



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

MITSUO WATANABE NETO

**SIMULAÇÃO DE UMA ABSORVEDORA COM RECHEIO NA
RECUPERAÇÃO DA PROPANONA DO AR**

**SALVADOR
2025**

MITSUO WATANABE NETO

**SIMULAÇÃO DE UMA ABSORVEDORA COM RECHEIO NA
RECUPERAÇÃO DA PROPANONA DO AR**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, da Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Mário Nelson de Góis.

**SALVADOR
2025**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Bernadete
Sinay Neves, Escola Politécnica - UFBA.

W324 Watanabe Neto, Mitsuo.

Simulação de uma absorvedora com recheio na recuperação da
propanona do ar/ Mitsuo Watanabe Neto. – Salvador, 2025.

104 f.: il. color.

Orientador: Prof. Dr. Luiz Mário Nelson de Góis.

Dissertação (mestrado) – Programa de Pós-Graduação em
Engenharia Química - Universidade Federal da Bahia - Escola
Politécnica, 2025.

1. Absorção. 2. Acetona. 3. Água. 4. Aspen-Plus I. Góis, Luiz Mário
Nelson de. II. Universidade Federal da Bahia. III. Título.

CDD: 660.02




UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA




A Comissão examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação **“SIMULAÇÃO DE UMA ABSORVEDORA COM RECHEIO NA RECUPERAÇÃO DA PROPANONA DO AR.”** de **MITSUO WATANABE NETO**, como requisito parcial para obtenção do Grau de MESTRE em Engenharia Química.

Salvador, 14 de fevereiro de 2025.


Comissão Examinadora:

Documento assinado digitalmente
 **LUIZ MARIO NELSON DE GOIS**
Data: 19/02/2025 19:11:49-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>


Prof. Dr. Luiz Mário Nelson de Góis
Orientador - UFBA

Documento assinado digitalmente
 **GEORGE SIMONELLI**
Data: 19/02/2025 11:55:45-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof Dr. George Simonelli
Examinador Interno - UFBA

Documento assinado digitalmente
 **GABRIELA FONTES DEIRO FERREIRA**
Data: 18/02/2025 13:22:18-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Profa. Dra. Gabriela Fontes Deiró Ferreira
Examinadora Externa – SENAI-CIMATEC

Documento assinado digitalmente
 **JOSE JAILTON MARQUES**
Data: 17/02/2025 10:40:41-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. José Jaílton Marques
Examinador Externo - UFS

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, expresso minha gratidão a Deus pelas bênçãos recebidas, especialmente pela família que me apoia incondicionalmente, pelo direcionamento em minha jornada e pela convicção de que, com esforço e fé, tudo se concretiza.

Agradeço aos meus pais, Márcio e Karla, e à minha irmã Kárita, por todo o amor, proteção e por serem exemplos de disciplina e coragem, que me ajudaram a crescer como ser humano.

Ao professor Luiz Mário Nelson de Góis, pela grande oportunidade proporcionada ao me inserir no seu grupo de pesquisa e, sempre com muito entusiasmo, me orientando e incentivando a crescer como pesquisador.

À colega do grupo de pesquisa, Isabel Barbosa e Barbosa, pela contribuição dos dados experimentais que contribuíram muito para o desenvolvimento do meu trabalho.

Aos amigos e colegas do Mestrado, pelo companheirismo e incentivo que me deram.

Aos professores do PPEQ por todos os ensinamentos e recomendações, especialmente aos professores George Simonelli, Luiz Antônio Magalhães Pontes e à professora Silvana Mattedi e Silva.

À Fundação de Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo auxílio financeiro que possibilitou a realização deste trabalho.

Agradeço também às minhas amigas, Katharina e Rebecca, por tornarem o meu cotidiano mais feliz e por sempre me apoiarem em qualquer circunstância.

RESUMO

O processo de separação de determinados componentes representa uma das operações mais importantes na indústria química. As colunas de absorção são utilizadas em diversas operações unitárias na separação de compostos visando sua especificação e comercialização, desempenhando assim um papel fundamental na purificação e concentração de substâncias químicas. A problemática relacionada a este equipamento está associada à manipulação de forma errônea e à não familiarização com a modelagem computacional, principalmente do ponto de vista industrial, o que acarreta altos custos operacionais, energéticos e de matérias-primas, além de afetar a qualidade dos produtos, emitir poluentes para a atmosfera e comprometer a segurança operacional da planta. Assim, o presente estudo tem enfoque em uma coluