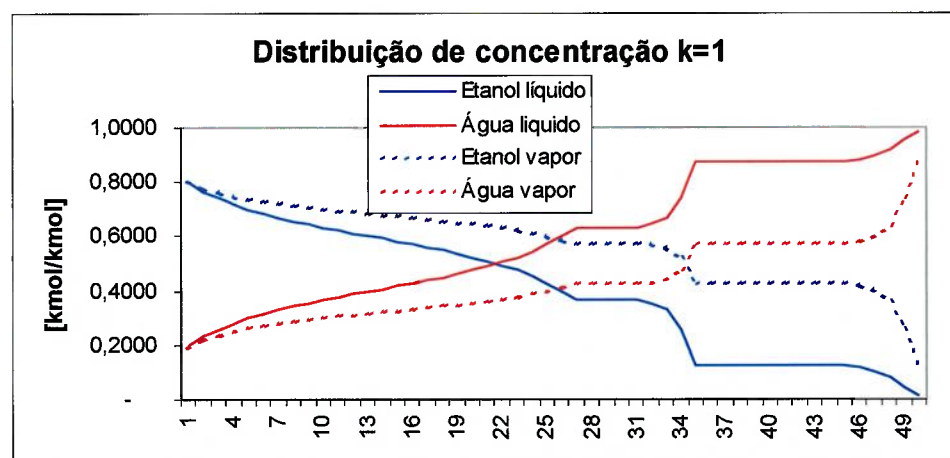


Fig 4.20: Perfil de concentração da torre de esgotamento de etanol – configuração original



A destruição de exergia ao longo da coluna de esgotamento de etanol é mostrada abaixo, na figura 4.21:

Fig 4.21: Exergia destruída ao longo da torre de esgotamento de etanol – configuração original



Aqui também a irreversibilidade é causada pela diferença entre potencial químico da solução que entra num estágio de separação e daquela que sai deste mesmo estágio. Esta diferença é mais acentuada na região de alimentação e na base da coluna. No refeedor, além da irreversibilidade causada pela diferença de potencial químico, há ainda aquela causada pela troca térmica.

#### 4.2.3 Configuração alternativa

O modelo alternativo busca racionalizar o uso da exergia no processo de produção de acetaldeído via oxidação parcial do etanol, diminuindo as irreversibilidades do processo. Para realizar este objetivo seguiu-se algumas das recomendações apresentadas por STICHLMAIR et (1998) e DOLDERSUM (1998) e descritas já no Capítulo 2, dentre elas:

- Otimização da rede de trocadores de calor entre as torres de absorção e (k=6) e destilação de acetaldeído (k=9) e esgotamento de etanol (k=1).



- Segregação das correntes de alimentação da torres de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ).
- Diminuição da recirculação entre a torre de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ) e a torre de absorção ( $k=6$ ).
- Escolha adequada do prato de alimentação da torre de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ).
- Substituição do trocador de calor lateral ( $k=7$ ) da torre de absorção ( $k=6$ ) por outro na entrada da torre, eliminando a necessidade de recirculação de líquido.
- Pré-aquecimento dos gases de alimentação do reator ( $k=5$ ) com os gases de saída da caldeira de recuperação ( $k=10$ ).
- Diminuição da água de lavagem dos gases na torre de lavagem ( $k=8$ ).
- Diminuição da razão de refluxo da torre de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ) e conseqüente alongamento do perfil de concentração.

Na figura 4.22 se apresenta o fluxograma com o modelo alternativo proposto. Os balanços de massa e energia, bem como o de exergia são apresentados em separado no Apêndice, também por motivos de simplicidade. O quadro resumo seguinte mostra o efeito das modificações implementadas na irreversibilidade do processo.

Fig 4.22: Fluxograma modelo alternativo

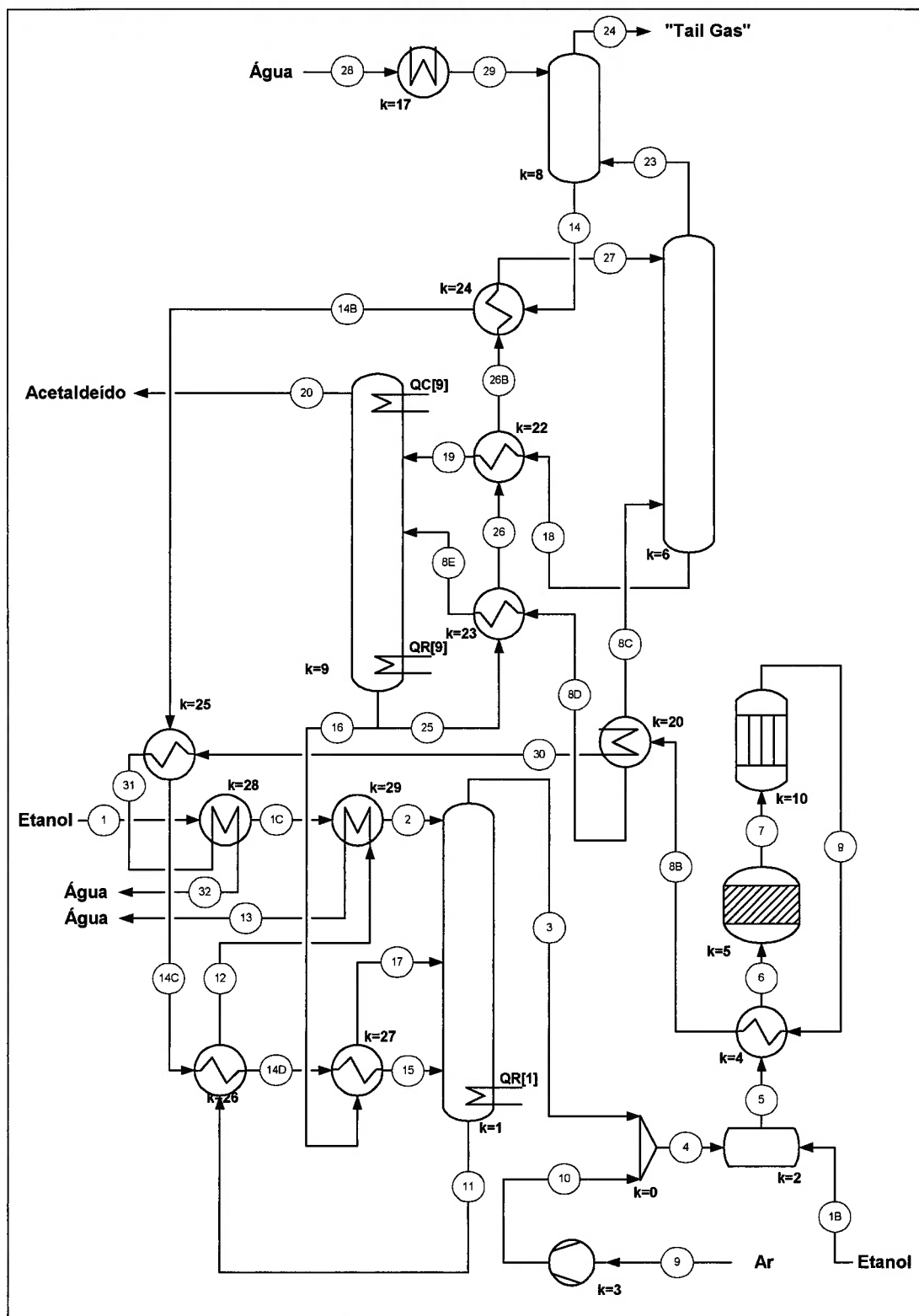


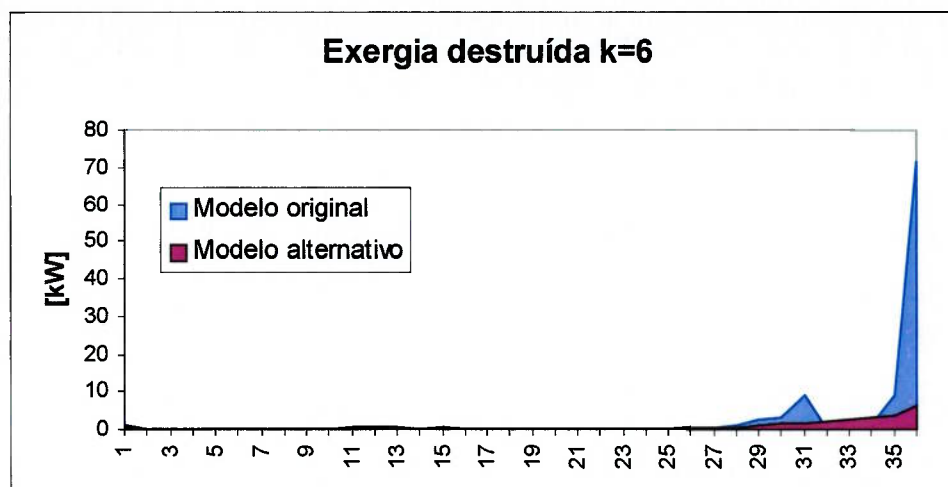
Tabela 4.6: Quadro resumo simulação modelo alternativo

k = unidade	F <sub>entra</sub>	F <sub>saí</sub>	$\Sigma(F.h)_{entra}$	$\Sigma(F.h)_{saí}$	$\Sigma Q$	$\Sigma(F.ex)_{entra}$	$\Sigma(F.ex)_{saí}$	$\Sigma Q.\theta$	U	f
	[kmol/s]	[kmol/s]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[kW]	[%kW]
k = 0	0,0202	0,0202	-1.784	-1.785	0	8.187	8.157	0	31	3,3%
k = 1	0,0439	0,0439	-12.216	-11.920	297	8.951	9.009	90	33	3,6%
k = 2	0,0222	0,0222	-2.322	-2.243	79	10.422	10.440	38	20	2,1%
k = 3	0,0129	0,0129	-99	-86	12	2	13	12	1	0,2%
k = 4	0,0222	0,0222	-2.243	-2.178	65	10.440	10.452	18	5	0,6%
k = 5	0,0222	0,0248	-2.178	-2.178	0	10.452	10.016	-1	436	47,4%
k = 6	0,0450	0,0450	-9.108	-9.163	-55	18.493	18.464	0	29	3,2%
k = 8	0,0452	0,0452	-9.663	-9.663	0	1.397	1.392	0	5	0,5%
k = 9	0,0423	0,0423	-11.152	-11.034	117	24.766	24.806	232	193	21,0%
K = 10	0,0248	0,0248	-2.178	-2.779	-601	10.016	9.690	-183	143	15,6%
k = 20	0,0248	0,0248	-2.844	-3.320	-476	9.672	9.618	-49	6	0,6%
K = 21	0,0098	0,0098	-2.627	-2.627	0	5.620	5.614	0	6	0,6%
K = 22	0,0322	0,0322	-8.788	-8.642	145	17.168	17.181	18	5	0,5%
K = 23	0,0098	0,0098	-2.627	-2.572	55	5.614	5.625	17	6	0,7%
K = 24	0,0300	0,0300	-8.391	-8.415	-25	14.490	14.489	-1	0	0,0%
K = 25	0,0336	0,0336	-9.535	-9.461	74	1.205	1.213	11	3	0,3%
K = 26	0,0336	0,0336	-9.461	-9.405	56	1.213	1.222	11	2	0,2%
K = 27	0,0336	0,0336	-9.405	-9.387	18	1.222	1.226	3	0	0,0%
K = 28	0,1300	0,1300	-36.694	-36.720	-25	439	435	-2	2	0,2%
k = 29	0,0366	0,0366	-10.278	-10.283	-5	812	811	-1	0	0,0%
k = 17	0,0324	0,0324	-9.263	-9.288	-24	101	102	1	0	0,0%
<b>K = global</b>	<b>0,7071</b>	<b>0,7098</b>	<b>-153.593</b>	<b>-153.862</b>	<b>-268</b>	<b>160.581</b>	<b>159.872</b>	<b>215</b>	<b>925</b>	<b>100,0%</b>

A comparação do quadro acima, do modelo alternativo, com o do modelo original mostra que o modelo alternativo reduz a irreversibilidade global do modelo original em 152 kW, ou 14,1%, e que a maior parte desta diferença ocorre em dois equipamentos, a coluna de destilação de acetaldeído (k=9), com uma redução de 54 kW, ou 21,9%, e a coluna de absorção de acetaldeído, reduzindo em 76 kW, ou 72,1% da irreversibilidade original. O restante da diminuição da destruição de exergia, 28 kW, deve-se principalmente a nova rede de trocadores de calor, que interligam as torres de destilação e absorção de acetaldeído e etanol.

As modificações de introduzidas na torre de absorção (k=6) causaram o maior efeito na irreversibilidade, a figura 4.23 compara os dois modelos:

Fig 4.23: Comparação irreversibilidade da torre de absorção (configuração original versus alternativa)

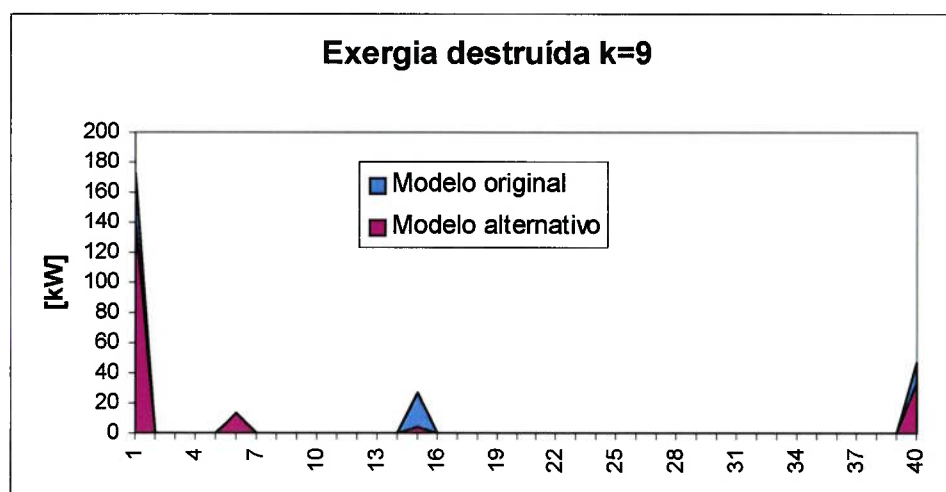


A eliminação da recirculação intermediária, possível graças à implantação de um condensador na entrada da torre de absorção ( $k=20$ ), diminuiu a irreversibilidade causada pela mistura de correntes de concentração muito distintas. Este efeito pode ser bem observado no gráfico, comparando as áreas vermelhas (novo modelo) com a área azul (original) na região do prato 31. Outra redução de destruição de exergia obteve-se ao diminuir a temperatura de entrada na torre de absorção, bem como da concentração de acetaldeído, e isto se pode notar comparando as áreas vermelhas e azuis na região de entrada da torre (prato 36). A destruição de exergia devido ao novo condensador ( $k=20$ ), 6 kW, é largamente compensada pela diminuição ocorrida na torre de absorção.

Houve também um ganho significativo de eficiência na torre de destilação de acetaldeído, e este foi causado pela diminuição da vazão de alimentação da torre, de 0,05 kmol/s para 0,03 kmol/s, pela diminuição da vazão de refluxo, de 0,01666 kmol/s para 0,01173 kmol/s e também pela segregação das correntes de alimentação.

A diminuição da alimentação é consequência da implantação do condensador ( $k=20$ ) na entrada da torre de absorção, pois permitiu a diminuição da recirculação de solução alcoólica do fundo da torre de destilação para o topo da torre de absorção – ver a corrente 25 nos balanços de massa e energia nos Apêndices II e III, há uma diminuição de 0,05 kmol/s para 0,03 kmol/s, ou 40% da vazão original. Outra consequência da presença do condensador é a possibilidade de segregar as correntes de alimentação da torre de destilação (correntes 8E e 19, do fluxograma), com a corrente mais rica em acetaldeído (corrente 19) sendo alimentada num ponto mais alto da torre de destilação, enquanto aquela mais pobre (corrente 8E) é alimentada 9 pratos abaixo. A figura 4.24 mostra a diferença entre o modelo original e o alternativo, na destruição de exergia da torre de destilação de acetaldeído.

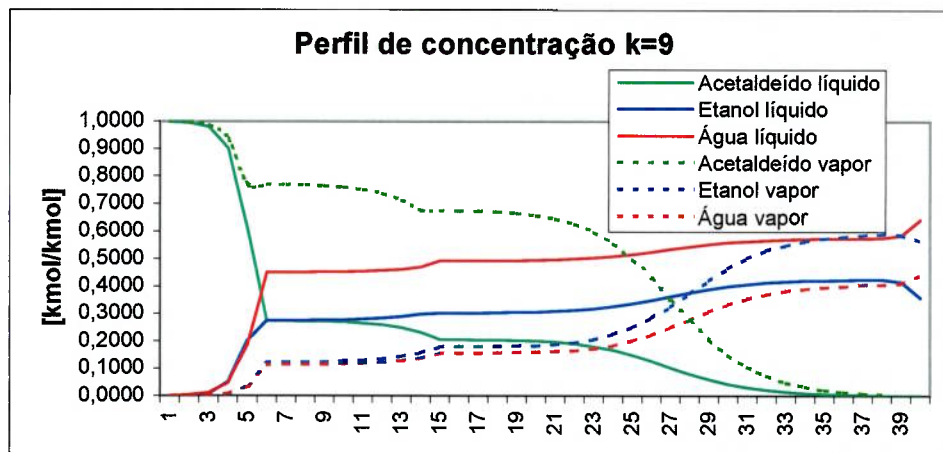
Fig 4.24: Comparação irreversibilidade da torre de destilação de acetaldeído (configuração original versus alternativa)



Outra diferença significativa entre um modelo e outro, no caso da torre de destilação de acetaldeído, é a diminuição da razão de refluxo. Analisando o perfil de concentração da torre de destilação no modelo original nota-se que a

partir do estágio 10 não há mais enriquecimento do acetaldeído, isto significa que 25% dos estágios de equilíbrio não tinham função alguma de separação.

Fig 4.25: Perfil de concentração da torre de destilação – configuração alternativa



Ao diminuir a razão de refluxo, o perfil de concentração se alonga, e consegue-se fazer uso de todos os estágios de separação, e com a conseqüente diminuição da necessidade de energia no refeedor de 743 kW para 543 kW, ou seja, 26,9%

A rede de trocadores de calor da planta foi aumentada, de modo a permitir a melhor integração térmica entre as diversas correntes; a diminuição das irreversibilidades, devido a nova rede de trocadores, foi de 28 kW.

A configuração original consumia 1171 kW de potência, na forma de vapor de aquecimento, a nova configuração diminuiu 28% deste consumo, levando-o para 840kW de potência térmica. Este consumo de vapor se dá nos refeedores das duas colunas, de esgotamento de etanol ( $k=1$ ) e de destilação de acetaldeído ( $k=9$ ), e também no pré-aquecedor da mistura reacional ( $k=4$ ). Este último equipamento, que anteriormente utilizava vapor para o aquecimento, na nova configuração utiliza os gases de saída da caldeira de recuperação. A tabela 4.7, resume as informações anteriores e mostra também a potência

específica do processo, isto é, quanto de energia é consumida para produzir 1 kg de acetaldeído.

**Tabela 4.7: Potência térmica do processo**

Potencia Térmica [kW]			
	Original	Alternativa	Redução
Refervedor (k=1)	360,4	297,0	-18%
Refervedor (k=9)	742,9	543,0	-27%
Aquecedor (k=4)	68,0	-	-100%
Total	1.171,3	840,0	-28%
Potencia Térmica Específica [kJ/kg]			
Total	5.622	4.032	-28%

Quando se considera exergia destruída como critério de comparação tem-se uma redução de 1076 kW para 925 kW, ou 14%, e uma destruição específica de exergia de 5165 kJ/kg para a configuração original e 4440 kJ/kg para a configuração alternativa.

## **Capítulo 5**

### **Conclusões e recomendações**

#### **5.1 Conclusões**

O modelo termodinâmico elaborado estima os valores medidos na planta com um desvio médio de  $0,67\% \pm 3,5\%$ .

O processo de produção de acetaldeído via oxidação parcial do etanol, nas condições operacionais estudadas, apresenta 1.076 kW de irreversibilidade.

As principais causas de irreversibilidade no processo de produção de acetaldeído são a reação de oxidação (458 kW), a troca térmica dos gases quentes do reator na caldeira de recuperação (118 kW), a recirculação lateral para resfriamento na torre de absorção (105 kW), o reciclo do fundo da torre de destilação de acetaldeído para a torre de absorção e a alta vazão de refluxo interna da torre de destilação de acetaldeído (247 kW).

A análise exergética do processo de produção de acetaldeído via oxidação parcial de etanol, conforme estabelecida e calculada neste trabalho, é capaz de indicar, quantificar e hierarquizar as operações e locais de geração de irreversibilidades.

Seguindo as diretrizes básicas de diminuição de geração de irreversibilidades, ou seja, diminuindo as diferenças de potenciais químico e térmico, foi possível estabelecer um modelo de processo alternativo ao original.



O modelo alternativo, operando nas mesmas condições de alimentação de matérias-primas e meio ambiente que o modelo original, apresenta uma geração de irreversibilidade de 925 kW, ou 14,1% menor que o modelo original.

A potencia específica consumida pela planta foi reduzida em 28%, em relação a configuração original, de 5622 kJ/kg para 4032 kJ/kg. A destruição de exergia, por sua vez apresentou uma redução de 5165 kJ/kg para 4440 kJ/kg, ou 14%

As modificações sugeridas foram eliminação do reciclo lateral da torre de absorção de acetaldeído, a diminuição do reciclo do fundo da torre de destilação de acetaldeído para a torre de absorção em 40%, a segregação da alimentação da torre de destilação de acetaldeído, a diminuição da razão de refluxo interna na torre de destilação de acetaldeído e o pré-aquecimento dos gases de reação com os gases exaustos da caldeira de recuperação, e finalmente, a implementação de uma nova rede de trocadores de calor.

## 5.2 Recomendações

As mudanças na rede de trocadores de calor foram realizadas sem uso de nenhuma técnica de otimização, assim a aplicação de técnica de integração energética na rede de trocadores de calor tipo “pinch”, pode elevar ainda mais a eficiência do modelo alternativo.

Completar a análise exérgica com a avaliação termoeconômica, com objetivo de avaliar a viabilidade econômica das modificações planejadas.

Não foi considerado neste trabalho o sistema o lado do vapor, o que subestima a destruição de exergia. Assim, uma próxima etapa é modelar o sistema de geração

de vapor e água de resfriamento da planta de acetaldeído em conjunto com o modelo de processo.

Diminuir a pressão de operação da torre de esgotamento de etanol, com o objetivo de acoplar termicamente as torres de destilação de etanol e acetaldeído. A torre de esgotamento de etanol poderia assim receber correntes com baixa exergia.

Avaliar aplicação de bombas de calor para geração de vapor de baixa pressão com o rejeito térmico da planta, uma vez que há disponibilidade de rejeitos térmicos na planta.

Os gases exaustos da torre de absorção de acetaldeído possuem uma grande quantidade de hidrogênio. Esta corrente pode ser utilizada como combustível pobre em algum esquema de combustão.

O modelo atual não é capaz de prever a perda de carga ao longo da planta. Para uma melhor avaliação das alternativas o modelo deveria ser capaz de calcular o escoamento através da planta e as potências necessárias em cada uma das bombas e no soprador.

## Referências bibliográficas

BILLET, R. ***Evaporation Technology: Principles, Applications, Economics***. VCH Verlagsgesellschaft mbH, 1989.

NAKASHIMA, C. Y. ***Modelo de Comportamento Termodinâmico de uma Bomba Multifásica do Tipo Duplo Parafuso***, Tese de Mestrado, EPUSP, Universidade de São Paulo, 2000.

DE JONG, E. D.; KEUKEN, H.; VAN DER POL, E.; DEN DECKER, E. e KERCKHOFFS, J. H. "Exergy Analysis of Industrial Process Using AI Techniques". ***Computers Chemical Engineering***, v20, p S1631-S1636, 1996.

DOLDRSUM, A. "Exergy Analysis Proves Viability of Process Modification". ***Energy Conversion and Management***, v 38, p 1781-1789, 1998.

ERRERA, M. R. e MILANEZ, L. F. "Thermodynamic Analysis of a Coke Dry Quenching Unit". ***Energy Conversion and Management***, v 41, p 109-127, 2000.

HINDERINK, A. P.; KERKHOF, F. P. J. M.; LIE, A. B. K.; DE SWAAN ARONS, J. e VAN DER KOOI, H. J. "Exergy Analysis with a Flowsheeting Simulator – I Theory: Calculations Exergies of Material Streams". ***Chemical Engineering Science***, v 51, n 20, p. 4693-4700, 1996

HINDERINK, A. P.; KERKHOF, F. P. J. M.; LIE, A. B. K.; DE SWAAN ARONS, J. e VAN DER KOOI, H. J. "Exergy Analysis with a Flowsheeting Simulator – II Application: Synthesis Gas Production from Natural Gas". ***Chemical Engineering Science***, v 51, n 20, p. 4701-4715, 1996

JOHNSON, W. K.; FINK, U. e SAKUMA, Y. ***Acetaldehyde***, CEH Product Review, SRI International, 1998.

- KOTAS, T. J., *The Exergy method of thermal plant analysis*. , Butterworths, 1985.
- LIDE, D. R., *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 85 ed., CRC Press, 2004.
- OLIVEIRA JR., S. e VAN HOMBECK, M. "Exergy Analysis of Petroleum Separation Process in Offshore Platforms". *Energy Conversion and Management*, v 38, p 1577-1584, 1997.
- OLIVEIRA JR, S. *Análise Termodinâmica e Termoeconômica de Processos de Conversão de Energia*. São Paulo, EPUSP, 1996, /Notas de Aula.  
Xerocopiado/
- PERRY, R. H. e GREEN, D. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. 6º ed., McGraw-Hill International Editors, 1984.
- RIVERO, R. "Application of Exergy Concept in the Petroleum Refining and Petrochemical Industry". *Energy Conversion and Management*, v 43, p 1199-1220, 2002.
- SORIN, M., BONHIVERS, J. -C. e PARIS, J. "Exergy Efficiency and Conversion of Chemical Reactions". *Energy Conversion and Management*, v 39, p 1863-1868, 1998.
- SORIN, M. e PARIS, J. "Integrated Exergy Load Distribution Method and Pinch Analysis" *Computers Chemical Engineering*, v23, p 497-507, 1999.
- SORIN, M e SPINNER, B. "The Role of Equilibrium Thermodynamics in Process Synthesis", *Applied Thermal Engineering*, v 21, p 1369-1382, 2001.
- STICHLMAIR, J. e FAIR, J. R. *Distillation: Principles and Practice*, Wiley-Liss, 1998.
- TORRES, E. A. e GALLO, W. L. R. "Exergetic Evaluation of a Cogeneration System in a Petrochemical Complex". *Energy Conversion and Management*, v 39, p 1845-1852, 1998.

VAN GOOL, W. "Thermodynamics of Chemical References for Exergy Analysis". ***Energy Conversion and Management***, v 39, p 1719-1728, 1998.

Apêndice I

Dados de operação da planta de acetaldeído

AI.1 Vazões

Todos os valores são expressos em [kg/h], inclusive QR[1] e QR[9], que representam a entrada de vapor de baixa pressão nos refeedores das torres (k=1) e (k=9) respectivamente.

	1	1B	20	9	19	27	21	18+21	29	RFLX	16+25	QR[1]	QR[9]
28/12/00 1:00	599	265	1.032	1.322	6.903	4.734	39.943	46.846	1.003	2.398	5.418	650	1.260
28/12/00 2:00	600	262	2	1.318	6.892	4.733	40.032	46.923	1.000	2.410	5.344	651	1.278
28/12/00 3:00	599	407	870	1.316	7.015	4.718	39.936	46.952	998	2.395	5.243	651	1.355
28/12/00 4:00	600	398	2	1.319	6.977	4.714	39.946	46.923	999	2.396	5.444	649	1.312
28/12/00 5:00	600	379	612	1.323	7.070	4.733	39.925	46.996	996	2.402	5.464	650	1.273
28/12/00 6:00	600	367	736	1.322	7.003	4.710	40.244	47.247	998	2.403	5.343	653	1.215
28/12/00 7:00	601	337	680	1.327	7.045	4.727	39.889	46.934	1.002	2.412	5.366	652	1.214
28/12/00 8:00	600	325	677	1.324	7.061	4.753	39.814	46.875	998	2.390	5.362	659	1.252
28/12/00 9:00	602	463	683	1.332	7.151	4.728	40.148	47.299	1.002	2.405	5.427	659	1.197
28/12/00 10:00	602	179	624	1.327	7.181	4.703	40.173	47.355	996	2.391	5.406	659	1.195
28/12/00 11:00	600	225	591	1.317	7.125	4.736	39.931	47.056	1.004	2.416	5.480	661	1.235
28/12/00 12:00	600	326	630	1.311	6.976	4.720	40.054	47.030	1.001	2.395	5.464	663	1.188
28/12/00 13:00	599	389	624	1.309	7.119	4.710	39.921	47.040	998	2.405	5.284	661	1.231
28/12/00 14:00	600	374	627	1.312	7.146	4.712	40.091	47.236	1.002	2.392	5.462	659	1.184
28/12/00 15:00	600	360	699	1.305	7.108	4.725	39.879	46.987	999	2.397	5.477	660	1.252

28/12/00 16:00	600	353	663	1.290	7.078	4.721	40.080	47.158	997	2.412	5.467	680	1.232
28/12/00 17:00	600	330	639	1.280	7.134	4.685	39.920	47.054	1.012	2.400	5.436	681	1.190
28/12/00 18:00	600	304	684	1.292	7.093	4.703	40.008	47.101	1.000	2.397	5.411	682	1.278
28/12/00 19:00	600	279	643	1.288	7.117	4.710	39.851	46.968	1.001	2.405	5.462	680	1.270
28/12/00 20:00	599	253	672	1.284	7.143	4.737	40.154	47.296	999	2.380	5.481	681	1.253
28/12/00 21:00	598	201	720	1.309	7.300	4.696	40.188	47.487	1.000	2.146	5.438	690	1.217
28/12/00 22:00	600	322	849	1.308	7.122	4.700	40.174	47.296	1.003	2.175	5.405	689	1.311
28/12/00 23:00	600	300	788	1.318	7.159	4.732	40.376	47.535	1.000	2.153	5.364	691	1.314
29/12/00 0:00	599	308	978	1.318	7.207	4.735	39.919	47.126	996	2.014	5.316	690	1.314
29/12/00 1:00	600	387	794	1.321	7.163	4.704	40.008	47.171	993	2.233	5.366	689	1.310
29/12/00 2:00	600	339	670	1.318	7.151	4.721	39.646	46.797	1.003	2.285	5.473	651	1.332
29/12/00 3:00	600	299	698	1.303	7.227	4.721	39.931	47.158	966	2.283	5.465	649	1.278
29/12/00 4:00	600	277	704	1.324	7.178	4.709	39.672	46.850	999	2.274	5.452	650	1.277
29/12/00 5:00	600	409	696	1.323	7.304	4.813	40.158	47.462	1.004	2.291	5.554	652	1.262
29/12/00 6:00	600	361	813	1.328	7.383	4.839	39.851	47.234	997	2.046	5.581	650	1.236
29/12/00 7:00	599	320	684	1.318	7.381	4.831	39.650	47.032	998	2.221	5.572	650	1.243
29/12/00 8:00	599	287	646	1.315	7.409	4.873	39.965	47.374	1.002	2.239	5.617	650	1.217
29/12/00 9:00	599	307	659	1.327	7.347	4.821	39.995	47.341	986	2.230	5.565	651	1.193
29/12/00 10:00	600	330	641	1.321	7.517	4.854	39.945	47.461	1.010	2.225	5.601	650	1.258
29/12/00 11:00	600	383	724	1.303	7.404	4.861	39.861	47.265	1.073	2.208	5.614	649	1.203
29/12/00 12:00	600	349	608	1.304	7.496	4.946	39.931	47.427	1.121	2.223	5.695	648	1.168
29/12/00 13:00	599	323	611	1.300	7.777	5.039	40.264	48.041	1.119	2.217	5.786	649	1.244
29/12/00 14:00	599	295	478	1.302	8.220	5.189	40.032	48.252	1.003	2.192	6.195	650	1.240
29/12/00 15:00	600	306	712	1.298	7.858	5.182	40.168	48.026	1.101	2.195	6.181	649	1.279
29/12/00 16:00	600	278	825	1.291	7.847	5.232	39.976	47.823	1.121	2.153	6.059	660	1.348
29/12/00 17:00	600	256	735	1.300	7.882	5.244	40.024	47.906	1.185	2.206	5.937	671	1.360
29/12/00 18:00	600	374	909	1.310	7.950	5.240	39.917	47.867	1.200	2.213	5.918	672	1.397
29/12/00 19:00	600	338	891	1.303	7.913	5.239	40.050	47.963	1.204	2.220	5.906	667	1.344
29/12/00 20:00	599	300	473	1.315	7.823	5.253	40.019	47.842	1.198	2.396	6.125	660	1.251
29/12/00 21:00	600	408	828	1.327	7.935	5.240	39.982	47.916	1.202	2.396	6.105	662	1.457
29/12/00 22:00	599	377	752	1.329	7.940	5.250	40.383	48.323	1.198	2.514	5.989	659	1.440

29/12/00 23:00	600	341	724	1.338	7.900	5.224	39.928	47.828	1.197	2.521	6.068	659	1.455
30/12/00 0:00	599	304	696	1.331	7.927	5.210	39.827	47.755	1.196	2.527	6.020	661	1.501
30/12/00 1:00	600	275	731	1.336	7.920	5.217	39.709	47.629	1.200	2.520	6.066	660	1.442
30/12/00 2:00	600	385	749	1.336	7.924	5.235	40.206	48.129	1.204	2.520	6.035	660	1.450
30/12/00 3:00	600	338	748	1.325	7.930	5.261	39.974	47.904	1.201	2.525	6.066	662	1.443
30/12/00 4:00	599	306	747	1.341	7.913	5.107	40.078	47.992	1.203	2.533	5.968	660	1.447
30/12/00 5:00	600	357	701	1.334	7.906	5.101	39.882	47.788	1.200	2.531	5.960	661	1.464
30/12/00 6:00	599	424	829	1.342	7.929	5.203	39.963	47.892	1.199	2.400	6.061	679	1.426
30/12/00 7:00	599	366	753	1.326	7.893	5.202	40.099	47.992	1.202	2.492	6.060	679	1.448
30/12/00 8:00	601	340	742	1.329	7.901	5.192	39.900	47.801	1.166	2.487	6.070	681	1.495
30/12/00 9:00	600	308	657	1.328	7.915	5.195	40.195	48.111	1.202	2.489	6.070	683	1.443
30/12/00 10:00	600	275	733	1.321	7.860	5.189	40.304	48.164	1.199	2.458	6.068	681	1.404
30/12/00 11:00	600	231	721	1.324	7.913	5.196	40.291	48.203	1.201	2.453	6.042	679	1.419
30/12/00 12:00	599	190	792	1.324	7.937	5.146	40.150	48.088	1.202	2.442	6.033	680	1.417
30/12/00 13:00	600	182	680	1.319	7.908	5.160	39.956	47.864	1.200	2.457	6.046	684	1.539
30/12/00 14:00	599	399	744	1.308	7.907	5.154	39.811	47.718	1.201	2.453	6.042	685	1.416
30/12/00 15:00	601	361	766	1.303	7.890	5.173	39.960	47.850	1.200	2.394	6.066	684	1.469
30/12/00 16:00	600	327	1.024	1.293	7.778	5.164	39.826	47.604	1.199	2.626	6.049	684	1.455
30/12/00 17:00	599	308	2.428	1.374	7.676	4.771	39.981	47.657	1.199	2.152	5.657	685	1.830
30/12/00 18:00	600	283	14	1.464	7.918	5.109	40.025	47.943	1.201	2.335	5.957	690	1.460
30/12/00 19:00	600	266	863	1.493	7.864	5.125	40.025	47.889	1.199	2.408	5.970	690	1.436
30/12/00 20:00	599	366	746	1.501	7.822	5.124	40.084	47.905	1.199	2.407	5.969	692	1.396
30/12/00 21:00	600	412	725	1.410	7.846	5.124	40.319	48.165	1.194	2.395	5.967	722	1.371
30/12/00 22:00	600	404	986	1.412	7.783	5.112	39.962	47.745	1.200	2.412	5.956	722	1.355
30/12/00 23:00	600	368	966	1.402	7.930	5.129	40.136	48.066	1.201	2.394	5.968	728	1.237
31/12/00 0:00	600	335	1.078	1.421	7.898	5.113	39.786	47.684	1.200	2.407	5.947	730	1.482
31/12/00 1:00	599	451	644	1.409	7.871	5.130	39.951	47.822	1.199	2.652	5.970	734	1.475
31/12/00 2:00	600	413	784	1.406	7.875	5.112	39.869	47.744	1.202	2.160	5.943	731	1.486
31/12/00 3:00	601	368	1.114	1.393	7.849	5.120	40.373	48.222	1.201	2.391	5.954	719	1.446
31/12/00 4:00	599	334	35	1.395	8.403	5.139	39.940	48.343	1.202	2.409	5.986	712	1.376
31/12/00 5:00	600	305	658	1.408	7.950	5.088	39.825	47.776	1.202	2.290	6.009	714	1.418



31/12/00 6:00	600	274	954	1.411	7.919	5.116	39.815	47.734	1.200	2.282	6.033	708	1.398
31/12/00 7:00	600	247	773	1.407	7.898	5.130	39.730	47.628	1.201	2.489	6.033	710	1.485
31/12/00 8:00	600	241	701	1.420	7.862	5.119	39.816	47.678	1.195	2.492	6.029	709	1.506
31/12/00 9:00	601	216	802	1.414	7.889	5.130	39.726	47.615	1.204	2.423	6.019	710	1.419
31/12/00 10:00	600	351	815	1.402	7.897	5.117	39.937	47.834	1.200	2.406	5.927	709	1.429
31/12/00 11:00	600	310	804	1.411	7.905	5.138	40.071	47.976	1.200	2.458	5.983	710	1.443
31/12/00 12:00	600	275	806	1.405	7.876	5.113	40.198	48.074	1.197	2.410	5.996	709	1.469
31/12/00 13:00	600	438	760	1.403	7.902	5.116	40.142	48.044	1.198	2.456	5.975	709	1.489
31/12/00 14:00	600	405	729	1.391	7.867	5.123	40.211	48.078	1.193	2.468	6.030	712	1.428
31/12/00 15:00	601	377	847	1.388	7.848	5.110	40.110	47.958	1.204	2.392	6.010	705	1.406
31/12/00 16:00	600	334	560	1.389	7.848	5.121	39.953	47.801	1.200	2.642	5.905	711	1.421
31/12/00 17:00	600	293	762	1.383	7.860	5.123	40.053	47.913	1.199	2.575	6.039	711	1.399
31/12/00 18:00	600	274	733	1.380	7.833	5.098	39.840	47.673	1.201	2.495	6.010	722	1.347
31/12/00 19:00	600	255	706	1.345	7.814	5.117	40.056	47.870	1.202	2.498	6.031	721	1.333
31/12/00 20:00	600	325	668	1.347	7.800	5.123	40.033	47.833	1.196	2.501	6.036	721	1.420
31/12/00 21:00	600	280	753	1.347	7.849	5.132	39.851	47.700	1.201	2.499	6.048	719	1.422
31/12/00 22:00	600	249	807	1.356	7.881	5.142	39.976	47.857	1.199	2.496	6.015	723	1.420
31/12/00 23:00	600	212	810	1.320	7.894	5.108	40.069	47.963	1.198	2.473	6.009	722	1.417
1/1/01 0:00	601	190	827	1.335	7.864	5.121	40.157	48.021	1.199	2.407	5.983	717	1.421
1/1/01 1:00	599	167	823	1.304	7.845	5.115	39.899	47.745	1.200	2.399	5.845	718	1.370
1/1/01 2:00	601	733	733	1.291	7.762	5.124	40.035	47.798	1.198	2.404	6.072	721	1.438
1/1/01 3:00	600	259	864	1.339	7.924	5.109	40.200	48.123	1.199	2.410	5.923	724	1.421
1/1/01 4:00	601	248	730	1.321	7.880	5.111	40.067	47.946	1.200	2.476	5.987	722	1.485
1/1/01 5:00	600	237	763	1.324	7.907	5.129	39.794	47.702	1.199	2.465	6.051	724	1.448
1/1/01 6:00	600	227	667	1.297	8.057	5.104	40.004	48.061	1.199	2.440	6.022	720	1.428
1/1/01 7:00	601	211	816	1.307	7.820	5.117	40.026	47.846	1.202	2.468	6.030	723	1.422
1/1/01 8:00	600	193	738	1.300	7.763	5.118	39.869	47.632	1.199	2.486	5.921	719	1.392
1/1/01 9:00	600	255	754	1.290	7.760	5.139	39.884	47.644	1.199	2.486	5.927	722	1.456
1/1/01 10:00	600	240	688	1.290	7.745	5.122	40.346	48.092	1.199	2.504	6.014	722	1.396
1/1/01 11:00	601	215	709	1.267	7.715	5.120	40.018	47.733	1.200	2.486	5.984	721	1.291
1/1/01 12:00	600	196	737	1.260	7.787	5.123	40.107	47.894	1.199	2.518	5.932	719	1.416

1/1/01 13:00	600	185	739	1.257	7.784	5.136	40.027	47.811	1.200	2.514	5.947	723	1.387
1/1/01 14:00	600	171	726	1.249	7.752	5.117	40.106	47.857	1.199	2.507	5.924	720	1.455
1/1/01 15:00	600	156	710	1.247	7.748	5.127	40.071	47.819	1.200	2.514	5.954	722	1.431
1/1/01 16:00	600	138	701	1.245	7.696	5.120	40.050	47.746	1.200	2.517	5.926	720	1.358
1/1/01 17:00	600	416	653	1.243	7.744	5.112	40.219	47.963	1.203	2.518	5.915	721	1.346
1/1/01 18:00	598	209	681	1.244	7.719	5.132	40.037	47.756	1.203	2.508	5.980	719	1.390
1/1/01 19:00	598	194	653	1.254	7.792	5.130	39.975	47.766	1.200	2.528	5.961	721	1.382
1/1/01 20:00	599	174	746	1.274	7.786	5.116	40.006	47.792	1.200	2.521	5.948	720	1.340
1/1/01 21:00	600	154	703	1.277	7.768	5.122	40.170	47.939	1.197	2.524	5.925	722	1.389
1/1/01 22:00	600	140	745	1.287	7.779	5.124	40.384	48.163	1.198	2.522	5.955	722	1.423
1/1/01 23:00	600	121	742	1.294	7.767	5.131	40.259	48.026	1.202	2.540	5.925	721	1.445
2/1/01 0:00	601	418	749	1.298	7.772	5.119	40.141	47.913	1.205	2.539	5.921	723	1.453
2/1/01 1:00	600	382	768	1.299	7.788	5.115	39.990	47.777	1.201	2.516	5.939	722	1.417
2/1/01 2:00	600	348	756	1.284	7.774	5.122	39.773	47.547	1.188	2.526	5.940	721	1.422
2/1/01 3:00	599	256	749	1.300	7.845	5.129	39.802	47.647	1.199	2.530	5.970	722	1.498
2/1/01 4:00	600	208	746	1.292	7.770	5.112	40.041	47.811	1.199	2.517	5.931	719	1.517
2/1/01 5:00	600	165	731	1.310	7.824	5.116	39.980	47.804	1.194	2.512	5.950	719	1.449
2/1/01 6:00	600	127	698	1.306	7.803	5.115	40.147	47.950	1.202	2.519	5.959	722	1.411
2/1/01 7:00	599	292	700	1.316	7.795	5.138	40.203	47.998	1.196	2.517	6.049	722	1.497
2/1/01 8:00	599	252	732	1.307	7.753	5.110	39.955	47.708	1.223	2.525	5.927	720	1.423
2/1/01 9:00	600	216	746	1.300	7.828	5.122	39.947	47.775	1.198	2.519	5.986	723	1.487
2/1/01 10:00	600	184	751	1.287	7.763	5.115	40.052	47.815	1.202	2.565	5.932	723	1.457
2/1/01 11:00	600	158	575	1.274	7.590	5.110	40.147	47.736	1.193	2.606	5.921	719	1.469
2/1/01 12:00	600	141	692	1.276	7.677	5.116	40.114	47.790	1.199	2.610	5.924	720	1.503
2/1/01 13:00	599	126	675	1.276	7.668	5.129	40.025	47.693	1.199	2.624	5.980	723	1.477
2/1/01 14:00	600	305	734	1.255	7.635	5.120	39.916	47.551	1.193	2.605	5.824	722	1.515
2/1/01 15:00	600	267	634	1.257	7.846	5.119	40.049	47.895	1.198	2.625	5.874	719	1.518
2/1/01 16:00	600	240	704	1.244	7.665	5.126	40.134	47.799	1.196	2.591	6.032	721	1.499
2/1/01 17:00	600	203	434	1.252	7.824	5.118	39.895	47.718	1.200	2.590	5.935	724	1.358
2/1/01 18:00	599	169	608	1.258	7.659	5.117	40.091	47.750	1.199	2.518	6.004	721	1.375
2/1/01 19:00	599	139	686	1.253	7.681	5.114	39.779	47.460	1.205	2.471	5.953	720	1.379

2/1/01 20:00	601	110	760	1.266	7.720	5.130	39.941	47.661	1.200	2.415	5.893	721	1.323
2/1/01 21:00	599	95	727	1.285	7.737	5.124	39.972	47.710	1.204	2.393	5.902	721	1.330
2/1/01 22:00	600	355	816	1.287	7.701	5.118	39.989	47.691	1.199	2.340	5.881	722	1.401
2/1/01 23:00	599	309	769	1.298	7.671	5.115	40.014	47.685	1.203	2.337	5.827	719	1.287
3/1/01 0:00	601	272	754	1.293	7.732	5.118	39.869	47.601	1.198	2.354	5.974	722	1.386
3/1/01 1:00	600	233	819	1.297	7.708	5.142	39.845	47.554	1.205	2.346	5.753	719	1.326
3/1/01 2:00	600	190	714	1.277	7.701	5.103	39.632	47.333	1.201	2.402	6.014	700	1.324
3/1/01 3:00	601	171	772	1.286	7.675	5.128	40.154	47.829	1.163	2.324	5.775	701	1.299
3/1/01 4:00	599	135	696	1.292	7.718	5.113	40.073	47.791	1.176	2.335	6.029	700	1.296
3/1/01 5:00	600	291	714	1.296	7.766	5.140	39.860	47.626	1.200	2.334	5.905	700	1.217
3/1/01 6:00	599	249	719	1.293	7.692	5.113	40.417	48.110	1.195	2.334	5.975	701	1.246
3/1/01 7:00	600	211	807	1.284	7.713	5.110	40.353	48.065	1.197	2.340	5.706	702	1.289
3/1/01 8:00	600	311	654	1.306	7.719	5.117	39.855	47.574	1.198	2.518	5.986	700	1.308
3/1/01 9:00	600	274	748	1.300	7.785	5.112	39.851	47.636	1.262	2.514	5.980	701	1.188
3/1/01 10:00	601	245	709	1.319	7.817	5.116	40.299	48.116	1.200	2.521	5.951	704	1.172
3/1/01 11:00	599	208	741	1.322	7.759	5.133	39.843	47.602	1.198	2.647	5.977	699	1.288
3/1/01 12:00	601	306	2	1.307	7.778	5.142	40.164	47.942	1.200	2.660	5.971	697	1.320
3/1/01 13:00	600	286	932	1.303	7.805	5.127	39.948	47.752	1.200	2.707	5.949	700	1.281
3/1/01 14:00	599	256	707	1.300	7.787	5.133	40.046	47.833	1.203	2.746	5.988	700	1.300
3/1/01 15:00	600	230	528	1.288	7.820	5.093	39.620	47.440	1.201	2.763	5.973	699	1.329
3/1/01 16:00	600	198	831	1.284	7.713	5.142	39.894	47.607	1.203	2.585	5.818	698	1.333
3/1/01 17:00	600	319	605	1.291	7.784	5.115	40.185	47.969	1.200	2.497	6.033	699	1.216
3/1/01 18:00	600	297	702	1.296	7.725	5.118	39.638	47.364	1.202	2.490	6.010	700	1.176
3/1/01 19:00	599	275	589	1.315	7.825	5.138	39.864	47.689	1.253	2.500	6.034	698	1.134
3/1/01 20:00	599	409	841	1.309	7.786	5.127	39.964	47.750	1.197	2.392	5.977	702	1.184
3/1/01 21:00	600	386	699	1.306	7.842	5.131	40.019	47.861	1.197	2.382	5.957	703	1.195
3/1/01 22:00	600	368	799	1.327	7.866	5.111	40.126	47.992	1.200	2.453	5.967	699	1.194
3/1/01 23:00	600	349	713	1.325	7.830	5.115	39.842	47.673	1.198	2.412	6.017	701	1.227
4/1/01 0:00	599	334	706	1.324	7.857	5.122	40.134	47.991	1.199	2.441	6.021	699	1.326
Medio	600	288	725	1.320	7.684	5.051	40.007	47.692	1.155	2.430	5.863	695	1.361
Desvio	0,58	89	206	47	294	167	164	344	83	129	230	27	105

Al.2 Temperaturas

Todos os valores são expressos em [°C]

	7						10	5	6	29	24	22	19	21	14	20	25	3	11
	571	570	570	566	571	553													
28/12/00 1:00	571	570	570	566	571	553	64.9	67.0	129.2	18	42	33	78	61	45	53	113	83	104
28/12/00 2:00	574	573	573	569	574	556	64.5	66.9	129.5	16	39	32	78	61	44	53	113	82	104
28/12/00 3:00	573	572	571	568	573	555	64.0	67.0	129.5	16	39	32	78	61	44	53	113	82	104
28/12/00 4:00	572	571	571	567	572	554	63.6	67.0	129.4	14	37	32	78	61	43	53	113	83	104
28/12/00 5:00	569	568	568	565	570	554	63.5	66.9	129.3	13	33	32	78	61	42	53	111	83	104
28/12/00 6:00	569	568	567	563	569	554	63.6	67.1	129.3	13	34	32	78	61	43	53	113	79	103
28/12/00 7:00	570	568	568	564	570	554	63.4	67.0	129.3	12	34	32	78	61	43	53	113	82	103
28/12/00 8:00	572	571	570	566	572	556	63.1	67.0	129.5	12	33	32	78	61	42	53	113	83	104
28/12/00 9:00	568	567	566	563	569	553	63.6	67.0	129.3	12	32	32	78	61	43	53	113	83	104
28/12/00 10:00	568	567	566	562	568	552	64.2	67.1	129.3	12	29	33	78	61	40	53	113	81	104
28/12/00 11:00	568	567	566	563	569	553	63.7	67.0	129.4	13	31	33	78	61	40	53	112	76	104
28/12/00 12:00	570	569	568	565	571	554	64.2	67.0	129.4	13	34	33	78	61	44	53	112	79	104
28/12/00 13:00	570	569	568	564	570	551	65.0	66.9	129.4	7	29	34	78	61	41	53	112	79	103
28/12/00 14:00	567	566	565	562	567	548	65.8	67.0	129.3	9	23	35	78	61	40	53	112	78	104
28/12/00 15:00	565	564	563	560	565	547	66.4	67.1	129.2	10	28	36	78	61	41	53	111	80	104
28/12/00 16:00	563	562	561	558	564	545	67.8	67.2	129.3	13	32	37	78	61	42	53	112	81	104
28/12/00 17:00	565	563	562	560	565	546	68.3	67.2	129.3	14	32	36	78	61	43	53	112	81	104
28/12/00 18:00	565	563	560	560	565	546	67.7	67.1	129.3	11	29	36	78	61	41	53	112	82	104
28/12/00 19:00	564	565	562	561	566	547	67.7	67.1	129.4	10	25	35	78	60	39	53	112	82	105
28/12/00 20:00	565	565	562	561	567	547	66.8	66.9	129.4	11	25	34	78	60	40	53	112	82	105
28/12/00 21:00	567	568	564	564	569	549	65.3	67.0	128.9	12	21	31	78	60	37	53	112	82	106
28/12/00 22:00	570	571	568	567	573	553	64.6	66.9	129.4	11	25	32	78	60	40	53	113	82	106
28/12/00 23:00	570	571	568	567	572	553	64.2	66.9	129.4	10	23	32	78	60	38	53	113	83	106
29/12/00 0:00	572	573	570	569	575	557	64.1	67.0	129.5	9	22	32	78	60	38	53	114	83	107
29/12/00 1:00	570	570	568	566	572	553	63.9	67.0	129.6	8	19	32	78	60	36	56	114	81	107

29/12/00 2:00	571	571	568	567	573	553	64,0	66,9	129,5	9	18	33	78	60	35	55	113	83	107
29/12/00 3:00	570	570	568	566	572	553	63,6	67,0	129,5	10	22	32	78	60	37	54	113	84	106
29/12/00 4:00	571	571	568	567	572	553	63,4	67,1	129,4	11	23	32	78	60	38	54	114	84	106
29/12/00 5:00	572	572	570	568	574	556	63,1	67,1	129,5	12	23	32	78	60	37	53	113	84	106
29/12/00 6:00	570	570	568	566	572	554	63,3	67,0	129,4	12	22	32	78	60	36	53	112	84	105
29/12/00 7:00	569	569	566	565	571	552	63,3	67,0	129,4	12	22	32	78	60	37	54	113	83	105
29/12/00 8:00	570	570	567	565	571	553	63,0	66,9	129,4	14	24	32	78	60	36	53	112	84	105
29/12/00 9:00	568	570	567	565	571	553	63,1	66,9	129,3	13	24	32	78	60	37	53	111	84	104
29/12/00 10:00	567	569	566	564	570	552	63,4	67,1	129,4	13	23	33	78	61	35	53	112	84	104
29/12/00 11:00	569	570	568	566	572	555	64,4	66,9	129,4	14	23	34	78	61	36	53	111	83	104
29/12/00 12:00	568	570	568	566	572	555	65,5	66,9	129,3	25	29	34	78	60	32	53	110	83	104
29/12/00 13:00	569	570	568	566	571	555	66,2	67,0	129,4	12	17	34	78	59	26	53	111	84	104
29/12/00 14:00	563	564	562	560	566	550	66,7	67,2	129,4	13	16	35	78	59	27	53	110	83	104
29/12/00 15:00	567	568	567	564	570	553	67,5	66,8	129,4	13	16	35	78	59	27	53	111	83	102
29/12/00 16:00	564	565	564	562	567	551	68,8	67,1	129,5	14	17	36	78	59	28	53	112	83	102
29/12/00 17:00	566	567	566	562	569	552	69,0	67,0	129,3	15	17	36	78	60	28	53	111	83	103
29/12/00 18:00	565	566	565	562	568	551	69,2	66,9	129,2	15	18	36	78	60	28	53	112	83	105
29/12/00 19:00	566	568	566	563	569	552	68,8	67,0	129,2	14	17	35	78	60	27	57	112	84	105
29/12/00 20:00	567	568	567	564	570	553	66,4	67,1	129,0	14	16	30	78	59	25	54	111	83	106
29/12/00 21:00	569	570	569	566	572	555	65,4	67,2	129,4	13	15	30	78	59	25	53	113	83	105
29/12/00 22:00	570	571	570	567	573	556	65,0	67,1	129,5	13	15	31	78	60	24	54	113	83	105
29/12/00 23:00	571	572	570	568	574	557	64,3	67,1	129,3	13	14	31	78	60	24	53	113	84	105
30/12/00 0:00	570	572	570	567	573	556	64,5	67,1	129,3	13	14	32	78	60	24	53	112	84	105
30/12/00 1:00	570	571	570	567	573	556	64,1	67,0	129,5	13	14	32	78	60	24	53	113	84	105
30/12/00 2:00	570	572	570	567	573	556	64,2	67,1	129,3	13	14	32	78	59	24	53	112	83	104
30/12/00 3:00	571	573	571	568	574	557	64,2	67,1	129,5	12	14	32	78	60	24	53	112	82	105
30/12/00 4:00	571	572	570	568	574	557	64,0	67,1	129,4	12	14	32	78	59	23	53	112	84	105
30/12/00 5:00	571	572	571	568	574	557	64,0	67,1	129,3	12	14	32	78	59	23	53	112	83	105
30/12/00 6:00	571	572	572	568	574	557	63,9	67,0	129,3	12	14	31	78	59	23	53	112	82	104
30/12/00 7:00	569	570	569	567	572	555	64,1	67,0	129,4	12	13	31	78	59	23	53	112	81	105
30/12/00 8:00	570	570	569	567	572	555	64,3	67,0	129,4	12	14	32	78	60	24	53	112	81	105

30/12/00 9:00	570	571	570	568	573	556	64,7	67,2	129,4	12	14	32	78	59	24	53	112	81	105
30/12/00 10:00	569	570	569	566	571	555	65,6	67,1	129,4	13	15	33	78	59	25	53	111	82	105
30/12/00 11:00	573	574	573	570	575	558	66,4	66,9	129,4	13	15	33	78	59	25	53	112	82	105
30/12/00 12:00	570	571	570	567	572	552	65,3	67,0	129,4	13	14	33	78	59	24	54	111	82	105
30/12/00 13:00	569	570	569	567	572	552	65,8	67,1	129,4	13	15	34	78	59	25	54	112	82	105
30/12/00 14:00	569	570	569	566	571	550	67,8	67,1	129,3	13	16	37	78	59	25	53	112	83	105
30/12/00 15:00	568	569	568	565	570	550	69,3	67,0	129,4	14	16	37	78	59	26	53	112	83	105
30/12/00 16:00	568	570	569	566	571	550	70,4	67,1	129,5	14	17	36	78	56	28	53	111	83	105
30/12/00 17:00	558	558	556	553	560	541	70,7	67,2	128,3	15	32	32	78	54	39	58	113	83	105
30/12/00 18:00	568	568	567	563	570	552	70,9	66,9	128,2	28	32	35	78	59	40	54	111	83	105
30/12/00 19:00	571	571	571	567	573	555	68,4	66,9	128,2	16	25	33	78	60	38	53	112	83	104
30/12/00 20:00	572	573	573	568	574	557	66,7	67,0	128,3	15	24	32	78	60	37	53	112	82	104
30/12/00 21:00	568	568	569	565	570	552	65,5	67,1	128,7	15	19	32	78	60	31	53	111	82	104
30/12/00 22:00	574	575	575	571	576	558	65,6	66,7	128,6	14	17	32	78	59	28	53	112	81	105
30/12/00 23:00	571	571	572	568	573	555	64,4	66,9	127,6	13	15	30	78	59	26	53	109	81	103
31/12/00 0:00	572	573	573	569	574	556	64,0	67,0	128,4	13	14	30	78	60	25	54	112	81	104
31/12/00 1:00	573	574	574	570	575	557	64,0	67,1	128,6	13	14	30	78	60	25	53	112	84	106
31/12/00 2:00	572	572	573	569	574	555	64,1	66,9	128,7	13	14	30	78	60	25	60	113	83	107
31/12/00 3:00	571	572	573	569	574	555	64,7	67,0	128,8	13	14	31	78	60	25	53	111	83	107
31/12/00 4:00	570	571	571	568	572	553	64,7	67,1	128,8	13	14	31	78	60	25	55	110	83	108
31/12/00 5:00	570	571	572	568	573	554	64,6	67,0	128,8	13	14	31	78	59	24	55	112	83	108
31/12/00 6:00	572	573	573	570	575	556	64,0	67,0	128,9	13	14	30	78	60	24	56	112	83	107
31/12/00 7:00	574	575	575	572	577	557	63,6	67,0	128,8	13	14	30	78	60	24	56	112	84	107
31/12/00 8:00	577	577	578	574	579	560	63,5	66,9	129,0	13	14	31	78	59	24	54	112	84	107
31/12/00 9:00	576	577	577	574	579	560	63,8	67,1	128,9	13	15	31	78	59	25	53	112	83	107
31/12/00 10:00	575	575	576	573	578	558	64,0	67,1	128,7	14	15	32	78	60	25	53	112	84	107
31/12/00 11:00	574	575	576	572	577	558	64,0	66,9	128,8	14	15	32	78	60	25	55	112	83	107
31/12/00 12:00	572	573	574	570	575	556	64,3	67,0	128,8	14	16	32	78	60	26	55	111	83	107
31/12/00 13:00	572	573	574	570	575	556	64,6	67,0	128,8	15	16	33	78	60	26	55	112	83	107
31/12/00 14:00	569	570	571	568	572	553	66,3	67,0	128,5	15	17	34	78	60	27	54	111	83	107
31/12/00 15:00	572	572	573	569	574	555	67,1	66,9	128,5	15	17	35	78	60	27	54	112	83	107

31/12/00 16:00	572	573	574	570	575	555	67,2	66,9	128,7	15	17	34	78	60	26	55	112	84	107
31/12/00 17:00	569	570	570	567	571	552	67,2	67,0	128,6	15	17	33	78	60	27	53	111	83	107
31/12/00 18:00	570	571	572	568	572	554	66,7	67,1	128,8	15	17	33	78	59	26	53	111	82	107
31/12/00 19:00	569	570	571	567	571	552	65,9	66,9	128,8	15	17	32	78	59	26	53	110	82	107
31/12/00 20:00	569	570	571	567	571	553	65,3	67,0	128,9	15	17	32	78	59	26	53	110	82	107
31/12/00 21:00	569	570	570	567	571	552	64,7	67,1	128,8	15	16	31	78	59	25	53	110	82	106
31/12/00 22:00	571	572	572	569	573	554	64,3	67,0	128,9	14	16	31	78	60	25	53	111	82	106
31/12/00 23:00	567	569	568	565	569	551	63,5	67,2	129,0	14	16	31	78	60	24	53	111	82	107
1/1/01 0:00	572	574	575	570	575	556	62,9	66,8	129,0	14	15	30	78	59	24	53	111	81	107
1/1/01 1:00	568	569	569	566	570	551	62,5	67,1	129,0	13	15	30	78	59	24	53	111	80	107
1/1/01 2:00	568	569	568	566	570	552	62,4	67,0	129,2	13	14	30	78	59	23	53	111	82	108
1/1/01 3:00	570	571	570	568	572	553	62,5	66,9	128,9	13	14	29	78	60	23	55	111	82	107
1/1/01 4:00	571	571	570	568	572	555	62,5	66,9	129,0	13	14	30	78	59	22	55	111	82	108
1/1/01 5:00	571	571	570	568	572	556	62,4	67,1	129,2	13	14	30	78	60	23	55	112	82	108
1/1/01 6:00	571	572	570	569	573	557	61,6	67,0	129,3	12	13	30	78	59	22	54	111	81	108
1/1/01 7:00	571	572	571	569	573	553	61,5	67,0	129,2	12	13	30	78	59	22	54	111	81	107
1/1/01 8:00	574	575	574	572	576	556	61,8	66,8	129,4	12	14	30	78	59	22	54	111	81	107
1/1/01 9:00	573	574	573	571	575	555	62,3	66,9	129,3	12	14	31	78	59	23	54	112	81	107
1/1/01 10:00	571	571	570	569	572	553	63,7	67,1	129,2	12	14	32	78	60	23	54	111	81	108
1/1/01 11:00	571	571	570	569	572	552	64,8	67,1	129,1	13	15	33	78	59	24	53	111	83	108
1/1/01 12:00	571	571	570	568	572	553	65,6	67,0	129,3	13	15	34	78	59	24	53	111	83	108
1/1/01 13:00	570	570	569	568	572	553	66,3	67,0	129,4	14	16	34	78	60	25	53	111	83	108
1/1/01 14:00	572	572	571	570	574	555	67,0	66,9	129,5	14	16	34	78	60	25	53	111	83	108
1/1/01 15:00	572	572	570	570	573	554	67,9	67,1	129,4	14	17	35	78	60	26	53	111	83	108
1/1/01 16:00	573	573	572	571	575	555	68,0	66,9	129,5	15	17	35	78	59	26	53	111	83	108
1/1/01 17:00	570	570	569	568	572	553	68,6	67,0	129,3	15	18	35	78	60	27	53	111	83	108
1/1/01 18:00	566	566	565	564	568	549	68,4	66,7	129,2	16	19	34	78	60	27	53	111	82	108
1/1/01 19:00	564	564	563	562	565	548	67,3	67,1	129,3	16	18	33	78	60	27	53	110	82	108
1/1/01 20:00	571	571	569	569	573	554	66,5	67,0	129,4	15	17	32	78	59	26	53	110	83	108
1/1/01 21:00	570	570	568	568	571	553	65,3	67,0	129,4	15	16	31	78	59	25	53	111	83	108
1/1/01 22:00	571	571	569	569	572	554	64,2	67,0	129,3	14	16	30	78	59	24	53	111	83	108

1/1/01 23:00	572	572	570	570	574	554	63,5	67,1	129,4	14	15	30	78	59	24	53	111	82	108
2/1/01 0:00	574	574	572	571	575	556	62,6	67,0	129,4	14	15	30	78	59	23	53	111	82	108
2/1/01 1:00	572	573	571	570	574	557	62,6	66,9	129,4	13	14	30	78	59	22	53	112	82	108
2/1/01 2:00	570	568	567	571	552	552	62,5	67,0	129,4	13	14	30	78	59	22	54	112	83	108
2/1/01 3:00	571	571	569	568	572	553	62,3	67,0	129,3	13	14	30	78	59	22	54	112	83	108
2/1/01 4:00	571	571	569	568	572	553	61,1	67,1	129,3	13	13	29	78	59	21	54	112	83	109
2/1/01 5:00	572	573	571	570	574	554	60,2	67,0	129,3	12	13	28	78	59	21	54	112	82	108
2/1/01 6:00	574	575	572	572	576	557	59,9	67,0	129,3	12	12	28	78	59	20	54	112	82	108
2/1/01 7:00	575	576	574	573	577	558	59,6	67,1	129,3	11	12	28	78	59	20	53	111	82	108
2/1/01 8:00	577	577	575	574	578	560	60,2	67,0	129,6	12	13	29	78	59	21	53	112	82	108
2/1/01 9:00	574	574	572	572	575	557	62,1	67,0	129,3	13	15	32	78	59	23	54	112	82	108
2/1/01 10:00	576	576	574	574	577	559	63,9	67,0	129,3	26	16	33	78	59	24	54	112	83	108
2/1/01 11:00	576	576	574	574	577	559	65,3	67,0	129,6	13	30	33	78	57	28	54	112	83	108
2/1/01 12:00	575	575	573	573	576	556	66,4	67,0	129,4	14	20	35	78	57	27	53	112	83	108
2/1/01 13:00	579	579	577	577	580	559	67,2	67,1	129,6	15	17	35	78	57	27	53	113	83	108
2/1/01 14:00	581	581	579	579	583	563	68,7	67,0	129,6	16	18	37	78	57	28	53	113	84	108
2/1/01 15:00	579	579	577	576	580	561	69,0	67,1	129,7	16	18	36	78	57	27	53	113	84	108
2/1/01 16:00	579	580	578	577	581	561	70,2	67,0	129,6	16	19	36	78	57	27	53	112	84	108
2/1/01 17:00	576	576	574	574	578	558	70,8	66,9	129,5	16	19	35	78	56	28	53	111	83	108
2/1/01 18:00	573	573	571	571	574	555	70,1	66,9	129,3	16	19	34	78	56	28	53	110	83	108
2/1/01 19:00	571	572	570	569	573	554	69,0	67,1	129,4	16	19	33	78	56	27	53	110	83	108
2/1/01 20:00	574	574	573	572	576	556	67,6	66,9	129,4	11	16	31	78	56	24	53	111	83	108
2/1/01 21:00	577	577	576	575	579	559	65,8	67,0	129,4	9	12	30	78	56	20	53	111	83	108
2/1/01 22:00	577	577	575	575	578	559	64,5	67,0	129,6	9	11	29	78	56	19	53	112	83	108
2/1/01 23:00	578	578	576	576	579	560	63,7	67,0	129,6	9	11	28	78	55	19	53	111	84	108
3/1/01 0:00	575	575	573	573	577	557	63,4	67,2	129,5	9	10	29	78	55	19	53	112	84	108
3/1/01 1:00	580	580	578	578	581	562	62,7	66,9	129,8	9	10	28	78	55	19	53	112	84	108
3/1/01 2:00	581	581	580	579	582	563	62,5	66,9	129,6	9	11	29	78	55	19	53	112	84	108
3/1/01 3:00	582	582	580	580	583	565	61,8	66,8	129,7	9	11	28	78	55	19	54	113	83	108
3/1/01 4:00	580	580	579	578	582	564	60,9	67,0	129,8	9	10	28	78	56	19	53	112	84	108
3/1/01 5:00	580	579	578	578	581	562	61,3	67,0	129,5	9	10	28	78	55	19	53	112	84	108



3/1/01 6:00	576	575	574	574	574	577	559	61,3	67,1	129,6	9	10	29	78	56	19	53	112	84	108
3/1/01 7:00	577	577	575	575	575	578	560	61,4	66,9	129,5	9	10	29	78	56	20	53	112	84	108
3/1/01 8:00	575	574	573	573	573	576	558	62,0	67,1	129,5	9	11	30	78	57	20	54	113	84	108
3/1/01 9:00	575	575	573	573	573	576	558	63,3	67,1	129,3	10	12	31	78	57	21	53	112	84	108
3/1/01 10:00	574	573	572	572	572	575	557	64,4	67,1	129,1	11	12	32	78	57	22	53	112	84	108
3/1/01 11:00	575	574	572	573	573	576	557	65,4	67,1	129,1	12	14	33	78	58	24	53	112	84	108
3/1/01 12:00	575	575	572	573	573	576	557	66,3	67,0	129,2	12	15	34	78	58	24	53	112	84	108
3/1/01 13:00	574	574	572	572	572	575	556	67,4	66,9	129,3	13	15	35	78	58	25	54	113	84	108
3/1/01 14:00	577	576	574	574	574	577	558	68,2	66,9	129,4	12	15	35	78	58	25	53	113	84	108
3/1/01 15:00	574	573	571	571	571	574	556	68,9	67,0	129,4	10	13	36	78	58	23	53	113	84	108
3/1/01 16:00	575	574	573	573	573	576	557	69,6	66,8	129,2	10	13	35	78	58	23	53	112	83	108
3/1/01 17:00	570	569	568	568	568	571	553	68,8	67,0	129,1	10	13	33	78	58	23	53	112	84	108
3/1/01 18:00	568	568	567	567	567	569	551	67,6	66,9	129,0	10	12	31	78	57	23	53	111	83	108
3/1/01 19:00	568	567	566	566	566	568	551	66,4	67,0	128,9	10	12	30	78	57	22	53	110	84	108
3/1/01 20:00	569	569	567	567	567	569	553	65,5	67,1	129,1	10	12	30	78	56	22	53	111	83	107
3/1/01 21:00	569	568	567	567	567	569	554	64,9	67,0	129,1	10	12	29	78	56	21	53	111	83	107
3/1/01 22:00	572	572	570	570	570	572	557	64,0	67,0	129,1	9	11	28	78	56	20	54	111	83	107
3/1/01 23:00	569	569	568	568	567	570	554	63,7	66,9	129,1	9	11	28	78	56	20	53	111	83	107
4/1/01 0:00	570	570	568	567	567	570	555	63,5	66,9	129,3	9	11	29	78	56	20	53	112	83	106
Medio	571	572	570	568	573	555	65,0	67,0	129,2	13	18	32	78	59	28	53	112	83	106	106
Desvio	4	4	4	4	4	4	4	2,4	0,1	0,3	3	7	2	-	2	7	1	1	1	2

AI.3 Pressões

Todos os valores são expressos em [kgf/cm² g].

	10	5	7	8	24
28/12/00 1:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 2:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 3:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 4:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 5:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 6:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 7:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 8:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 9:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 10:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 11:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 12:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 13:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 14:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 15:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
28/12/00 16:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 17:00	0,37	0,30	0,33	0,30	0,15
28/12/00 18:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
28/12/00 19:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
28/12/00 20:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
28/12/00 21:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 22:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
28/12/00 23:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 0:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 1:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15

29/12/00 2:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 3:00	0,37	0,30	0,33	0,30	0,15
29/12/00 4:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 5:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 6:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 7:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 8:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 9:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 10:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 11:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 12:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 13:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 14:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
29/12/00 15:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 16:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
29/12/00 17:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
29/12/00 18:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
29/12/00 19:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
29/12/00 20:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
29/12/00 21:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 22:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
29/12/00 23:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 0:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 1:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 2:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 3:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 4:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
30/12/00 5:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 6:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 7:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 8:00	0,37	0,30	0,33	0,30	0,15

30/12/00 9:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 10:00	0,37	0,30	0,33	0,30	0,15
30/12/00 11:00	0,37	0,30	0,33	0,30	0,15
30/12/00 12:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
30/12/00 13:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 14:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
30/12/00 15:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
30/12/00 16:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 17:00	0,37	0,30	0,32	0,30	0,15
30/12/00 18:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 19:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 20:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 21:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 22:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
30/12/00 23:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 0:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 1:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 2:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 3:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 4:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 5:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 6:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 7:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 8:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 9:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 10:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 11:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 12:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 13:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 14:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 15:00	0,37	0,30	0,33	0,30	0,15

31/12/00 16:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 17:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 18:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 19:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 20:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 21:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 22:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
31/12/00 23:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 0:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 1:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 2:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
1/1/01 3:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 4:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 5:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 6:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
1/1/01 7:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 8:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
1/1/01 9:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 10:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
1/1/01 11:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
1/1/01 12:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 13:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 14:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 15:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 16:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 17:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 18:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 19:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 20:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 21:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
1/1/01 22:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15

1/1/01 23:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
2/1/01 0:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
2/1/01 1:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
2/1/01 2:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
2/1/01 3:00	0,37	0,30	0,33	0,29	0,15
2/1/01 4:00	0,37	0,31	0,33	0,29	0,15
2/1/01 5:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
2/1/01 6:00	0,37	0,31	0,33	0,29	0,15
2/1/01 7:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
2/1/01 8:00	0,37	0,31	0,33	0,30	0,15
2/1/01 9:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
2/1/01 10:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
2/1/01 11:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 12:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 13:00	0,35	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 14:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
2/1/01 15:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 16:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 17:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 18:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 19:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 20:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 21:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
2/1/01 22:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
2/1/01 23:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 0:00	0,37	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 1:00	0,37	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 2:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 3:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 4:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 5:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15

3/1/01 6:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 7:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 8:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
3/1/01 9:00	0,36	0,31	0,33	0,30	0,15
3/1/01 10:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 11:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 12:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 13:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 14:00	0,36	0,30	0,32	0,30	0,15
3/1/01 15:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 16:00	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
3/1/01 17:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 18:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 19:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 20:00	0,36	0,30	0,32	0,29	0,15
3/1/01 21:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 22:00	0,36	0,30	0,33	0,29	0,15
3/1/01 23:00	0,37	0,30	0,33	0,29	0,15
4/1/01 0:00	0,37	0,30	0,33	0,29	0,15
Medio	0,36	0,30	0,33	0,30	0,15
Desvio	0,0038	0,0027	0,0020	0,0020	0,0003

## ***Apêndice II***

### **Resultados da simulação da configuração original**

#### **AII.1 Introdução**

Nas páginas seguintes estão os resultados obtidos a partir da solução do modelo apresentado no Capítulo 3.

O primeiro item é o balanço de massa calculado, bem como as principais propriedades de cada corrente estudada. Em seguida aparecem, separadamente, cada uma das três colunas de separação, com os resultados obtidos prato a prato. Neste caso, além das tabelas há também representações gráficas dos principais resultados. E, finalmente, surge o balanço de energia e exergia realizado elemento por elemento do modelo, bem como o balanço global.

A resolução do sistema de equações não-lineares foi realizada no software EES em três blocos separados de cálculo: no primeiro deles resolveram-se as equações referentes a coluna de separação água-etanol ( $k=1$ ) e os trocadores de calor a ela ligados, o evaporador ( $k=2$ ), o reator ( $k=5$ ) e a caldeira de recuperação ( $k=7$ ). No segundo bloco aparece a coluna de absorção de acetaldeído ( $k=6$ ) e os trocadores de calor vinculados e no terceiro bloco simulou-se a coluna de destilação purificadora de acetaldeído ( $k=9$ ).



## AII.2 Balanço de massa

Nr. Corrente	1A		1B		2		3	
TAG EES	L[1;14]		F[1;2]		L[2;14]		V[1;1]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Etanol	86,00%	0,0034	86,00%	0,0017	86,00%	0,0034	79,25%	0,0071
Água	14,00%	0,0006	14,00%	0,0003	14,00%	0,0006	20,75%	0,0018
Oxigênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Hidrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Total	100,00%	0,0039	1,0000	0,0019	100,00%	0,0039	100,00%	0,0089
Temperatura [K]	298,0		298,0		337,2		362,3	
Pressão [kPa]							140	
Entalpia [kJ/kmol]	-2,7829E+05		-2,7829E+05		-2,7378E+05		-2,3236E+05	
Exergia [kJ/kmol]	1,1730E+06		1,1730E+06		1,1740E+06		1,0890E+06	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Vapor	
Nr. Corrente	4		5		6		7	
TAG EES	V[2;2]		V[1;2]		V[2;4]		V[2;5]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	18,36%	0,0050
Etanol	32,34%	0,0071	36,71%	0,0087	36,71%	0,0087	13,59%	0,0037
Água	10,34%	0,0023	10,63%	0,0025	10,63%	0,0025	23,17%	0,0063
Oxigênio	12,00%	0,0026	11,03%	0,0026	11,03%	0,0026	2,33%	0,0006
Nitrogênio	45,32%	0,0099	41,63%	0,0099	41,63%	0,0099	36,56%	0,0099
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	5,41%	0,0015
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,59%	0,0002
Total	100,00%	0,0218	100,00%	0,0237	100,00%	0,0237	100,01%	0,0270
Temperatura [K]	353,4		341,6		402,0		817,0	
Pressão [kPa]	140		130		130		130	
Entalpia [kJ/kmol]	-9,8626E+04		-1,1005E+05		-1,0718E+05		-9,4126E+04	
Exergia [kJ/kmol]	4,4354E+05		5,0290E+05		5,0346E+05		4,2519E+05	
Estado	Vapor		Vapor		Vapor		Vapor	
Nr. Corrente	8		9		10		11	
TAG EES	V[2;10]		V[1;3]		V[2;3]		L[50;1]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	18,36%	0,0050	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	(0,0000)
Etanol	13,59%	0,0037	0,00%	-	0,00%	-	0,56%	0,0001
Água	23,17%	0,0063	3,16%	0,0004	3,16%	0,0004	99,44%	0,0223
Oxigênio	2,33%	0,0006	20,28%	0,0026	20,28%	0,0026	0,00%	0,0000
Nitrogênio	36,56%	0,0099	76,56%	0,0099	76,56%	0,0099	0,00%	(0,0000)
Hidrogênio	5,41%	0,0015	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,59%	0,0002	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	(0,0000)
Total	100,01%	0,0270	100,00%	0,0129	100,00%	0,0129	100,00%	0,0225
Temperatura [K]	443,0		298,0		339,6		384,9	
Pressão [kPa]	130		101,3		140		160	
Entalpia [kJ/kmol]	-1,1446E+05		-7,6450E+03		-6,4220E+03		-2,7914E+05	
Exergia [kJ/kmol]	4,1464E+05		1,4760E+02		1,0280E+03		1,1430E+04	
Estado	Vapor		Vapor		Vapor		Líquido	

Nr. Corrente	12		13		14		15	
TAG EES	L[4;12]		L[2;13]		L[1;12]		L[2;12]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Etanol	0,56%	0,0001	0,56%	0,0001	3,90%	0,0007	3,90%	0,0007
Água	99,44%	0,0223	99,44%	0,0223	96,10%	0,0180	96,10%	0,0180
Oxigênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-	0,00%	-
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-	0,00%	-
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Total	100,00%	0,0225	100,00%	0,0225	100,00%	0,0188	100,00%	0,0188
Temperatura [K]	330,5		302,3		314,0		377,3	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8328E+05		-2,8542E+05		-2,8411E+05		-2,7915E+05	
Exergia [kJ/kmol]	1,0748E+04		1,0627E+04		5,6016E+04		5,6664E+04	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Líquido	
Nr. Corrente	16		17		18		19	
TAG EES	L[3;14]		L[4;14]		L[36;6]		L[4;15]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	-	0,00%	-	7,58%	0,0048	7,58%	0,0048
Etanol	35,30%	0,0031	35,30%	0,0031	32,35%	0,0204	32,35%	0,0204
Água	64,70%	0,0056	64,70%	0,0056	60,02%	0,0379	60,02%	0,0379
Oxigênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Hidrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	-	0,04%	0,0000	0,04%	0,0000
Total	100,00%	0,0087	100,00%	0,0087	100,00%	0,0632	100,00%	0,0632
Temperatura [K]	392,0		373,0		315,0		353,0	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,7279E+05		-2,7483E+05		-2,7384E+05		-2,7006E+05	
Exergia [kJ/kmol]	4,8402E+05		4,8360E+05		5,2986E+05		5,3021E+05	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Líquido	
Nr. Corrente	20		21		22		23	
TAG EES	BL[1;9]		BL[36;6]		L[2;7]		V[1;6]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	100,00%	0,0048	7,58%	0,0304	7,58%	0,0304	0,00%	0,0000
Etanol	0,00%	0,0000	32,35%	0,1299	32,35%	0,1299	5,69%	0,0008
Água	0,00%	0,0000	60,02%	0,2410	60,02%	0,2410	3,90%	0,0005
Oxigênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	4,78%	0,0006
Nitrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	74,97%	0,0099
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	9,70%	0,0013
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,04%	0,0002	0,04%	0,0002	0,96%	0,0001
Total	100,00%	0,0048	100,00%	0,4015	100,00%	0,4015	100,00%	0,0132
Temperatura [K]	326,5		315,0		299,6		308,1	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-1,8883E+05		-2,7384E+05		-2,7531E+05		-2,6263E+04	
Exergia [kJ/kmol]	1,1630E+06		5,2986E+05		5,2983E+05		1,0068E+05	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Vapor	

Nr. Corrente	24		25		26		27	
TAG EES	V[1;8]		L[1;15]		L[2;15]		L[2;16]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Etanol	0,15%	0,0000	35,30%	0,0177	35,30%	0,0177	35,30%	0,0177
Água	2,58%	0,0003	64,70%	0,0324	64,70%	0,0324	64,70%	0,0324
Oxigênio	5,14%	0,0006	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Nitrogênio	80,72%	0,0099	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Hidrogênio	10,44%	0,0013	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Dióxido Carbono	0,97%	0,0001	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-
Total	99,99%	0,0123	100,00%	0,0500	100,00%	0,0500	100,00%	0,0500
Temperatura [K]	297,2		393,0		347,2		310,0	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-1,0433E+04		-2,7268E+05		-2,7747E+05		-2,8102E+05	
Exergia [kJ/kmol]	2,6769E+04		4,8386E+05		4,8299E+05		4,8272E+05	
Estado	Vapor		Líquido		Líquido		Líquido	
Nr. Corrente	28		29					
TAG EES	L[1;17]		L[2;17]					
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]				
Acetaldeído	0,00%	-	0,00%	-				
Etanol	0,00%	-	0,00%	-				
Água	100,00%	0,0178	100,00%	0,0178				
Oxigênio	0,00%	-	0,00%	-				
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	-				
Hidrogênio	0,00%	-	0,00%	-				
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	-				
Total	100,00%	0,0178	100,00%	0,0178				
Temperatura [K]	298,0		286,0					
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8581E+05		-2,8672E+05					
Exergia [kJ/kmol]	3,1200E+03		3,1390E+03					
Estado	Líquido		Líquido					

### AII.3 Balanço de energia e exergia

O quadro abaixo mostra os balanços de massa, energia e exergia para cada um dos elementos; na última linha da tabela está o balanço global.

Consta também a exergia destruída (U) e a contribuição de cada elemento (f) do processo para a destruição global de exergia. Através deste número é possível criar uma regra de intervenção no processo, daquele elemento de menor impacto na destruição de exergia até o de maior, no caso o reator de oxidação.

k = unidade	F <sub>entra</sub> [kmol/s]	F <sub>sai</sub> [kmol/s]	Σ(F.h) <sub>entra</sub> [kW]	Σ(F.h) <sub>sai</sub> [kW]	ΣQ [kW]	Σ(F.ex) <sub>entra</sub> [kW]	Σ(F.ex) <sub>sai</sub> [kW]	ΣQ.θ [kW]	U [kW]	f [%kW]
k = 0	0,0218	0,0218	-2.150	-2.150	0	9.703	9.669	0	34	3,2%
k = 1	0,0314	0,0314	-8.701	-8.340	360	9.872	9.947	114	39	3,6%
k = 2	0,0237	0,0237	-2.687	-2.611	76	11.934	11.934	19	19	1,8%
k = 3	0,0129	0,0129	-99	-83	16	2	13	16	4	0,4%
k = 4	0,0237	0,0237	-2.611	-2.543	68	11.934	11.947	21	7	0,7%
k = 5	0,0237	0,0270	-2.543	-2.544	0	11.951	11.493	0	458	42,6%
k = 6	0,4778	0,4779	-127.588	-127.604	-18	247.663	247.557	-1	105	9,7%
k = 7	0,4015	0,4015	-109.948	-110.535	-587	212.737	212.728	-9	0	0,0%
k = 8	0,0310	0,0310	-5.456	-5.456	0	1.384	1.380	0	4	0,4%
k = 9	0,0632	0,0632	-17.060	-16.831	224	33.538	33.595	304	247	22,9%
k = 10	0,0270	0,0270	-2.544	-3.094	-550	11.493	11.208	-167	118	11,0%
k = 12	0,0225	0,0225	-6.272	-6.365	-93	257	242	-12	3	0,3%
k = 13	0,0225	0,0225	-6.365	-6.413	-48	242	239	0	2	0,2%
k = 14	0,0087	0,0087	-2.368	-2.386	-18	4.201	4.198	-1	3	0,3%
k = 15	0,0632	0,0632	-17.310	-17.070	239	33.492	33.515	44	21	1,9%
k = 16	0,0500	0,0500	-13.873	-14.051	-178	24.149	24.136	-2	12	1,1%
k = 17	0,0178	0,0178	-5.093	-5.109	-16	56	56	0	0	0,0%
k = global	0,0366	0,0395	-332.670	-333.187	-523	624.607	623.855	324	1.076	100%

**AII.4 Simulação esgotamento de etanol (k=1)**

A coluna de esgotamento de etanol tem por objetivo gerar uma corrente de vapor rica em etanol, enquanto gera uma corrente de fundo de água para descarte. A tabela abaixo mostra os perfis de concentração, temperatura e pressão, bem como as propriedades de cada um dos estágios (entalpia e exergia).

	Coordenadas			Fluxos				Entalpia				Exergia			Ex. dest.	
	p	T	Q	F	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U			
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmo/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]			
1	140	362,3	-	0,0039	0,00432	0,00890	-2,74E+05	-2,71E+05	-2,32E+05	1,17E+06	1,07E+06	1,09E+06	1,2			
2	140	362,4	-	-	0,00432	0,00929	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	1,00E+06	1,04E+06	0,3			
3	141	362,6	-	-	0,00432	0,00929	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,57E+05	1,01E+06	0,2			
4	141	362,8	-	-	0,00432	0,00928	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,19E+05	9,92E+05	0,2			
5	142	362,9	-	-	0,00431	0,00928	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,88E+05	9,74E+05	0,1			
6	142	363,1	-	-	0,00431	0,00928	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,62E+05	9,60E+05	0,1			
7	142	363,3	-	-	0,00431	0,00928	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,39E+05	9,48E+05	0,1			
8	143	363,4	-	-	0,00430	0,00927	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,18E+05	9,37E+05	0,1			
9	143	363,6	-	-	0,00430	0,00927	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,99E+05	9,27E+05	0,1			
10	144	363,7	-	-	0,00430	0,00927	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,81E+05	9,19E+05	0,1			
11	144	363,9	-	-	0,00429	0,00926	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,65E+05	9,10E+05	0,1			
12	145	364,0	-	-	0,00429	0,00926	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,49E+05	9,03E+05	0,1			
13	145	364,2	-	-	0,00429	0,00926	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	7,33E+05	8,95E+05	0,1			
14	145	364,3	-	-	0,00429	0,00926	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	7,18E+05	8,88E+05	0,1			
15	146	364,5	-	-	0,00428	0,00925	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	7,03E+05	8,81E+05	0,1			
16	146	364,6	-	-	0,00428	0,00925	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,88E+05	8,74E+05	0,1			
17	147	364,8	-	-	0,00428	0,00925	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,73E+05	8,68E+05	0,1			
18	147	364,9	-	-	0,00427	0,00924	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,57E+05	8,61E+05	0,1			
19	147	365,1	-	-	0,00427	0,00924	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,41E+05	8,53E+05	0,1			
20	148	365,3	-	-	0,00426	0,00924	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,25E+05	8,46E+05	0,1			
21	148	365,5	-	-	0,00426	0,00923	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,08E+05	8,39E+05	0,1			
22	149	365,6	-	-	0,00426	0,00923	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,90E+05	8,31E+05	0,1			
23	149	365,8	-	-	0,00425	0,00922	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,71E+05	8,23E+05	0,1			

	Coordenadas		Fluxos					Entalpia			Exergia		Ex. dest
	p	T	Q	F	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]
24	149	366,1	-	-	0,00424	0,00922	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,52E+05	8,14E+05	0,1
25	150	366,3	-	-	0,00424	0,00921	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,32E+05	8,06E+05	0,1
26	150	366,5	-	-	0,00423	0,00921	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,11E+05	7,96E+05	0,1
27	151	366,7	-	0,0087	0,01277	0,00920	-2,75E+05	-2,75E+05	-2,34E+05	4,84E+05	4,89E+05	7,87E+05	(0,0)
28	151	366,8	-	-	0,01277	0,00905	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,89E+05	7,87E+05	0,1
29	151	366,9	-	-	0,01277	0,00905	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,89E+05	7,87E+05	0,1
30	152	367,0	-	-	0,01277	0,00906	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,88E+05	7,86E+05	0,1
31	152	367,1	-	-	0,01277	0,00906	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,84E+05	7,85E+05	0,1
32	153	367,2	-	-	0,01276	0,00905	-7,62E+04	-2,76E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,73E+05	7,80E+05	0,1
33	153	367,6	-	-	0,01273	0,00905	-7,62E+04	-2,76E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,41E+05	7,65E+05	0,1
34	154	368,6	-	-	0,01263	0,00901	-7,62E+04	-2,77E+05	-2,34E+05	2,52E+05	3,47E+05	7,20E+05	0,6
35	154	371,8	-	0,0188	0,03132	0,00891	-2,79E+05	-2,78E+05	-2,35E+05	5,67E+04	1,73E+05	5,91E+05	2,5
36	154	371,9	-	-	0,03133	0,00885	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,91E+05	0,1
37	155	371,9	-	-	0,03133	0,00885	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,91E+05	0,1
38	155	372,0	-	-	0,03134	0,00886	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,91E+05	0,1
39	156	372,1	-	-	0,03134	0,00886	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,91E+05	0,1
40	156	372,2	-	-	0,03134	0,00887	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,91E+05	0,1
41	156	372,3	-	-	0,03135	0,00887	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,91E+05	0,1
42	157	372,3	-	-	0,03135	0,00888	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,73E+05	5,90E+05	0,1
43	157	372,4	-	-	0,03135	0,00888	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,72E+05	5,90E+05	0,1
44	158	372,6	-	-	0,03135	0,00888	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,70E+05	5,87E+05	0,0
45	158	372,8	-	-	0,03134	0,00888	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,64E+05	5,80E+05	0,0
46	158	373,4	-	-	0,03131	0,00887	-7,62E+04	-2,78E+05	-2,35E+05	2,52E+05	1,49E+05	5,60E+05	0,0
47	159	374,9	-	-	0,03126	0,00884	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	1,15E+05	5,06E+05	0,3
48	159	377,9	-	-	0,03123	0,00878	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	6,71E+04	3,88E+05	1,1
49	160	381,9	-	-	0,03129	0,00876	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,37E+05	2,52E+05	2,97E+04	2,19E+05	1,6
50	160	384,9	360,4	-	0,02247	0,00882	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,38E+05	2,52E+05	1,14E+04	8,53E+04	28,2

AII.5 Simulação absorção de acetaldeído (k=6)

A função deste equipamento é condensar a corrente de vapores provenientes da caldeira de recuperação. A transferência de calor se dá diretamente contra um fluido de lavagem previamente resfriado. Tal como no caso anterior a tabela abaixo fornece informações a respeito das propriedades termodinâmicas prato a prato.

	Propriedades		Fluxos					Entalpia				Exergia		Ex. dest. U
	p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]
0	-	310,0	-	-	-	0,05000	-	0,00E+00	-2,81E+05	0,00E+00	0,00E+00	4,74E+05	0,00E+00	
1	120	308,1	(3,7)	-	-	0,04992	0,01319	-1,16E+05	-2,81E+05	-2,63E+04	2,50E+05	4,82E+05	1,01E+05	1,1
2	121	306,8	(2,7)	-	-	0,04985	0,01311	-1,16E+05	-2,81E+05	-2,53E+04	2,50E+05	4,81E+05	9,49E+04	0,2
3	122	305,8	(2,0)	-	-	0,04979	0,01304	-1,16E+05	-2,81E+05	-2,41E+04	2,50E+05	4,81E+05	9,08E+04	0,2
4	123	305,0	(1,5)	-	-	0,04975	0,01298	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,32E+04	2,50E+05	4,81E+05	8,77E+04	0,2
5	123	304,5	(1,1)	-	-	0,04972	0,01294	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,26E+04	2,50E+05	4,80E+05	8,54E+04	0,2
6	124	304,0	(0,8)	-	-	0,04969	0,01291	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,21E+04	2,50E+05	4,80E+05	8,37E+04	0,2
7	125	303,7	(0,5)	-	-	0,04967	0,01288	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,17E+04	2,50E+05	4,80E+05	8,23E+04	0,2
8	126	303,5	(0,3)	-	-	0,04966	0,01286	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,13E+04	2,50E+05	4,80E+05	8,12E+04	0,2
9	127	303,3	(0,2)	-	-	0,04964	0,01285	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,11E+04	2,50E+05	4,80E+05	8,02E+04	0,2
10	128	303,1	(0,1)	-	-	0,04963	0,01283	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,08E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,94E+04	0,2
11	129	303,0	(0,0)	-	-	0,04962	0,01282	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,06E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,88E+04	0,2
12	129	303,0	0,0	-	-	0,04961	0,01281	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,05E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,82E+04	0,2
13	130	302,9	0,1	-	-	0,04960	0,01280	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,03E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,77E+04	0,2
14	131	302,8	0,1	-	-	0,04960	0,01279	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,02E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,72E+04	0,2
15	132	302,8	0,1	-	-	0,04959	0,01279	-1,16E+05	-2,82E+05	-2,01E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,68E+04	0,2
16	133	302,8	0,2	-	-	0,04958	0,01278	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,99E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,64E+04	0,2
17	134	302,8	0,2	-	-	0,04958	0,01277	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,98E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,60E+04	0,2
18	135	302,7	0,2	-	-	0,04957	0,01277	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,97E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,57E+04	0,3
19	135	302,7	0,2	-	-	0,04956	0,01276	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,96E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,53E+04	0,3
20	136	302,7	0,2	-	-	0,04956	0,01275	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,95E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,50E+04	0,2
21	137	302,7	0,2	-	-	0,04955	0,01275	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,94E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,47E+04	0,3
22	138	302,7	0,2	-	-	0,04955	0,01274	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,93E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,45E+04	0,3

	Propriedades		Fluxos					Entalpia				Exergia			Ex. dest.
	p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U	
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]	
23	139	302,7	0,2	-	-	0,04955	0,01274	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,93E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,42E+04	0,2	
24	140	302,8	0,1	-	-	0,04955	0,01274	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,92E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,41E+04	0,2	
25	141	302,9	0,1	-	-	0,04956	0,01274	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,92E+04	2,50E+05	4,79E+05	7,42E+04	0,2	
26	141	303,2	(0,1)	-	-	0,04959	0,01275	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,94E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,48E+04	0,3	
27	142	303,7	(0,5)	-	-	0,04966	0,01278	-1,16E+05	-2,82E+05	-1,98E+04	2,50E+05	4,80E+05	7,67E+04	0,5	
28	143	304,7	(1,2)	-	-	0,04981	0,01285	-1,16E+05	-2,81E+05	-2,08E+04	2,50E+05	4,82E+05	8,14E+04	1,1	
29	144	306,2	(2,3)	-	-	0,05011	0,01300	-1,16E+05	-2,81E+05	-2,29E+04	2,50E+05	4,85E+05	9,24E+04	2,7	
30	145	307,0	(2,9)	-	-	0,05060	0,01330	-1,16E+05	-2,79E+05	-2,62E+04	2,50E+05	4,93E+05	1,15E+05	3,1	
31	130	300,2	-	0,4015	-	0,45200	0,01379	-2,75E+05	-2,76E+05	-3,02E+04	5,30E+05	5,25E+05	1,58E+05	8,9	
32	147	300,2	-	-	-	0,45190	0,01364	-1,16E+05	-2,76E+05	-2,94E+04	2,50E+05	5,25E+05	1,43E+05	0,2	
33	147	300,2	-	-	-	0,45200	0,01363	-1,16E+05	-2,76E+05	-2,92E+04	2,50E+05	5,25E+05	1,42E+05	0,2	
34	148	300,4	-	-	-	0,45210	0,01364	-1,16E+05	-2,76E+05	-2,93E+04	2,50E+05	5,26E+05	1,43E+05	0,9	
35	149	302,0	-	-	-	0,45390	0,01380	-1,16E+05	-2,75E+05	-3,12E+04	2,50E+05	5,27E+05	1,53E+05	9,2	
36	150	315,0	-	-	0,4015	0,06321	0,01563	-1,16E+05	-2,74E+05	-5,04E+04	2,50E+05	5,30E+05	2,51E+05	71,4	
37	130	443,0	-	-	-	-	0,02640	0,00E+00	0,00E+00	-1,14E+05	0,00E+00	0,00E+00	4,09E+05	-	



## AII.6 Simulação destilação de acetaldeído (k=9)

A função desta torre é purificar o acetaldeído até a concentração de 99,5%, separando-o do etanol e da água. O fundo desta torre, composto de etanol e água é parcialmente reciclado para a torre de absorção e o restante para a torre de esgotamento de etanol.

Coordenadas			Fluxos						Entalpia				Exergia			Total	
p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U				
[kPa]	[K]	[kW]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]				
0	273,0	-	-	-	-	-	-7,62E+04	-7,62E+04	0,00E+00	-	2,52E+05	0,00E+00	-				
1	320	326,5 (518,7)	-	0,0048	0,01666	0,00002	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	172,2				
2	321	326,6	-	-	0,01667	0,02144	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,2				
3	322	326,7	-	-	0,01667	0,02145	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
4	323	326,8	-	-	0,01667	0,02145	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
5	323	326,8	-	-	0,01667	0,02146	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
6	324	326,9	-	-	0,01668	0,02146	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
7	324	327,0	-	-	0,01668	0,02146	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
8	325	327,0	-	-	0,01668	0,02146	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
9	326	327,1	-	-	0,01668	0,02146	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,1				
10	326	327,2	-	-	0,01665	0,02146	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,0				
11	327	327,5	-	-	0,01652	0,02144	-7,62E+04	-1,90E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,0				
12	328	328,9	-	-	0,01575	0,02130	-7,62E+04	-1,94E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,14E+06	1,17E+06	0,0				
13	328	336,5	-	-	0,01334	0,02054	-7,62E+04	-2,14E+05	-1,67E+05	2,52E+05	1,07E+06	1,15E+06	0,0				
14	329	356,1	-	-	0,01121	0,01813	-7,62E+04	-2,46E+05	-1,78E+05	2,52E+05	8,84E+05	1,10E+06	0,0				
15	329	372,3	-	0,0632	0,07938	0,01599	-2,70E+05	-2,62E+05	-1,96E+05	5,31E+05	6,07E+05	9,75E+05	26,4				
16	330	373,2	-	-	0,07930	0,02099	-7,62E+04	-2,63E+05	-1,97E+05	2,52E+05	6,04E+05	9,69E+05	0,0				
17	331	374,3	-	-	0,07920	0,02091	-7,62E+04	-2,63E+05	-1,99E+05	2,52E+05	6,01E+05	9,62E+05	0,0				
18	331	375,6	-	-	0,07909	0,02081	-7,62E+04	-2,64E+05	-2,01E+05	2,52E+05	5,98E+05	9,52E+05	0,0				
19	332	377,1	-	-	0,07896	0,02070	-7,62E+04	-2,65E+05	-2,04E+05	2,52E+05	5,94E+05	9,40E+05	0,0				
20	333	378,7	-	-	0,07884	0,02057	-7,62E+04	-2,66E+05	-2,07E+05	2,52E+05	5,89E+05	9,26E+05	0,0				
21	333	380,5	-	-	0,07872	0,02045	-7,62E+04	-2,67E+05	-2,10E+05	2,52E+05	5,85E+05	9,11E+05	0,0				
22	334	382,2	-	-	0,07861	0,02033	-7,62E+04	-2,68E+05	-2,13E+05	2,52E+05	5,81E+05	8,95E+05	0,0				

	Coordenadas		Fluxos					Entalpia				Exergia		Ex. dest. U
	p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]
23	334	383,7	-	-	-	0,07853	0,02022	-7,62E+04	-2,69E+05	-2,17E+05	2,52E+05	5,77E+05	8,80E+05	0,0
24	335	385,1	-	-	-	0,07845	0,02013	-7,62E+04	-2,69E+05	-2,20E+05	2,52E+05	5,74E+05	8,67E+05	0,0
25	336	386,3	-	-	-	0,07840	0,02006	-7,62E+04	-2,70E+05	-2,22E+05	2,52E+05	5,71E+05	8,55E+05	0,0
26	336	387,3	-	-	-	0,07836	0,02001	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,25E+05	2,52E+05	5,69E+05	8,45E+05	0,0
27	337	388,1	-	-	-	0,07833	0,01996	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,26E+05	2,52E+05	5,67E+05	8,37E+05	0,0
28	338	388,7	-	-	-	0,07831	0,01994	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,28E+05	2,52E+05	5,66E+05	8,30E+05	0,0
29	338	389,2	-	-	-	0,07830	0,01992	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,29E+05	2,52E+05	5,65E+05	8,25E+05	0,0
30	339	389,6	-	-	-	0,07829	0,01991	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,30E+05	2,52E+05	5,64E+05	8,21E+05	0,0
31	339	389,9	-	-	-	0,07829	0,01990	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,31E+05	2,52E+05	5,63E+05	8,18E+05	0,0
32	340	390,1	-	-	-	0,07830	0,01990	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,31E+05	2,52E+05	5,63E+05	8,16E+05	0,0
33	341	390,3	-	-	-	0,07830	0,01990	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,63E+05	8,15E+05	0,0
34	341	390,5	-	-	-	0,07831	0,01991	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,63E+05	8,13E+05	0,0
35	342	390,6	-	-	-	0,07832	0,01991	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,62E+05	8,12E+05	0,0
36	343	390,7	-	-	-	0,07832	0,01992	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,62E+05	8,12E+05	0,0
37	343	390,8	-	-	-	0,07833	0,01993	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,62E+05	8,11E+05	0,0
38	344	390,9	-	-	-	0,07834	0,01994	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,61E+05	8,10E+05	0,0
39	344	391,1	-	-	-	0,07829	0,01994	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,32E+05	2,52E+05	5,52E+05	8,06E+05	0,2
40	345	391,8	742,9	-	-	0,05839	0,01990	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	4,80E+05	7,71E+05	46,9



## ***Apêndice III***

### **Resultados da simulação da configuração alternativa**

#### **AIII.1 Introdução**

Nas páginas seguintes estão os resultados obtidos a partir da solução do modelo alternativo apresentado no Capítulo 4.

O primeiro item é o balanço de massa, energia e exergia calculado, bem como as principais propriedades de cada corrente estudada. Em seguida aparecem, separadamente, cada uma das três colunas de separação, com os resultados obtidos prato a prato.

## AIII.2 Balanço de massa

Nr. Corrente	1A		1B		2		3	
TAG EES	L[1;28]		F[1;2]		L[2;29]		V[1;1]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Etanol	86,00%	0,0034	86,00%	0,0017	86,00%	0,0034	81,47%	0,0060
Água	14,00%	0,0005	14,00%	0,0003	14,00%	0,0005	18,52%	0,0014
Oxigênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Hidrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Total	100,00%	0,0039	100,00%	0,0019	100,00%	0,0039	100,00%	0,0073
Temperatura [K]	298,0		298,0		362,3		362,2	
Pressão [kPa]							140	
Entalpia [kJ/kmol]	-2,7829E+05		-2,7829E+05		-2,7054E+05		-2,3216E+05	
Exergia [kJ/kmol]	1,1730E+06		1,1730E+06		2,5244E+05		1,1190E+06	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Vapor	
Nr. Corrente	4		5		6		7	
TAG EES	V[2;2]		V[1;2]		V[2;4]		V[2;5]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	17,51%	0,0043
Etanol	29,48%	0,0060	34,41%	0,0076	34,41%	0,0076	12,96%	0,0032
Água	8,72%	0,0018	9,18%	0,0020	9,18%	0,0020	23,40%	0,0058
Oxigênio	12,94%	0,0026	11,81%	0,0026	11,81%	0,0026	2,54%	0,0006
Nitrogênio	48,86%	0,0099	44,60%	0,0099	44,60%	0,0099	39,86%	0,0099
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	3,16%	0,0008
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,56%	0,0001
Total	100,00%	0,0202	100,00%	0,0222	100,00%	0,0222	99,99%	0,0248
Temperatura [K]	348,5		339,7		402,6		888,3	
Pressão [kPa]	140		130		130		130	
Entalpia [kJ/kmol]	-8,8275E+04		-1,0126E+05		-9,8350E+04		-8,7907E+04	
Exergia [kJ/kmol]	4,0340E+05		4,7132E+05		4,7189E+05		4,0420E+05	
Estado	Vapor		Vapor		Vapor		Vapor	
Nr. Corrente	8		8B		8C		8D	
TAG EES	V[2;10]		V[4;4]		V[1;20]		L[1;21]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	17,51%	0,0043	0,00%	0,0000	18,75%	0,0028	15,63%	0,0015
Etanol	12,96%	0,0032	77,21%	0,0191	2,67%	0,0004	28,66%	0,0028
Água	23,40%	0,0058	22,78%	0,0056	2,22%	0,0003	55,71%	0,0055
Oxigênio	2,54%	0,0006	0,00%	0,0000	4,21%	0,0006	0,00%	0,0000
Nitrogênio	39,86%	0,0099	0,00%	0,0000	65,99%	0,0099	0,00%	0,0000
Hidrogênio	3,16%	0,0008	0,00%	0,0000	5,23%	0,0008	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,56%	0,0001	0,00%	0,0000	0,93%	0,0001	0,00%	0,0000
Total	99,99%	0,0248	100,00%	0,0248	100,00%	0,0150	100,00%	0,0098
Temperatura [K]	443,0		384,9		303,9		303,5	
Pressão [kPa]	130		130		150			
Entalpia [kJ/kmol]	-1,1216E+05		-1,1476E+05		-4,6270E+04		-2,6780E+05	
Exergia [kJ/kmol]	3,9106E+05		3,9033E+05		2,6744E+05		5,7222E+05	
Estado	Vapor		Vapor		Vapor		Líquido	

Nr. Corrente	8E		9		10		11	
TAG EES	L[3;23]		V[1;3]		V[2;3]		L[50;1]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	15,63%	0,0015	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Etanol	28,66%	0,0028	0,00%	-	0,00%	-	1,37%	0,0005
Água	55,71%	0,0055	3,16%	0,0004	3,16%	0,0004	98,63%	0,0361
Oxigênio	0,00%	0,0000	20,28%	0,0026	20,28%	0,0026	0,00%	(0,0000)
Nitrogênio	0,00%	0,0000	76,56%	0,0099	76,56%	0,0099	0,00%	0,0000
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	(0,0000)
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	0,0000
Total	100,00%	0,0098	100,00%	0,0129	100,00%	0,0129	100,00%	0,0366
Temperatura [K]	358,8		298,0		330,7		383,0	
Pressão [kPa]			101,3		140			
Entalpia [kJ/kmol]	-2,6216E+05		-7,6450E+03		-6,6850E+03		-2,7914E+05	
Exergia [kJ/kmol]	5,7329E+05		1,4760E+02		9,9830E+02		2,2478E+04	
Estado	Líquido		Vapor		Vapor		Líquido	
Nr. Corrente	12		13		14		14B	
TAG EES	L[3;26]		L[4;29]		L[4;8]		L[1;25]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Etanol	1,37%	0,0005	1,37%	0,0005	2,41%	0,0008	2,41%	0,0008
Água	98,63%	0,0361	98,63%	0,0361	97,58%	0,0328	97,58%	0,0328
Oxigênio	0,00%	(0,0000)	0,00%	(0,0000)	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Nitrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Hidrogênio	0,00%	(0,0000)	0,00%	(0,0000)	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Total	100,00%	0,0366	100,00%	0,0366	100,00%	0,0336	100,00%	0,0336
Temperatura [K]	363,2		361,5		310,1		319,7	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8067E+05		-2,8080E+05		-2,8459E+05		-2,8386E+05	
Exergia [kJ/kmol]	2,2173E+04		2,2150E+04		3,5837E+04		3,5873E+04	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Líquido	
Nr. Corrente	14C		14D		15		16	
TAG EES	L[1;26]		L[2;26]		L[2;27]		L[3;27]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-
Etanol	2,41%	0,0008	2,41%	0,0008	2,41%	0,0008	35,68%	0,0023
Água	97,58%	0,0328	97,58%	0,0328	97,58%	0,0328	64,32%	0,0041
Oxigênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-
Nitrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	-
Total	100,00%	0,0336	100,00%	0,0336	100,00%	0,0336	100,00%	0,0064
Temperatura [K]	348,4		369,9		376,7		392,2	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8165E+05		-2,7998E+05		-2,7945E+05		-2,7271E+05	
Exergia [kJ/kmol]	3,6103E+04		3,6381E+04		3,6486E+04		4,8919E+05	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Líquido	

Nr. Corrente	17		18		19		20	
TAG EES	L[4;27]		L[36;6]		L[4;22]		BL[1;9]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	-	8,72%	0,0028	8,72%	0,0028	99,92%	0,0059
Etanol	35,68%	0,0023	31,64%	0,0102	31,64%	0,0102	0,01%	0,0000
Água	64,32%	0,0041	59,63%	0,0192	59,63%	0,0192	0,07%	0,0000
Oxigênio	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Hidrogênio	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Total	100,00%	0,0064	99,99%	0,0322	99,99%	0,0322	100,00%	0,0059
Temperatura [K]	363,2		311,4		356,5		326,5	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8067E+05		-2,7316E+05		-2,6865E+05		-1,8890E+05	
Exergia [kJ/kmol]	2,2173E+04		5,3366E+05		5,3406E+05		1,1620E+06	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Líquido	
Nr. Corrente	23		24		25		26	
TAG EES	V[1;6]		V[1;8]		L[1;23]		L[2;23]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Etanol	6,34%	0,0008	0,00%	0,0000	49,88%	0,0150	49,88%	0,0150
Água	4,36%	0,0006	1,62%	0,0002	50,12%	0,0150	50,12%	0,0150
Oxigênio	4,92%	0,0006	5,42%	0,0006	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Nitrogênio	77,17%	0,0099	85,02%	0,0099	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Hidrogênio	6,12%	0,0008	6,74%	0,0008	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Dióxido Carbono	1,09%	0,0001	1,20%	0,0001	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000
Total	100,00%	0,0128	100,00%	0,0116	100,00%	0,0300	100,00%	0,0300
Temperatura [K]	310,2		289,6		390,0		372,8	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8102E+05		-2,8644E+05		-2,7301E+05		-2,7485E+05	
Exergia [kJ/kmol]	4,8061E+05		5,5100E+05		4,8397E+05		4,8360E+05	
Estado	Vapor		Vapor		Líquido		Líquido	
Nr. Corrente	26B		27		28		29	
TAG EES	L[2;22]		L[2;24]		L[1;17]		L[2;17]	
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]
Acetaldeído	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000			0,00%	-
Etanol	49,88%	0,0150	49,88%	0,0150			0,00%	-
Água	50,12%	0,0150	50,12%	0,0150			100,00%	0,0324
Oxigênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000			0,00%	-
Nitrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000			0,00%	-
Hidrogênio	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000			0,00%	-
Dióxido Carbono	0,00%	0,0000	0,00%	0,0000			0,00%	-
Total	100,00%	0,0300	100,00%	0,0300			100,00%	0,0324
Temperatura [K]	324,2		315,5				288,0	
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,7969E+05		-2,8051E+05				-2,8657E+05	
Exergia [kJ/kmol]	4,8301E+05		4,8298E+05				3,1330E+03	
Estado	Líquido		Líquido		Líquido		Líquido	

Nr. Corrente	30		31		32			
TAG EES	BL[6;20]		L[3;28]		L[4;28]			
[unidade]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]	[%kmol]	[kmol/s]		
Acetaldeído	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-		
Etanol	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-		
Água	100,00%	0,1300	100,00%	0,0324	100,00%	0,0324		
Oxigênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-		
Nitrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-		
Hidrogênio	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-		
Dióxido Carbono	0,00%	-	0,00%	-	0,00%	-		
Total	100,00%	0,1300	100,00%	0,1300	100,00%	0,1300		
Temperatura [K]	352,6		345,1		342,5			
Pressão [kPa]								
Entalpia [kJ/kmol]	-2,8170E+05		-2,8227E+05		-2,8246E+05			
Exergia [kJ/kmol]	3,4570E+03		3,3740E+03		3,3480E+03			
Estado	Líquido		Líquido		Líquido			



AIII.3 Simulação torre de esgotamento de etanol (k=1), modelo alternativo

	Coordenadas		Fluxos					Entalpia			Exergia			Ex. dest.	
	p [kPa]	T [K]	Q [kW]	F [kmol/s]	L [kmol/s]	V [kmol/s]	HF [kJ/kmol]	HL [kJ/kmol]	HV [kJ/kmol]	ExF [kJ/kmol]	ExL [kJ/kmol]	ExV [kJ/kmol]	U [kW]		
1	140	362,2	-	0,0039	0,00390	0,00732	-2,71E+05	-2,71E+05	-2,32E+05	1,17E+06	1,11E+06	1,12E+06	0,3		
2	140	362,3	-	-	0,00390	0,00731	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,32E+05	2,52E+05	1,07E+06	1,09E+06	0,2		
3	141	362,5	-	-	0,00390	0,00731	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,33E+05	2,52E+05	1,03E+06	1,06E+06	0,1		
4	141	362,6	-	-	0,00390	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	1,00E+06	1,04E+06	0,1		
5	142	362,7	-	-	0,00390	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,79E+05	1,03E+06	0,1		
6	142	362,8	-	-	0,00390	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,58E+05	1,01E+06	0,1		
7	142	362,9	-	-	0,00389	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,40E+05	1,00E+06	0,1		
8	143	363,1	-	-	0,00389	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,24E+05	9,95E+05	0,1		
9	143	363,2	-	-	0,00389	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	9,09E+05	9,86E+05	0,1		
10	144	363,3	-	-	0,00389	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,95E+05	9,78E+05	0,1		
11	144	363,4	-	-	0,00389	0,00731	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,81E+05	9,71E+05	0,1		
12	145	363,5	-	-	0,00389	0,00731	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,68E+05	9,63E+05	0,1		
13	145	363,7	-	-	0,00389	0,00730	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,55E+05	9,56E+05	0,1		
14	145	363,8	-	-	0,00389	0,00730	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,42E+05	9,49E+05	0,1		
15	146	363,9	-	-	0,00388	0,00730	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,29E+05	9,42E+05	0,1		
16	146	364,0	-	-	0,00388	0,00730	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,15E+05	9,35E+05	0,1		
17	147	364,2	-	-	0,00388	0,00730	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	8,01E+05	9,28E+05	0,1		
18	147	364,3	-	-	0,00388	0,00730	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,85E+05	9,20E+05	0,1		
19	147	364,5	-	-	0,00388	0,00729	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,69E+05	9,12E+05	0,1		
20	148	364,6	-	-	0,00387	0,00729	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,33E+05	2,52E+05	7,51E+05	9,04E+05	0,1		
21	148	364,8	-	-	0,00387	0,00729	-7,62E+04	-2,73E+05	-2,34E+05	2,52E+05	7,31E+05	8,94E+05	0,1		
22	149	365,0	-	-	0,00387	0,00729	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	7,08E+05	8,84E+05	0,1		
23	149	365,2	-	-	0,00386	0,00728	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,82E+05	8,72E+05	0,1		
24	149	365,4	-	-	0,00386	0,00728	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,51E+05	8,58E+05	0,1		
25	150	365,7	-	-	0,00385	0,00727	-7,62E+04	-2,74E+05	-2,34E+05	2,52E+05	6,15E+05	8,42E+05	0,1		
26	150	366,1	-	-	0,00384	0,00726	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,72E+05	8,23E+05	0,1		
27	151	366,5	-	0,0064	0,01029	0,00725	-2,75E+05	-2,75E+05	-2,34E+05	4,89E+05	5,20E+05	8,00E+05	0,1		
28	151	366,6	-	-	0,01029	0,00726	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,20E+05	8,00E+05	0,1		
29	151	366,7	-	-	0,01029	0,00726	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,19E+05	8,00E+05	0,1		
30	152	366,7	-	-	0,01029	0,00726	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,17E+05	7,99E+05	0,1		
31	152	366,9	-	-	0,01028	0,00726	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	5,11E+05	7,96E+05	0,1		

	Coordenadas		Fluxos				Entalpia			Exergia			Ex. dest
	p	T	Q	F	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmo/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]
32	153	367,1	-	-	0,01027	0,00726	-7,62E+04	-2,75E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,92E+05	7,88E+05	0,1
33	153	367,7	-	-	0,01022	0,00725	-7,62E+04	-2,76E+05	-2,34E+05	2,52E+05	4,32E+05	7,61E+05	0,3
34	154	369,6	-	-	0,01009	0,00720	-7,62E+04	-2,77E+05	-2,35E+05	2,52E+05	2,76E+05	6,78E+05	1,3
35	154	375,1	-	0,0336	0,04375	0,00706	-2,79E+05	-2,79E+05	-2,36E+05	3,65E+04	9,22E+04	4,60E+05	2,8
36	154	375,2	-	-	0,04375	0,00713	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,23E+04	4,60E+05	0,1
37	155	375,3	-	-	0,04376	0,00714	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,24E+04	4,60E+05	0,0
38	155	375,4	-	-	0,04377	0,00714	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,24E+04	4,60E+05	0,0
39	156	375,4	-	-	0,04377	0,00715	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,25E+04	4,60E+05	0,0
40	156	375,5	-	-	0,04378	0,00716	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,25E+04	4,60E+05	0,0
41	156	375,6	-	-	0,04378	0,00716	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,26E+04	4,60E+05	0,0
42	157	375,7	-	-	0,04379	0,00717	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,25E+04	4,60E+05	0,0
43	157	375,8	-	-	0,04380	0,00717	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,24E+04	4,59E+05	0,0
44	158	375,9	-	-	0,04380	0,00718	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,20E+04	4,58E+05	0,0
45	158	376,0	-	-	0,04381	0,00719	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	9,08E+04	4,55E+05	0,0
46	158	376,3	-	-	0,04381	0,00719	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	8,78E+04	4,48E+05	0,0
47	159	376,8	-	-	0,04381	0,00719	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	8,10E+04	4,30E+05	0,0
48	159	377,9	-	-	0,04381	0,00719	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,36E+05	2,52E+05	6,72E+04	3,88E+05	0,1
49	160	380,0	-	-	0,04384	0,00719	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,37E+05	2,52E+05	4,57E+04	3,04E+05	0,6
50	160	383,0	297,0	-	0,03662	0,00723	-7,62E+04	-2,79E+05	-2,38E+05	2,52E+05	2,25E+04	1,72E+05	24,3

### AIII.4 Simulação absorção de acetaldeído (k=6), modelo alternativo

	Propriedades		Fluxos					Entalpia				Exergia			Ex. dest.
	p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U	
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]	
0	-	310,0	-	-	-	0,05000	-	0,00E+00	-2,81E+05	0,00E+00	0,00E+00	4,74E+05	0,00E+00		
1	120	310,2	(4,5)	-	-	0,02978	0,01280	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,93E+04	1,17E+06	4,81E+05	1,01E+05	0,1762	
2	121	307,4	(2,5)	-	-	0,02967	0,01258	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,58E+04	2,52E+05	4,79E+05	8,90E+04	0,1306	
3	122	305,8	(1,3)	-	-	0,02961	0,01247	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,40E+04	2,52E+05	4,79E+05	8,27E+04	0,1482	
4	123	304,9	(0,7)	-	-	0,02957	0,01241	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,29E+04	2,52E+05	4,78E+05	7,91E+04	0,1685	
5	123	304,4	(0,3)	-	-	0,02955	0,01237	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,23E+04	2,52E+05	4,78E+05	7,69E+04	0,1832	
6	124	304,1	(0,1)	-	-	0,02953	0,01234	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,19E+04	2,52E+05	4,78E+05	7,54E+04	0,1924	
7	125	303,9	0,1	-	-	0,02952	0,01233	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,16E+04	2,52E+05	4,78E+05	7,45E+04	0,2155	
8	126	303,8	0,1	-	-	0,02951	0,01231	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,14E+04	2,52E+05	4,78E+05	7,37E+04	0,2413	
9	127	303,7	0,2	-	-	0,02950	0,01230	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,12E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,32E+04	0,2558	
10	128	303,7	0,2	-	-	0,02949	0,01230	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,11E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,27E+04	0,2636	
11	129	303,7	0,2	-	-	0,02949	0,01229	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,10E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,23E+04	0,2672	
12	129	303,7	0,2	-	-	0,02948	0,01228	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,08E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,19E+04	0,268	
13	130	303,7	0,2	-	-	0,02947	0,01228	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,07E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,15E+04	0,2669	
14	131	303,7	0,2	-	-	0,02947	0,01227	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,06E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,12E+04	0,2639	
15	132	303,7	0,2	-	-	0,02946	0,01226	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,05E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,08E+04	0,2746	
16	133	303,7	0,2	-	-	0,02946	0,01226	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,04E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,05E+04	0,2641	
17	134	303,7	0,2	-	-	0,02945	0,01225	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,03E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,02E+04	0,2615	
18	135	303,7	0,2	-	-	0,02945	0,01225	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,02E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,99E+04	0,2583	
19	135	303,7	0,2	-	-	0,02944	0,01224	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,01E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,96E+04	0,2544	
20	136	303,7	0,2	-	-	0,02944	0,01224	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,01E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,94E+04	0,2491	
21	137	303,8	0,2	-	-	0,02944	0,01224	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,00E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,92E+04	0,2419	
22	138	303,8	0,1	-	-	0,02944	0,01223	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,00E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,91E+04	0,2315	
23	139	304,0	0,0	-	-	0,02944	0,01224	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,00E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,92E+04	0,2166	
24	140	304,2	(0,1)	-	-	0,02946	0,01224	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,01E+04	2,52E+05	4,77E+05	6,96E+04	0,2272	
25	141	304,5	(0,3)	-	-	0,02948	0,01225	-7,62E+04	-2,82E+05	-2,03E+04	2,52E+05	4,77E+05	7,06E+04	0,2643	
26	141	304,9	(0,7)	-	-	0,02953	0,01228	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,07E+04	2,52E+05	4,78E+05	7,23E+04	0,3341	
27	142	305,7	(1,2)	-	-	0,02961	0,01233	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,14E+04	4,89E+05	4,79E+05	7,55E+04	0,4581	
28	143	306,7	(1,9)	-	-	0,02973	0,01240	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,25E+04	2,52E+05	4,81E+05	8,08E+04	0,6611	
29	144	308,0	(2,9)	-	-	0,02990	0,01252	-7,62E+04	-2,81E+05	-2,42E+04	2,52E+05	4,84E+05	8,90E+04	0,9583	
30	145	309,6	(4,0)	-	-	0,03013	0,01270	-7,62E+04	-2,80E+05	-2,66E+04	2,52E+05	4,88E+05	1,01E+05	1,339	

	Propriedades			Fluxos				Entalpia				Exergia			Ex. dest.
	p [kPa]	T [K]	Q [kW]	F [kmol/s]	BL [kmol/s]	L [kmol/s]	V [kmol/s]	HF [kJ/kmol]	HL [kJ/kmol]	HV [kJ/kmol]	ExF [kJ/kmol]	ExL [kJ/kmol]	ExV [kJ/kmol]		
31	146	311.1	(5.1)	-	-	0.03041	0.01293	-7.62E+04	-2.79E+05	-2.96E+04	2.52E+05	4.93E+05	1.17E+05	1.763	
32	147	312.5	(6.2)	-	-	0.03073	0.01321	-7.62E+04	-2.79E+05	-3.30E+04	2.52E+05	4.99E+05	1.37E+05	2.187	
33	147	313.6	(6.9)	-	-	0.03108	0.01353	-7.62E+04	-2.78E+05	-3.65E+04	2.52E+05	5.05E+05	1.59E+05	2.605	
34	148	314.0	(7.2)	-	-	0.03143	0.01388	-7.62E+04	-2.77E+05	-3.99E+04	2.52E+05	5.13E+05	1.82E+05	3.097	
35	149	314.0	(6.9)	-	-	0.03179	0.01423	-7.62E+04	-2.75E+05	-4.29E+04	3.65E+04	5.22E+05	2.07E+05	3.946	
36	150	314.0	(5.4)	-	-	0.03217	0.01459	-7.62E+04	-2.73E+05	-4.51E+04	2.52E+05	5.34E+05	2.34E+05	6.153	
37	139	304.0	0.0	-	-	0.02944	0.01224	-7.62E+04	-2.82E+05	-2.00E+04	2.52E+05	4.77E+05	6.92E+04	-	

### AIII.5 Simulação destilação de acetaldeído (k=9), modelo alternativo

Coordenadas		Fluxos				Entalpia				Exergia			Total
p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U
[kPa]	[K]	[kW]	[kmo/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]
0	-	273,0	-	-	-	-	-	-7,62E+04	0,00E+00	-	2,52E+05	0,00E+00	-
1	320	326,5	(426,3)	0,0059	0,01173	0,00002	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	141,5
2	322	326,8	-	-	0,01169	0,01761	-7,62E+04	-1,89E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,16E+06	1,17E+06	0,0
3	322	327,4	-	-	0,01149	0,01758	-7,62E+04	-1,91E+05	-1,65E+05	2,52E+05	1,15E+06	1,17E+06	0,0
4	323	329,9	-	-	0,01060	0,01738	-7,62E+04	-1,98E+05	-1,66E+05	2,52E+05	1,11E+06	1,16E+06	0,0
5	324	340,3	-	-	0,00871	0,01649	-7,62E+04	-2,24E+05	-1,69E+05	2,52E+05	9,75E+05	1,14E+06	0,0
6	325	358,8	-	-	0,04220	0,01460	-2,62E+05	-2,52E+05	-1,81E+05	5,94E+05	6,86E+05	1,06E+06	13,3
7	325	358,9	-	-	0,04221	0,01579	-7,62E+04	-2,52E+05	-1,81E+05	2,52E+05	6,86E+05	1,06E+06	0,1
8	326	359,0	-	-	0,04221	0,01579	-7,62E+04	-2,52E+05	-1,81E+05	2,52E+05	6,86E+05	1,06E+06	0,0
9	327	359,2	-	-	0,04221	0,01580	-7,62E+04	-2,52E+05	-1,81E+05	2,52E+05	6,85E+05	1,06E+06	0,0
10	328	359,4	-	-	0,04220	0,01580	-7,62E+04	-2,52E+05	-1,81E+05	2,52E+05	6,85E+05	1,06E+06	0,0
11	328	359,7	-	-	0,04218	0,01579	-7,62E+04	-2,52E+05	-1,81E+05	2,52E+05	6,84E+05	1,06E+06	0,0
12	329	360,2	-	-	0,04214	0,01577	-7,62E+04	-2,53E+05	-1,81E+05	2,52E+05	6,82E+05	1,05E+06	0,0
13	330	360,9	-	-	0,04205	0,01572	-7,62E+04	-2,53E+05	-1,82E+05	2,52E+05	6,79E+05	1,05E+06	0,0
14	331	362,2	-	-	0,04191	0,01564	-7,62E+04	-2,54E+05	-1,83E+05	2,52E+05	6,74E+05	1,04E+06	0,0
15	331	364,1	-	-	0,05253	0,01549	-2,67E+05	-2,56E+05	-1,85E+05	5,56E+05	6,55E+05	1,03E+06	4,2
16	332	364,2	-	-	0,05254	0,01610	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,1
17	333	364,3	-	-	0,05256	0,01611	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,1
18	334	364,4	-	-	0,05257	0,01612	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,1
19	334	364,4	-	-	0,05258	0,01613	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,1
20	335	364,5	-	-	0,05259	0,01614	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,1
21	336	364,6	-	-	0,05260	0,01616	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,56E+05	1,03E+06	0,1
22	337	364,7	-	-	0,05261	0,01617	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,1
23	337	364,8	-	-	0,05262	0,01618	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,0
24	338	365,0	-	-	0,05262	0,01618	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,85E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,0
25	339	365,2	-	-	0,05262	0,01619	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,86E+05	2,52E+05	6,55E+05	1,03E+06	0,0
26	340	365,4	-	-	0,05260	0,01618	-7,62E+04	-2,56E+05	-1,86E+05	2,52E+05	6,54E+05	1,03E+06	0,0
27	340	365,9	-	-	0,05257	0,01617	-7,62E+04	-2,57E+05	-1,86E+05	2,52E+05	6,53E+05	1,03E+06	0,0
28	341	366,5	-	-	0,05250	0,01613	-7,62E+04	-2,57E+05	-1,87E+05	2,52E+05	6,51E+05	1,02E+06	0,0
29	342	367,5	-	-	0,05240	0,01607	-7,62E+04	-2,58E+05	-1,88E+05	2,52E+05	6,47E+05	1,02E+06	0,0
30	343	369,0	-	-	0,05226	0,01597	-7,62E+04	-2,59E+05	-1,90E+05	2,52E+05	6,42E+05	1,01E+06	0,0

	Coordenadas		Fluxos							Entalpia				Exergia		Ex. dest.
	p	T	Q	F	BL	L	V	HF	HL	HV	ExF	ExL	ExV	U		
	[kPa]	[K]	[kW]	[kmo/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kmol/s]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kJ/kmol]	[kW]	
31	343	371,1	-	-	-	0,05207	0,01582	-7,62E+04	-2,60E+05	-1,93E+05	2,52E+05	6,36E+05	9,96E+05	0,0		
32	344	373,9	-	-	-	0,05185	0,01563	-7,62E+04	-2,62E+05	-1,97E+05	2,52E+05	6,28E+05	9,78E+05	0,0		
33	345	377,0	-	-	-	0,05164	0,01542	-7,62E+04	-2,64E+05	-2,02E+05	2,52E+05	6,19E+05	9,55E+05	0,0		
34	346	380,2	-	-	-	0,05146	0,01521	-7,62E+04	-2,66E+05	-2,07E+05	2,52E+05	6,10E+05	9,29E+05	0,0		
35	346	383,2	-	-	-	0,05132	0,01502	-7,62E+04	-2,67E+05	-2,13E+05	2,52E+05	6,03E+05	9,02E+05	0,0		
36	347	385,7	-	-	-	0,05122	0,01488	-7,62E+04	-2,69E+05	-2,19E+05	2,52E+05	5,97E+05	8,79E+05	0,0		
37	348	387,6	-	-	-	0,05115	0,01478	-7,62E+04	-2,70E+05	-2,23E+05	2,52E+05	5,92E+05	8,60E+05	0,0		
38	349	389,1	-	-	-	0,05110	0,01471	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,27E+05	2,52E+05	5,87E+05	8,44E+05	0,0		
39	349	390,2	-	-	-	0,05102	0,01466	-7,62E+04	-2,71E+05	-2,29E+05	2,52E+05	5,74E+05	8,29E+05	0,0		
40	350	391,6	543,0	-	-	0,03644	0,01459	-7,62E+04	-2,72E+05	-2,31E+05	2,52E+05	4,94E+05	7,84E+05	32,8		

## Apêndice IV

### Listagem do código EES

#### A.1 Lista de funções

```

FUNCTION CpG(i;T)
  CpG = Lookup('CpGas';i;1) + Lookup('CpGas';i;2)*T + Lookup('CpGas';i;3)*T^2 + Lookup('CpGas';i;4)*T^3 {J/mol.K}
END

FUNCTION CpL(i;T)
  CpL = Lookup('CpLiq';i;1) + Lookup('CpLiq';i;2)*T + Lookup('CpLiq';i;3)*T^2 + Lookup('CpLiq';i;4)*T^3 + Lookup('CpLiq';i;5)*T^4
END

FUNCTION hg(i;T)
  T_ref = 298,15 {temperatura de referência, K}
  hg = Lookup('CpGas';i;5) + Lookup('CpGas';i;1)*(T-T_ref) + Lookup('CpGas';i;2)*(T^2-T_ref^2)/2 + Lookup('CpGas';i;3)*(T^3-T_ref^3)/3 +
  Lookup('CpGas';i;4)*(T^4-T_ref^4)/4
END

FUNCTION hl(i;T)
  T_ref = 298,15 {temperatura de referência, K}
  hl = Lookup('CpLiq';i;6) + Lookup('CpLiq';i;1)*(T-T_ref) + Lookup('CpLiq';i;2)*(T^2-T_ref^2)/2 + Lookup('CpLiq';i;3)*(T^3-T_ref^3)/3 +
  Lookup('CpLiq';i;4)*(T^4-T_ref^4)/4 + Lookup('CpLiq';i;5)*(T^5-T_ref^5)/5
END

FUNCTION sg(i;T;p)
  T_ref = 298,15 {temperatura de referência, K}

```

```

p_ref = 101,3 {pressão de referência, kPa}
R = 8,31439 {J/mol.K}
sg = Lookup('CpGas';i;6) + Lookup('CpGas';i;1)*ln(T/T_ref) + Lookup('CpGas';i;2)*(T-T_ref) + Lookup('CpGas';i;3)*(T^2-T_ref^2)/2 +
Lookup('CpGas';i;4)*(T^3-T_ref^3)/3 - R*ln(p/p_ref)
END

```

```

FUNCTION sl(i;T)
  T_ref = 298,15 {temperatura de referência, K}
  sl = Lookup('CpLiq';i;7) + Lookup('CpLiq';i;1)*ln(T/T_ref) + Lookup('CpLiq';i;2)*(T-T_ref) + Lookup('CpLiq';i;3)*(T^2-T_ref^2)/2 +
Lookup('CpLiq';i;4)*(T^3-T_ref^3)/3 + Lookup('CpLiq';i;5)*(T^4-T_ref^4)/4
END

```

```

PROCEDURE Wilson(n;T:A[1;1];A[1;2];A[1;3];A[2;1];A[2;2];A[2;3];A[3;1];A[3;2];A[3;3])

```

```

i = 1

```

```

R = 1,98721 {cal/mol.K}

```

```

REPEAT

```

```

  j = 1

```

```

  REPEAT

```

```

    A[i;j] = Lookup('beta';i,j)*exp(-(Lookup('alfa';i,j))/T/R)

```

```

    j = j + 1

```

```

  UNTIL (j>n)

```

```

  i = i + 1

```

```

UNTIL (i>n)

```

```

END

```

```

FUNCTION gamma(i;n;x[1];x[2];x[3];T)

```

```

  CALL Wilson(3;T:A[1;1];A[1;2];A[1;3];A[2;1];A[2;2];A[2;3];A[3;1];A[3;2];A[3;3])

```

```

  Soma1 = 0

```

```

  Soma2 = 0

```

```

  Soma3 = 0

```

```

  l = 0

```

```

  REPEAT

```

```

    l = l + 1

```

```

  j = 0

```



```

REPEAT
  j = j + 1
  Soma1 = Soma1 + A[i,j]*x[j]
UNTIL (j=n)
Soma2 = Soma2 + A[i,j]*x[j]/Soma1
Soma1 = 0
UNTIL (i=n)
k = 0
REPEAT
  k = k + 1
  Soma3 = Soma3 + A[i,k]*x[k]
UNTIL (k=n)
Aux = 1 - ln(Soma3) - Soma2
gamma = exp(Aux)

END

FUNCTION GE(T;x[1];x[2];x[3])
  n = 3
  i = 0
  Soma1 = 0
  R = 8,31439 {J/mol.K}
  REPEAT
    i = i + 1
    Soma1 = Soma1 + x[i]*ln(gamma(i;n;x[1];x[2];x[3];T))
  UNTIL(i=n)
  GE = R*T*Soma1

END

FUNCTION HE(T;x[1];x[2];x[3])
  R = 8,31439 {J/mol.K}
  h = 0,00001
  HE = -R*T^2*(GE(T+h;x[1];x[2];x[3])/R/(T+h)-GE(T;x[1];x[2];x[3])/R/T)/h

END

FUNCTION SE(T;x[1];x[2];x[3])

```

```

SE = (HE(T;x[1];x[2];x[3])-GE(T;x[1];x[2];x[3]))/T
END

FUNCTION PV(i;T)
  PV = (exp (lookup('Antoine';i;1) - lookup('Antoine';i;2)/(T+ lookup('Antoine';i;3))))*100 {kPa}
END

FUNCTION EntalpiaLiq(T;x[1];x[2];x[3])
  i = 1
  n = 3
  EntalpiaLiq = 0
  REPEAT
    EntalpiaLiq = EntalpiaLiq + h(i;T)*x[i]
    i = i + 1
  UNTIL(i>n)
  EntalpiaLiq = EntalpiaLiq + HE(T;x[1];x[2];x[3])
END

FUNCTION EntalpiaGas(T;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
  i = 1
  n = 7
  EntalpiaGas = 0
  REPEAT
    EntalpiaGas = EntalpiaGas + hg(i;T)*y[i]
    i = i + 1
  UNTIL(i>n)
END

FUNCTION EntropiaLiq(T;x[1];x[2];x[3])
  i = 1
  n = 3
  R = 8,31439
  Soma1 = 0
  Soma2 = 0
  EntropiaLiq = 0

```

```

REPEAT
  IF (x[i] > 0) THEN
    Soma1 = Soma1 + x[i]*sl(i;T)
    Soma2 = Soma2 + x[i]*ln(x[i])
  ENDIF
  i = i + 1
UNTIL (i>n)
EntropiaLiq = SE(T;x[1];x[2];x[3]) + Soma1 - R*Soma2

END

FUNCTION EntropiaGas(T;p;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
  i = 1
  n = 7
  R = 8,31439
  Soma1 = 0
  Soma2 = 0
  EntropiaLiq = 0
  REPEAT
    IF (y[i]>0) THEN
      Soma1 = Soma1 + y[i]*sg(i;T;p)
      Soma2 = Soma2 + y[i]*ln(y[i])
    ENDIF
    i = i + 1
  UNTIL (i>n)
  EntropiaGas = Soma1 - R*Soma2

END

FUNCTION K(i;T;P;x[1];x[2];x[3])
  IF (i<4) THEN
    K = gamma(i;3;x[1];x[2];x[3];T)*PV(i;T)/P
  ELSE
    K = 1/exp(lookup('Solubilidade';i-3;1)+lookup('Solubilidade';i-3;2)*100/T+lookup('Solubilidade';i-3;3)*ln(T/100))
  ENDIF

END

```

```

PROCEDURE Compressor(T[1];y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7];p[1];p[2];W;T[2])
{Calcula a temperatura de descarga T[2] e o trabalho realizado W realizado pelo compressor}
tolerancia = 0,5
i = 1
R = 8,31439 {J/mol.K}
n = 7 {nr. componentes}
Z = 1 {gás ideal}
Eta_poli = 0,88 {eficiência politrópica}
Tmed = T[1]
REPEAT
    Cp = 0
    i = 1
    REPEAT
        Cp = Cp + y[i]*CpG(i;Tmed)    {Calcula Cp na temperatura média do compressor, Tmed}
        i = i + 1
    UNTIL(i>n)
    Cv = Cp - R
    gamma = Cp/Cv
    k = 1/(1-(gamma-1)/gamma/Eta_poli)    {expoente politrópico}
    W = Z*R*T[1]*k/(k-1)*(p[2]/p[1])^((k-1)/k)-1)    {Trabalho ideal do compressor, kJ/kmol}
    T[2] = T[1]*(p[2]/p[1])^((k-1)/k)    {Temperatura de saída do compressor, K}
    Taux = Tmed
    Tmed = (T[2]+T[1])/2
    erro = ABS(Tmed - Taux)
    UNTIL(erro<tolerancia)
END

FUNCTION ExergiaGas(T;p;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
R = 8,314
n = 7
i = 1
Soma1 = 0
Soma2 = 0
T_pdr = 298    {temperatura padrão; K}
p_pdr = 101,3    {pressão padrão; kPa}

```

```

H0 = EntalpiaGas(T_pdr;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
S0 = EntropiaGas(T_pdr;p_pdr;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
H = EntalpiaGas(T;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
S = EntropiaGas(T;p;y[1];y[2];y[3];y[4];y[5];y[6];y[7])
REPEAT
  IF (y[i]>1e-6) THEN
    Soma1 = Soma1 + y[i]*Lookup('ExergiaQuimica';i;2)
    Soma2 = Soma2 + y[i]*ln(y[i])
  ENDIF
  i = i + 1
UNTIL(i>n)
ExQV = Soma1 + R*T_pdr*Soma2
ExergiaGas = ExQV + (H - H0) - T_pdr*(S - S0)

END

FUNCTION ExergiaLiq(T;x[1];x[2];x[3])
  R = 8,314
  n = 3
  i = 1
  Soma1 = 0
  Soma2 = 0
  T_pdr = 298 {temperatura padrão; K}
  H0 = EntalpiaLiq(T_pdr;x[1];x[2];x[3])
  S0 = EntropiaLiq(T_pdr;x[1];x[2];x[3])
  H = EntalpiaLiq(T;x[1];x[2];x[3])
  S = EntropiaLiq(T;x[1];x[2];x[3])
REPEAT
  IF (x[i]>0) THEN
    Soma1 = Soma1 + x[i]*Lookup('ExergiaQuimica';i;1)
    Soma2 = Soma2 + x[i]*ln(gamma(i;n;x[1];x[2];x[3];T)*x[i])
  ENDIF
  i = i + 1
UNTIL(i>n)
ExQL = Soma1 + R*T_pdr*Soma2
ExergiaLiq = ExQL + (H - H0) - T_pdr*(S - S0)

END

```

```
FUNCTION Carnot(Q;t;to)
  T_0 = 298
  IF Q>=0 THEN
    Carnot = 1-T_0/428
  ELSE
    Carnot = ((t^2-to^2)/2 - (t-to)*(to+T_0) + to*T_0*ln(t/to))/(t-to)^2
  ENDIF
END
```

## A.2 Primeiro bloco de equações

```
{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo do Compressor de Ar, W101A, - unidade = 3}

V[1;3] = 0,015364      {kmol/s - entrada do compressor W101A}
T[1;3] = 298           {K, temperatura de alimentação do compressor}
p[1;3] = 101,3         {kPa, pressão de sucção do compressor}
p[2;3] = 170,0         {kPa, pressão de descarga do compressor}
y[1;1;3] = 0
y[2;1;3] = 0
y[3;1;3] = 0,0316
y[4;1;3] = 0,2028
y[5;1;3] = 0,7656
y[6;1;3] = 0
y[7;1;3] = 0
HV[1;3] = EntalpiaGas(T[1;3];y[1;1;3];y[2;1;3];y[3;1;3];y[4;1;3];y[5;1;3];y[6;1;3];y[7;1;3])
ExV[1;3] = ExergiaGas(T[1;3];p[1;3];y[1;1;3];y[2;1;3];y[3;1;3];y[4;1;3];y[5;1;3];y[6;1;3];y[7;1;3])
CALL Compressor(T[1;3];y[1;1;3];y[2;1;3];y[3;1;3];y[4;1;3];y[5;1;3];y[6;1;3];p[1;3];p[2;3];W[3];T[2;3])
V[2;3] = V[1;3]
y[1;2;3] = y[1;1;3]
y[2;2;3] = y[2;1;3]
y[3;2;3] = y[3;1;3]
y[4;2;3] = y[4;1;3]
y[5;2;3] = y[5;1;3]
y[6;2;3] = y[6;1;3]
y[7;2;3] = y[7;1;3]
HV[2;3] = EntalpiaGas(T[2;3];y[1;2;3];y[2;2;3];y[3;2;3];y[4;2;3];y[5;2;3];y[6;2;3];y[7;2;3])
ExV[2;3] = ExergiaGas(T[2;3];p[2;3];y[1;2;3];y[2;2;3];y[3;2;3];y[4;2;3];y[5;2;3];y[6;2;3];y[7;2;3])
V[1;3]*HV[1;3] + W[1;3] - V[2;3]*HV[2;3] = 0      {Balanço energia compressor, und = 3}
V[1;3]*ExV[1;3] + W[1;3] - V[2;3]*ExV[2;3] = U[1;3]  {Irreversibilidade und = 3}
(V[2;3]*ExV[2;3]-V[1;3]*ExV[1;3])/W[1;3] = psi[1;3] {Rendimento exergético}
```

```
{Calculo da Mistura Ar/Etanol na entrada do EV101A}
HV[2;3]*V[2;3] + HV[1;1]*V[1;1] = HV[2;2]*V[2;2]
V[2;3] + V[1;1] = V[2;2]
DUPLICATE i = 1;7
    y[i;2;2]*V[2;2] = y[i;1;1]*V[1;1] + y[i;2;3]*V[2;3]
END
HV[2;2] = EntalpiaGas(T[2;2];y[1;2;2];y[2;2;2];y[3;2;2];y[4;2;2];y[5;2;2];y[6;2;2];y[7;2;2])
p[2;2] = 170
ExV[2;2] = ExergiaGas(T[2;2];p[2;2];y[1;2;2];y[2;2;2];y[3;2;2];y[4;2;2];y[5;2;2];y[6;2;2];y[7;2;2])
ExV[2;3]*V[2;3] + ExV[1;1]*V[1;1] - ExV[2;2]*V[2;2] = U[1;0]
    {Balanço exergia da mistura Etanol/Ar}

{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo do Evaporador de Etanol, EV101A - unidade = 2}

DUPLICATE i = 1;7
    L[0;2]*x[i;0;2] + V[2;2]*y[i;2;2] + F[1;2]*z[i;1;2] - (L[1;2]+BL[1;2])*x[i;1;2] - V[1;2]*y[i;1;2] = 0
    y[i;1;2] - K(i;T[1;2];p[1;2];x[1;1;2];x[2;1;2];x[3;1;2])*x[i;1;2] = 0
END
HF[1;2] = EntalpiaLiq(TF[1;2];z[1;1;2];z[2;1;2];z[3;1;2])
HL[1;2] = EntalpiaLiq(T[1;2];x[1;1;2];x[2;1;2];x[3;1;2])
HV[1;2] = EntalpiaGas(T[1;2];y[1;1;2];y[2;1;2];y[3;1;2];y[4;1;2];y[5;1;2];y[6;1;2];y[7;1;2])
L[0;2]*HL[0;2] + V[2;2]*HV[2;2] + F[1;2]*HF[1;2] - (L[1;2]+BL[1;2])*HL[1;2] - V[1;2]*HV[1;2] + Q[1;2] = 0
    {balanço de energia}

ExV[2;2]*V[2;2] + ExF[1;2]*F[1;2] - (L[1;2]+BL[1;2])*ExL[1;2] - V[1;2]*ExV[1;2] + Q[1;2]*Carnot(Q[1;2];307;301) = U[1;2]
SUM(x[i;1;2];ii = 1;7) - 1 = 0
SUM(y[i;1;2];ii = 1;7) - 1 = 0
ExF[1;2] = ExergiaLiq(TF[1;2];z[1;1;2];z[2;1;2];z[3;1;2])
ExL[1;2] = ExergiaLiq(T[1;2];x[1;1;2];x[2;1;2];x[3;1;2])
ExV[1;2] = ExergiaGas(T[1;2];p[1;2];y[1;1;2];y[2;1;2];y[3;1;2];y[4;1;2];y[5;1;2];y[6;1;2];y[7;1;2])

ExEntra = ExV[2;2]*V[2;2] + ExF[1;2]*F[1;2]
```

{balanço molar por componente}  
{equilíbrio líquido-vapor}

{balanço de energia}



$$\text{ExSai} = - (L[1;2] + BL[1;2]) * \text{ExL}[1;2] - V[1;2] * \text{ExV}[1;2]$$

$$BL[1;2] = 0$$

$$p[1;2] = 165$$

$$\{Q[1;2] = 0\}$$

$$T[1;2] = 350$$

{Definição da corrente Make-up de Etanol do EV101A}

$$F[1;2] = 0,000203 * 3 \text{ {kmol/s}}$$

$$TF[1;2] = 298 \text{ {K}}$$

$$z[1;1;2] = 0$$

$$z[2;1;2] = 0,86$$

$$z[3;1;2] = 0,14$$

$$z[4;1;2] = 0$$

$$z[5;1;2] = 0$$

$$z[6;1;2] = 0$$

$$z[7;1;2] = 0$$

{Definição da corrente fantasma de alimentação de líquido do EV101A}

$$L[0;2] = 0$$

$$T[0;2] = 273$$

$$x[1;0;2] = 0,1$$

$$x[2;0;2] = 0,1$$

$$x[3;0;2] = 0,1$$

$$x[4;0;2] = 0,1$$

$$x[5;0;2] = 0,1$$

$$x[6;0;2] = 0,1$$

$$x[7;0;2] = 0,1$$

$$HL[0;2] = \text{EntalpiaLiq}(T[0;2]; x[1;0;2]; x[2;0;2]; x[3;0;2])$$

$$\text{ExL}[0;2] = \text{ExergiaLiq}(T[0;2]; x[1;0;2]; x[2;0;2]; x[3;0;2])$$

{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo do Pre-Aquecedor do reator, H102A - unidade 4}

```

{Definição das correntes de entrada e saída do H102A}
V[1;4] = V[1;2]
V[2;4] = V[1;4]
T[2;4] = 393 {Temperatura de saída do H102A}
p[2;4] = p[1;2]
DUPLICATE i = 1;7
    y[i;1;4] = y[i;1;2]
    y[i;2;4] = y[i;1;4]
END
HV[1;4] = HV[1;2]
ExV[1;4] = ExV[1;2]
T[1;4] = T[1;2]
HV[1;4]*V[1;4] + Q[1;4] = HV[2;4]*V[2;4]
ExV[1;4]*V[1;4] + Q[1;4]*Carnot(Q[1;4];307;301) - ExV[2;4]*V[2;4] = U[1;4]
(ExV[2;4]*V[2;4] - ExV[1;4]*V[1;4])/(Q[1;4]*Carnot(Q[1;4];307;301)) = psi[1;4]
HV[2;4] = EntalpiaGas(T[2;4];y[1;2;4];y[2;2;4];y[3;2;4];y[4;2;4];y[5;2;4];y[6;2;4];y[7;2;4])
ExV[2;4] = ExergiaGas(T[2;4];p[2;4];y[1;2;4];y[2;2;4];y[3;2;4];y[4;2;4];y[5;2;4];y[6;2;4];y[7;2;4])

{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo da Torre de destilação de Etanol/Agua, TW'101A - unidade = 1}

m = 50 {nr de estágios de separação}
n = 7 {nr componentes [1]acetaldeído, [2]etanol, [3]água, [4]oxigênio, [5]nitrogênio, [6]hidrogênio e [7]CO2}

{Define os estágios de separação}
DUPLICATE j = 1;m
    DUPLICATE i = 1;n
        L[j-1;1]*x[i;j-1;1] + V[j+1;1]*y[i;j+1;1] + F[j;1]*z[i;j;1] - (L[j;1]+BL[j;1])*x[i;j;1] - V[j;1]*y[i;j;1] = 0
        y[i;j;1] - K(i;T[j;1];p[j;1];x[1;j;1];x[2;j;1];x[3;j;1])*x[i;j;1] = 0
    END
    HF[j;1] = EntalpiaLiq(TF[j;1];z[1;j;1];z[2;j;1];z[3;j;1])

```

{balanço molar por componente}  
{equilíbrio líquido-vapor}

```

ExF[j;1] = ExergiaLiq(TF[j;1];z[1;j;1];z[2;j;1];z[3;j;1])
HL[j;1] = EntalpiaLiq(T[j;1];x[1;j;1];x[2;j;1];x[3;j;1])
ExL[j;1] = ExergiaLiq(T[j;1];x[1;j;1];x[2;j;1];x[3;j;1])
HV[j;1] = EntalpiaGas(T[j;1];y[1;j;1];y[2;j;1];y[3;j;1];y[4;j;1];y[5;j;1];y[6;j;1];y[7;j;1])
ExV[j;1] = ExergiaGas(T[j;1];p[j;1];y[1;j;1];y[2;j;1];y[3;j;1];y[4;j;1];y[5;j;1];y[6;j;1];y[7;j;1])
L[j;-1;1]*HL[j;-1;1] + V[j+1;1]*HV[j+1;1] + F[j;1]*HF[j;1] - (L[j;1]+BL[j;1])*HL[j;1] - V[j;1]*HV[j;1] + Q[j;1] = 0 {balanço de energia}
L[j;-1;1]*ExL[j;-1;1] + V[j+1;1]*ExV[j+1;1] + F[j;1]*ExF[j;1] - (L[j;1]+BL[j;1])*ExL[j;1] - V[j;1]*ExV[j;1] - Q[j;1]*Carnot(Q[j;1];301;307) = U[j;1] {balanço
exergia}

SUM(x[i;j;1];ii = 1;n) - 1 = 0
SUM(y[i;j;1];ii = 1;n) - 1 = 0

END

{Definição da corrente L[0]}
L[0;1] = 0
T[0;1] = 273
HL[0;1] = EntalpiaLiq(T[0;1];x[1;0;1];x[2;0;1];x[3;0;1])
ExL[0;1] = ExergiaLiq(T[0;1];x[1;0;1];x[2;0;1];x[3;0;1])
DUPLICATE i = 1;n
  x[i;0;1] = 0,1
END

{Definição da corrente V[m+1]}
V[m+1;1] = 0
T[m+1;1] = 273
p[m+1;1] = 101,3
HV[m+1;1] = EntalpiaGas(T[m+1;1];y[1;m+1;1];y[2;m+1;1];y[3;m+1;1];y[4;m+1;1];y[5;m+1;1];y[6;m+1;1];y[7;m+1;1])
ExV[m+1;1] = ExergiaGas(T[m+1;1];p[m+1;1];y[1;m+1;1];y[2;m+1;1];y[3;m+1;1];y[4;m+1;1];y[5;m+1;1];y[6;m+1;1];y[7;m+1;1])
DUPLICATE i = 1;n
  y[i;m+1;1] = 0,1
END

{Definição da corrente F[1], alimentação do topo da coluna}
p[1;1] = p[2;3]
Q[1;1] = 0
F[1;1] = 0,00756

```

$BL[1;1] = 0$   
 $TF[1;1] = 332$   
 $z[1;1;1] = 0$   
 $z[2;1;1] = 0,86$   
 $z[3;1;1] = 0,14$   
 $z[4;1;1] = 0$   
 $z[5;1;1] = 0$   
 $z[6;1;1] = 0$   
 $z[7;1;1] = 0$

{Definição da corrente F[27], alimentação intermediária I da coluna}

$p[27;1] = (27-m)/(1-m) * (p[1;1]-p[m;1])+p[m;1]$

$Q[27;1] = 0$

$F[27;1] = 0,0136$

$BL[27;1] = 0$

$TF[27;1] = 373$

$z[1;27;1] = 0$

$z[2;27;1] = 0,353$

$z[3;27;1] = 0,647$

$z[4;27;1] = 0$

$z[5;27;1] = 0$

$z[6;27;1] = 0$

$z[7;27;1] = 0$

{Definição da corrente F[35], alimentação intermediária II da coluna}

$p[35;1] = (35-m)/(1-m) * (p[1;1]-p[m;1])+p[m;1]$

$Q[35;1] = 0$

$F[35;1] = L[2;12]$

$BL[35;1] = 0$

$TF[35;1] = T[2;12]$

DUPLICATE  $i = 1;7$

$z[i;35;1] = x[i;2;12]$

END

{Definição das correntes/condições de entrada dos outros estágios}

DUPLICATE  $j = 2;26$

```

F[j;1] = 0
TF[j;1] = 273
p[j;1] = (j-m)/(1-m)*(p[1;1]-p[m;1])+p[m;1]
BL[j;1] = 0
Q[j;1] = 0
DUPLICATE i = 1;n
    z[i;j;1] = 0,1
END
END

```

```

{Definição das correntes/condições de entrada dos outros estágios}
DUPLICATE j = 28;34
    F[j;1] = 0
    TF[j;1] = 273
    p[j;1] = (j-m)/(1-m)*(p[1;1]-p[m;1])+p[m;1]
    BL[j;1] = 0
    Q[j;1] = 0
    DUPLICATE i = 1;n
        z[i;j;1] = 0,1
    END
END

```

```

{Definição das correntes/condições de entrada dos outros estágios}
DUPLICATE j = 36;m-1
    F[j;1] = 0
    TF[j;1] = 273
    p[j;1] = (j-m)/(1-m)*(p[1;1]-p[m;1])+p[m;1]
    BL[j;1] = 0
    Q[j;1] = 0
    DUPLICATE i = 1;n
        z[i;j;1] = 0,1
    END
END

```

```

{Definição do estágio [m], referedor}
F[m;1] = 0

```

```

TF[m;1] = 273
DUPLICATE i = 1;n
  z[i;m;1] = 0,1
END
BL[m;1] = 0
Q[m;1] = 630
p[m;1] = 190

{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo do pre-aquecedor alimentação fundo TW101, H101 - unidade = 12}

L[1;12] = 0.03326      {mistura EtOH/Agua proveniente do topo TW102}
T[1;12] = 307
x[1;1;12] = 0
x[2;1;12] = 0,0258
x[3;1;12] = 0,9742
x[4;1;12] = 0
x[5;1;12] = 0
x[6;1;12] = 0
x[7;1;12] = 0
HL[1;12] = EntalpiaLiq(T[1;12];x[1;1;12];x[2;1;12];x[3;1;12])
ExL[1;12] = ExergiaLiq(T[1;12];x[1;1;12];x[2;1;12];x[3;1;12])
L[2;12] = L[1;12]
DUPLICATE i = 1;7
  x[i;1;12] = x[i;2;12]
END
HL[2;12] = EntalpiaLiq(T[2;12];x[1;2;12];x[2;2;12];x[3;2;12])
ExL[2;12] = ExergiaLiq(T[2;12];x[1;2;12];x[2;2;12];x[3;2;12])
L[1;12]*HL[1;12] + Q[1;12] - L[2;12]*HL[2;12] = 0
UA[1;12] = 7,706
Q[1;12] = UA[1;12]*(T[3;12]-T[1;12])+(T[4;12]-T[2;12])*0,5
L[3;12] = L[50;1]
L[4;12] = L[3;12]

```

{calor trocado na unidade 12}

```

DUPLICATE i = 1;7
  x[i;3;12] = x[i;50;1]
  x[i;4;12] = x[i;3;12]
END
HL[3;12] = HL[50;1]
ExL[3;12] = ExL[50;1]
T[3;12] = T[50;1]
L[3;12]*HL[3;12] - Q[1;12] - L[4;12]*HL[4;12] = 0
ExL[4;12] = ExergiaLiq(T[4;12];x[1;4;12];x[2;4;12];x[3;4;12])
HL[4;12] = EntalpiaLiq(T[4;12];x[1;4;12];x[2;4;12];x[3;4;12])

L[1;12]*ExL[1;12] - L[2;12]*ExL[2;12] + L[3;12]*ExL[3;12] - L[4;12]*ExL[4;12] = U[1;12]
(L[1;12]*ExL[1;12] - L[2;12]*ExL[2;12]) / (-L[3;12]*ExL[3;12] + L[4;12]*ExL[4;12]) = psi[1;12]

{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo do resfriador do fundo TW101, H101 - unidade = 13}

L[1;13] = L[4;12]
L[2;13] = L[1;13]
DUPLICATE i = 1;7
  x[i;1;13] = x[i;4;12]
  x[i;2;13] = x[i;1;13]
END
HL[1;13] = HL[4;12]
ExL[1;13] = ExL[4;12]
T[1;13] = T[4;12]

L[1;13]*HL[1;13] + Q[1;13] - L[2;13]*HL[2;13] = 0
HL[2;13] = EntalpiaLiq(T[2;13];x[1;2;13];x[2;2;13];x[3;2;13])
ExL[2;13] = ExergiaLiq(T[2;13];x[1;2;13];x[2;2;13];x[3;2;13])
UA[1;13] = 3,653
-Q[1;13] = UA[1;13]*((T[1;13]-T[3;13])+(T[2;13]-T[4;13]))*0,5
L[1;13]*ExL[1;13] + Q[1;13]*Carnot(Q[1;13];T[4;13];T[3;13]) - L[2;13]*ExL[2;13] = U[1;13]
T[3;13] = TCW1
  
```

{Capacidade de troca térmica da und = 13 , kW/K}

$CW[13] = 10,33$   
 $Q[1;13] = CW[13]*(T[3;13]-T[4;13])$

{Capacidade de troca térmica da corrente  $CW[13]$ , kW/K}

$\{xx\}$   
 {Calculo do pré-aquecedor alimentação EtOH topo TW101, H108 - unidade = 14}

$L[1;14] = F[1;1]$   
 $T[1;14] = 298$   
 DUPLICATE i = 1;7  
      $x[i;1;14] = z[i;1;1]$   
 END  
 $HL[1;14] = EntalpiaLiq(T[1;14];x[1;1;14];x[2;1;14];x[3;1;14])$   
 $ExL[1;14] = ExergiaLiq(T[1;14];x[1;1;14];x[2;1;14];x[3;1;14])$

$L[2;14] = L[1;14]$   
 DUPLICATE i = 1;7  
      $x[i;2;14] = x[i;1;14]$   
 END  
 $HL[2;14] = EntalpiaLiq(T[2;14];x[1;2;14];x[2;2;14];x[3;2;14])$   
 $ExL[2;14] = ExergiaLiq(T[2;14];x[1;2;14];x[2;2;14];x[3;2;14])$   
 $L[1;14]*HL[1;14] + Q[1;14] = L[2;14]*HL[2;14]$

$ExL114 = L[1;14]*ExL[1;14]$   
 $ExL214 = L[2;14]*ExL[2;14]$

$UA[1;14] = 0,4292$   
 $Q[1;14] = UA[1;14]*(T[3;14]-T[1;14])+(T[4;14]-T[2;14])*0,5$   
 $L[3;14] = F[27;1]$   
 $\{T[3;14] = 392\}$   
 $T[4;14] = TF[27;1]$   
 DUPLICATE i = 1;7  
      $x[i;3;14] = z[i;27;1]$

END  
 $HL[3;14] = EntalpiaLiq(T[3;14];x[1;3;14];x[2;3;14];x[3;3;14])$   
 $ExL[3;14] = ExergiaLiq(T[3;14];x[1;3;14];x[2;3;14];x[3;3;14])$



```

L[4;14] = L[3;14]
DUPLICATE i = 1;7
    x[i;4;14] = x[i;3;14]
END
HL[4;14] = EntalpiaLiq(T[4;14];x[1;4;14];x[2;4;14];x[3;4;14])
ExL[4;14] = ExergiaLiq(T[4;14];x[1;4;14];x[2;4;14];x[3;4;14])
Q[1;14] + L[4;14]* HL[4;14] = L[3;14]*HL[3;14]

L[1;14]*ExL[1;14] + L[3;14]*ExL[3;14] - L[2;14]*ExL[2;14] - L[4;14]* ExL[4;14] = U[1;14]
psi[1;14] = (L[2;14]*ExL[2;14] - L[1;14]*ExL[1;14])/( L[3;14]*HL[3;14] - L[4;14]* HL[4;14])

{xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx}

{Calculo do reator, R101 - unidade = 5}

V[1;5] = V[2;4]
T[1;5] = T[2;4]
HV[1;5] = HV[2;4]
ExV[1;5] = ExV[2;4]
p[1;5] = p[2;4]
DUPLICATE i = 1;7
    y[i;1;5] = y[i;2;4]
END

{Definição da corrente após o reator, V[2;5]}
p[2;5] = p[1;5]

X_EtOH = 0,5458      {conversão de etanol}
X_O2 = 0,9660        {conversão de O2}
N_AD = 0,9803        {rendimento de acetaldeído}

y[1;2;5] = (y[1;1;5] + N_AD*X_EtOH*y[2;1;5])*V[1;5]/V[2;5]
y[2;2;5] = y[2;1;5]*(1-X_EtOH)*V[1;5]/V[2;5]

```

$$\{XXXXXX\}$$

```

ExV[2;10] = ExergiaGas(T[2;10];p[2;10];y[1;2;10];y[2;2;10];y[3;2;10];y[4;2;10];y[5;2;10];y[6;2;10];y[7;2;10])
p[2;10] = p[1;10]
DUPLICATE i = 1;7
    y[i;1;10] = y[i;2;10]
END

V[1;10]*HV[1;10] + Q[1;10] - V[2;10]*HV[2;10] = 0
V[1;10]*ExV[1;10] + Q[1;10]*(1-298/428) - V[2;10]*ExV[2;10] = U[1;10] {gera vapor 550 kPa, T = 428}
psi[1;10] = -Q[1;10]*(1-298/428)/(V[1;10]*ExV[1;10]-V[2;10]*ExV[2;10])
Q[1;10] = UA[1;10]*((T[1;10]-T[3;10])+(T[2;10]-T[4;10]))*0,5
T[3;10] = 428
T[4;10] = T[3;10]

```

### A.3 Segundo bloco de equações

{Calculo da Torre de Absorção de Acetaldeído TW102A - unidade = 6}

m = 36 {nr de estágios de separação}

n = 7 {nr componentes [1]acetaldeído, [2]etanol, [3]água, [4]oxigênio, [5]nitrogênio, [6]hidrogênio e [7]CO2}

{Define os estágios de separação}

DUPLICATE j = 1;m

DUPLICATE i = 1;n

$$L[j-1;6]*x[i;j-1;6] + V[j+1;6]*y[i;j+1;6] + F[j;6]*z[i;j;6] - (L[j;6]+BL[j;6])*x[i;j;6] - V[j;6]*y[i;j;6] = 0$$

$$y[i;j;6] - K(i;T[j;6];p[j;6];x[1;j;6];x[2;j;6];x[3;j;6];y[4;j;6];y[5;j;6];y[6;j;6];y[7;j;6])*x[i;j;6] = 0$$

{balanço molar por componente}  
{equilíbrio

liquido-vapor}

END

$$HF[j;6] = EntalpiaLiq(TF[j;6];z[1;j;6];z[2;j;6];z[3;j;6];z[4;j;6];z[5;j;6];z[6;j;6];z[7;j;6])$$

$$ExF[j;6] = ExergiaLiq(TF[j;6];z[1;j;6];z[2;j;6];z[3;j;6];z[4;j;6];z[5;j;6];z[6;j;6];z[7;j;6])$$

$$HL[j;6] = EntalpiaLiq(T[j;6];x[1;j;6];x[2;j;6];x[3;j;6];x[4;j;6];x[5;j;6];x[6;j;6];x[7;j;6])$$

$$ExL[j;6] = ExergiaLiq(T[j;6];x[1;j;6];x[2;j;6];x[3;j;6];x[4;j;6];x[5;j;6];x[6;j;6];x[7;j;6])$$

$$HVL[j;6] = EntalpiaGas(T[j;6];y[1;j;6];y[2;j;6];y[3;j;6];y[4;j;6];y[5;j;6];y[6;j;6];y[7;j;6])$$

$$ExV[j;6] = ExergiaGas(T[j;6];p[j;6];y[1;j;6];y[2;j;6];y[3;j;6];y[4;j;6];y[5;j;6];y[6;j;6];y[7;j;6])$$

$$L[j-1;6]*HL[j-1;6] + V[j+1;6]*HVL[j+1;6] + F[j;6]*HF[j;6] - (L[j;6]+BL[j;6])*HL[j;6] - V[j;6]*HVL[j;6] + Q[j;6] = 0 \quad \text{{balanço de energia}}$$

$$L[j-1;6]*ExL[j-1;6] + V[j+1;6]*ExV[j+1;6] + F[j;6]*ExF[j;6] - (L[j;6]+BL[j;6])*ExL[j;6] - V[j;6]*ExV[j;6] + Q[j;6]*Carnot(Q[j;6];307;301) = U[j;6]$$

$$SUM(x[i;j;6]);ii = 1;n) - 1 = 0$$

$$SUM(y[i;j;6]);ii = 1;n) - 1 = 0$$

END

{Definição da corrente V[m+1]}

$$V[m+1;6] = 0,03617$$

$$T[m+1;6] = 443$$

$$p[m+1;6] = 150$$

$$HV[m+1;6] = EntalpiaGas(T[m+1;6];y[1;m+1;6];y[2;m+1;6];y[3;m+1;6];y[4;m+1;6];y[5;m+1;6];y[6;m+1;6];y[7;m+1;6])$$

$$ExV[m+1;6] = ExergiaGas(T[m+1;6];p[m+1;6];y[1;m+1;6];y[2;m+1;6];y[3;m+1;6];y[4;m+1;6];y[5;m+1;6];y[6;m+1;6];y[7;m+1;6])$$

$$y[1;m+1;6] = 0,1952$$

$$y[2;m+1;6] = 0,1657$$

$$y[3;m+1;6] = 0,2507$$

$y[4;m+1;6] = 0,0029$   
 $y[5;m+1;6] = 0,3252$   
 $y[6;m+1;6] = 0,0523$   
 $y[7;m+1;6] = 0,0078$

{Definição da corrente L[0]}

$L[0;6] = 0,05$   
 $T[0;6] = 310$   
 $HL[0;6] = EntalpiaLiq(T[0;6];x[1;0;6];x[2;0;6];x[3;0;6];x[4;0;6];x[5;0;6];x[6;0;6];x[7;0;6])$   
 $ExL[0;6] = ExergiaLiq(T[0;6];x[1;0;6];x[2;0;6];x[3;0;6];x[4;0;6];x[5;0;6];x[6;0;6];x[7;0;6])$   
 $x[1;0;6] = 0,000$   
 $x[2;0;6] = 0,3530$   
 $x[3;0;6] = 0,6470$   
 $x[4;0;6] = 0$   
 $x[5;0;6] = 0$   
 $x[6;0;6] = 0$   
 $x[7;0;6] = 0$

{Definição dos estagios entre 1 e m-6}

DUPLICATE j = 1; m-6

$p[j;6] = (j-1)^{30/35+120}$   
 $Q[j;6] = 1,6^{0,45} \cdot (TCW - T[j;6])$   
 $F[j;6] = 0$   
 $BL[j;6] = 0$   
 $TF[j;6] = 273$   
 $z[1;j;6] = 0,1$   
 $z[2;j;6] = 0,1$   
 $z[3;j;6] = 0,1$   
 $z[4;j;6] = 0,1$   
 $z[5;j;6] = 0,1$   
 $z[6;j;6] = 0,1$   
 $z[7;j;6] = 0,1$

END

{Definição do último estágio m}

$p[m;6] = 150$

```

Q[m;6] = 0
F[m;6] = 0
BL[m;6] = 0,2769*1,45  {pump around da TW102 através H103A} {0,1756}
TF[m;6] = 273
z[1;m;6] = 0,1
z[2;m;6] = 0,1
z[3;m;6] = 0,1
z[4;m;6] = 0,1
z[5;m;6] = 0,1
z[6;m;6] = 0,1
z[7;m;6] = 0,1

```

{Resfriador da recirculação da base TW102A - H103A, unidade = 7}

```

L[1;7] = BL[m;6]
DUPLICATE i = 1;7
  x[i;1;7] = x[i;m;6]
  x[i;2;7] = x[i;m;6]
END
HL[1;7] = HL[m;6]
T[1;7] = T[m;6]
ExL[1;7] = ExL[m;6]
L[2;7] = L[1;7]
L[1;7]*HL[1;7] + Q[1;7] - L[2;7]*HL[2;7] = 0
L[1;7]*ExL[1;7] + Q[1;7]*(1-298/303) = L[2;7]*ExL[2;7] + U[1;7]
Q[1;7] = -690
HL[2;7] = EntalpiaLiq(T[2;7];x[1;2;7];x[2;2;7];x[3;2;7];x[4;2;7];x[5;2;7];x[6;2;7];x[7;2;7])
ExL[2;7] = ExergiaLiq(T[2;7];x[1;2;7];x[2;2;7];x[3;2;7];x[4;2;7];x[5;2;7];x[6;2;7];x[7;2;7])

```

{Definição do estágio m-5 - recirculação H103A}

```

p[m-5;6] = 150
Q[m-5;6] = 0
F[m-5;6] = L[2;7]
BL[m-5;6] = 0
TF[m-5;6] = T[2;7]
z[1;m-5;6] = x[1;2;7]
z[2;m-5;6] = x[2;2;7]

```

```

z[3;m-5;6] = x[3;2;7]
z[4;m-5;6] = x[4;2;7]
z[5;m-5;6] = x[5;2;7]
z[6;m-5;6] = x[6;2;7]
z[7;m-5;6] = x[7;2;7]

```

{Definição da seção de recheio da TW102A}

DUPLICATE j = m-4;m-1

p[j;6] = (j-1)\*30/35+120

Q[j;6] = 0

F[j;6] = 0

BL[j;6] = 0

TF[j;6] = 273

z[1;j;6] = 0,1

z[2;j;6] = 0,1

z[3;j;6] = 0,1

z[4;j;6] = 0,1

z[5;j;6] = 0,1

z[6;j;6] = 0,1

z[7;j;6] = 0,1

END

{Calculo da parte superior -GW- da Torre de Absorção de Acetaldeído TW102A - unidade = 8}

p = 4 {nr de estágios de separação da seção superior}

{Define os estágios de separação}

DUPLICATE j = 1;p

DUPLICATE i = 1;n

L[j;-1;8]\*x[i;-1;8] + V[j+1;8]\*y[i;j+1;8] + F[j;8]\*z[i;j;8] + BL[j;8]\*x[i;j;8] - V[j;8]\*y[i;j;8] = 0

y[i;j;8] - K(i;T[j;8];p[j;8];x[1;j;8];x[2;j;8];x[3;j;8];y[4;j;8];y[5;j;8];y[6;j;8];y[7;j;8])\*x[i;j;8] = 0

liquido-vapor}

END

{balanço molar por componente}  
{equilíbrio

```

HF[j;8] = EntalpiaLiq(TF[j;8];z[1;j;8];z[2;j;8];z[3;j;8];z[4;j;8];z[5;j;8];z[6;j;8];z[6;j;8])
ExF[j;8] = ExergiaLiq(TF[j;8];z[1;j;8];z[2;j;8];z[3;j;8];z[4;j;8];z[5;j;8];z[6;j;8];z[6;j;8])
HL[j;8] = EntalpiaLiq(T[j;8];x[1;j;8];x[2;j;8];x[3;j;8];x[4;j;8];x[5;j;8];x[6;j;8];x[6;j;8])
ExL[j;8] = ExergiaLiq(T[j;8];x[1;j;8];x[2;j;8];x[3;j;8];x[4;j;8];x[5;j;8];x[6;j;8];x[6;j;8])
HV[j;8] = EntalpiaGas(T[j;8];y[1;j;8];y[2;j;8];y[3;j;8];y[4;j;8];y[5;j;8];y[6;j;8];y[7;j;8])
ExV[j;8] = ExergiaGas(T[j;8];p[j;8];y[1;j;8];y[2;j;8];y[3;j;8];y[4;j;8];y[5;j;8];y[6;j;8];y[7;j;8])
L[j;-1;8]*HL[j;-1;8] + V[j+1;8]*HV[j+1;8] + F[j;8]*HF[j;8] - (L[j;8]+BL[j;8])*HL[j;8] - V[j;8]*HV[j;8] + Q[j;8] = 0 {balanço de energia}
L[j;-1;8]*ExL[j;-1;8] + V[j+1;8]*ExV[j+1;8] + F[j;8]*ExF[j;8] - (L[j;8]+BL[j;8])*ExL[j;8] - V[j;8]*ExV[j;8] + Q[j;8]*(1-298/303) = U[j;8]
SUM(x[i;j;8];ii = 1;n) - 1 = 0
SUM(y[i;j;8];ii = 1;n) - 1 = 0
END

```

{Alimentação de vapor na seção}

```

V[p+1;8] = V[1;6]
T[p+1;8] = T[1;6]
p[p+1;8] = 120
HV[p+1;8] = EntalpiaGas(T[p+1;8];y[1;p+1;8];y[2;p+1;8];y[3;p+1;8];y[4;p+1;8];y[5;p+1;8];y[6;p+1;8];y[7;p+1;8])
ExV[p+1;8] = ExergiaGas(T[p+1;8];p[p+1;8];y[1;p+1;8];y[2;p+1;8];y[3;p+1;8];y[4;p+1;8];y[5;p+1;8];y[6;p+1;8];y[7;p+1;8])
y[1;p+1;8] = y[1;1;6]
y[2;p+1;8] = y[2;1;6]
y[3;p+1;8] = y[3;1;6]
y[4;p+1;8] = y[4;1;6]
y[5;p+1;8] = y[5;1;6]
y[6;p+1;8] = y[6;1;6]
y[7;p+1;8] = y[7;1;6]

```

{Entrada água gelada topo da seção}

```

L[0;8] = 0,03241*1
T[0;8] = 288
HL[0;8] = EntalpiaLiq(T[0;8];x[1;0;8];x[2;0;8];x[3;0;8];x[4;0;8];x[5;0;8];x[6;0;8];x[7;0;8])
ExL[0;8] = ExergiaLiq(T[0;8];x[1;0;8];x[2;0;8];x[3;0;8];x[4;0;8];x[5;0;8];x[6;0;8];x[7;0;8])
x[1;0;8] = 0
x[2;0;8] = 0
x[3;0;8] = 1

```



```

x[4;0;8] = 0
x[5;0;8] = 0
x[6;0;8] = 0
x[7;0;8] = 0

```

```
{Definição dos estagios da seção superior}
```

```

DUPLICATE j = 1;p
  p[j;8] = (j-1)*5/3+115
  Q[j;8] = 0
  F[j;8] = 0
  BL[j;8] = 0
  TF[j;8] = 273
  z[1;j;8] = 0,1
  z[2;j;8] = 0,1
  z[3;j;8] = 0,1
  z[4;j;8] = 0,1
  z[5;j;8] = 0,1
  z[6;j;8] = 0,1
  z[7;j;8] = 0,1

```

```
END
```

```
{Resfriador da alimentação de topo da torre absorção, k = 16}
```

```
L[2;16] = L[0;6]
```

```
L[1;16] = L[2;16]
```

```
DUPLICATE i = 1;7
```

```
  x[i;2;16] = x[i;0;6]
```

```
  x[i;1;16] = x[i;2;16]
```

```
END
```

```
HL[2;16] = HL[0;6]
```

```
HL[1;16] = EntalpiaLiq(T[1;16];x[1;1;16];x[2;1;16];x[3;1;16];x[4;1;16];x[5;1;16];x[6;1;16];x[7;1;16])
```

```
ExL[2;16] = ExL[0;6]
```

```
ExL[1;16] = ExergiaLiq(T[1;16];x[1;1;16];x[2;1;16];x[3;1;16];x[4;1;16];x[5;1;16];x[6;1;16];x[7;1;16])
```

```
T[2;16] = T[0;6]
```

```
L[1;16]*HL[1;16] + Q[1;16] - L[2;16]*HL[2;16] = 0
```

```
{Q[1;16] = -20}
```

```

T[1;15] = 393
L[1;16]*ExL[1;16] + Q[1;16]*Carnot(Q[1;16];307;301) - L[2;16]*ExL[2;16] = U[1;16]

{Resfriador de água DW alimentação topo torre lavagem, k = 17}
L[1;17] = L[0;8]
L[2;17] = L[1;17]
DUPLICATE i = 1;7
    x[i;1;17] = x[i;0;8]
    x[i;2;17] = x[i;0;8]
END
HL[2;17] = HL[0;8]
ExL[2;17] = ExL[0;8]
T[1;17] = 298
HL[1;17] = EntalpiaLiq(T[1;17];x[1;1;17];x[2;1;17];x[3;1;17];x[4;1;17];x[5;1;17];x[6;1;17];x[7;1;17])
ExL[1;17] = ExergiaLiq(T[1;17];x[1;1;17];x[2;1;17];x[3;1;17];x[4;1;17];x[5;1;17];x[6;1;17];x[7;1;17])
T[2;17] = T[0;8]
L[1;17]*HL[1;17] + Q[1;17] - L[2;17]*HL[2;17] = 0
L[1;17]*ExL[1;17] + Q[1;17]*Carnot(Q[1;17];289;281) - L[2;17]*ExL[2;17] = U[1;17]

```

{Pré-aquecedor da alimentação destilação acetal, k = 15}

```

{lado quente}
L[2;15] = L[0;6]
L[1;15] = L[0;6]
DUPLICATE i = 1;7
    x[i;2;15] = x[i;0;6]
    x[i;1;15] = x[i;0;6]
END
HL[2;15] = HL[1;16]
ExL[2;15] = ExL[1;16]
T[2;15] = T[1;16]
{Q[1;15] = -200}

L[1;15]*HL[1;15] + Q[1;15] - L[2;15]*HL[2;15] = 0

```

```

HL[1;15] = EntalpiaLiq(T[1;15];x[1;1;15];x[2;1;15];x[3;1;15];x[4;1;15];x[5;1;15];x[6;1;15];x[7;1;15])
ExL[1;15] = ExergiaLiq(T[1;15];x[1;1;15];x[2;1;15];x[3;1;15];x[4;1;15];x[5;1;15];x[6;1;15];x[7;1;15])

{lado frio}
L[3;15] = L[m;6]
L[4;15] = L[3;15]
DUPLICATE i = 1;7
    x[i;3;15] = x[i;m;6]
    x[i;4;15] = x[i;m;6]
END
HL[3;15] = HL[m;6]
ExL[3;15] = ExL[m;6]
T[3;15] = T[m;6]
L[3;15]*(HL[4;15] - HL[3;15]) = L[1;15]*(HL[1;15] - HL[2;15])
HL[4;15] = EntalpiaLiq(T[4;15];x[1;4;15];x[2;4;15];x[3;4;15];x[4;4;15];x[5;4;15];x[6;4;15];x[7;4;15])
ExL[4;15] = ExergiaLiq(T[4;15];x[1;4;15];x[2;4;15];x[3;4;15];x[4;4;15];x[5;4;15];x[6;4;15];x[7;4;15])
T[4;15] = 353

- L[3;15]*(ExL[4;15] - ExL[3;15]) + L[1;15]*(ExL[1;15] - ExL[2;15]) = U[1;15]

```

### A.3 Segundo bloco de equações

```
{Calculo da Torre de destilação de Acetal/Etanol/Agua, TW103A - unidade = 9}

m = 40 {nr de estágios de separação}
n = 7 {nr componentes [1]acetaldeído, [2]etanol, [3]água, [4]oxigênio, [5]nitrogênio, [6]hidrogênio e [7]CO2}

{Define os estágios de separação}
DUPLICATE j = 1;n
    DUPLICATE i = 1;n
        L[j-1;9]*x[i;j-1;9] + V[j+1;9]*y[i;j+1;9] + F[j;9]*z[i;j;9] - (L[j;9]+BL[j;9])*x[i;j;9] - V[j;9]*y[i;j;9] = 0
        y[i;j;9] - K(i;T[j;9];p[j;9];x[1;j;9];x[2;j;9];x[3;j;9])*x[i;j;9] = 0
        {balanço molar por componente}
        {equilíbrio liquido-vapor}
    END
    H[F[j;9]] = EntalpiaLiq(T[F[j;9]];z[1;j;9];z[2;j;9];z[3;j;9])
    Ex[F[j;9]] = ExergiaLiq(T[F[j;9]];z[1;j;9];z[2;j;9];z[3;j;9])
    HL[j;9] = EntalpiaLiq(T[j;9];x[1;j;9];x[2;j;9];x[3;j;9])
    ExL[j;9] = ExergiaLiq(T[j;9];x[1;j;9];x[2;j;9];x[3;j;9])
    HV[j;9] = EntalpiaGas(T[j;9];y[1;j;9];y[2;j;9];y[3;j;9];y[4;j;9];y[5;j;9];y[6;j;9];y[7;j;9])
    ExV[j;9] = ExergiaGas(T[j;9];p[j;9];y[1;j;9];y[2;j;9];y[3;j;9];y[4;j;9];y[5;j;9];y[6;j;9];y[7;j;9])
    L[j-1;9]*HL[j-1;9] + V[j+1;9]*HV[j+1;9] + F[j;9]*HF[j;9] - (L[j;9]+BL[j;9])*HL[j;9] - V[j;9]*HV[j;9] + Q[j;9] = 0 {balanço de energia}
    L[j-1;9]*ExL[j-1;9] + V[j+1;9]*ExV[j+1;9] + F[j;9]*ExF[j;9] - (L[j;9]+BL[j;9])*ExL[j;9] - V[j;9]*ExV[j;9] + Q[j;9]*Carnot(Q[j;9];307;301) = U[j;9]
    SUM(x[i;j;9];ii = 1;n) - 1 = 0
    SUM(y[i;j;9];ii = 1;n) - 1 = 0
END

{Definição da corrente L[0]}
L[0;9] = 0
T[0;9] = 273
HL[0;9] = EntalpiaLiq(T[0;9];x[1;0;9];x[2;0;9];x[3;0;9])
ExL[0;9] = ExergiaLiq(T[0;9];x[1;0;9];x[2;0;9];x[3;0;9])
x[1;0;9] = 0,1
x[2;0;9] = 0,1
x[3;0;9] = 0,1
```

$x[4;0;9] = 0,1$   
 $x[5;0;9] = 0,1$   
 $x[6;0;9] = 0,1$   
 $x[7;0;9] = 0,1$

{Definição da corrente  $V[m+1]$ }

$V[m+1;9] = 0$   
 $T[m+1;9] = 273$   
 $p[m+1;9] = 101$   
 $HV[m+1;9] = \text{EntalpiaGas}(T[m+1;9];y[1;m+1;9];y[2;m+1;9];y[3;m+1;9];y[4;m+1;9];y[5;m+1;9];y[6;m+1;9];y[7;m+1;9])$   
 $ExV[m+1;9] = \text{ExergiaGas}(T[m+1;9];p[m+1;9];y[1;m+1;9];y[2;m+1;9];y[3;m+1;9];y[4;m+1;9];y[5;m+1;9];y[6;m+1;9];y[7;m+1;9])$   
 $y[1;m+1;9] = 0,1$   
 $y[2;m+1;9] = 0,1$   
 $y[3;m+1;9] = 0,1$   
 $y[4;m+1;9] = 0,1$   
 $y[5;m+1;9] = 0,1$   
 $y[6;m+1;9] = 0,1$   
 $y[7;m+1;9] = 0,1$

{Definição da alimentação, estagio 15}

$kk = 15$   
 $p[kk;9] = (p[m;9]-p[1;9])/40*kk+320$   
 $Q[kk;9] = 0$   
 $F[kk;9] = 0,0700$   
 $BL[kk;9] = 0$   
 $TF[kk;9] = 353$   
 $z[1;kk;9] = 0,0999$   
 $z[2;kk;9] = 0,3177$   
 $z[3;kk;9] = 0,5824$   
 $z[4;kk;9] = 0$   
 $z[5;kk;9] = 0$   
 $z[6;kk;9] = 0$   
 $z[7;kk;9] = 0$

{Definição do estagio 1, condensador}

$p[1;9] = 320$   
 $V[1;9] = 0,00002$   
 $F[1;9] = 0$   
 $\{BL[1;9] = 0,0063\}$   
 $L[1;9]/BL[1;9] = 3,8$   
 $TF[1;9] = 273$   
 $z[1;1;9] = 0,1$   
 $z[2;1;9] = 0,1$   
 $z[3;1;9] = 0,1$   
 $z[4;1;9] = 0,1$   
 $z[5;1;9] = 0,1$   
 $z[6;1;9] = 0,1$   
 $z[7;1;9] = 0,1$

{Definição do estagio m, refervedor}

$p[m;9] = 350$   
 $Q[m;9] = 1052$   
 $F[m;9] = 0$   
 $BL[m;9] = 0$   
 $TF[m;9] = 273$   
 $z[1;m;9] = 0,1$   
 $z[2;m;9] = 0,1$   
 $z[3;m;9] = 0,1$   
 $z[4;m;9] = 0,1$   
 $z[5;m;9] = 0,1$   
 $z[6;m;9] = 0,1$   
 $z[7;m;9] = 0,1$

{Definição dos estágios 2 a 14}

DUPLICATE j = 2;kk-1  
 $p[j;9] = (p[m;9]-p[1;9])/40*j+p[1;9]$   
 $Q[j;9] = 0$   
 $F[j;9] = 0$   
 $BL[j;9] = 0$   
 $TF[j;9] = 273$   
 $z[1;j;9] = 0,1$

```

z[2;,9] = 0,1
z[3;,9] = 0,1
z[4;,9] = 0,1
z[5;,9] = 0,1
z[6;,9] = 0,1
z[7;,9] = 0,1

```

END

```

{Definição dos estágios 16 a m-1}
DUPLICATE j = kk+1;m-1
  p[j;9] = (p[m;9]-p[1;9])/40*j+p[1;9]
  Q[j;9] = 0
  F[j;9] = 0
  BL[j;9] = 0
  TF[j;9] = 273
  z[1;,9] = 0,1
  z[2;,9] = 0,1
  z[3;,9] = 0,1
  z[4;,9] = 0,1
  z[5;,9] = 0,1
  z[6;,9] = 0,1
  z[7;,9] = 0,1

```

END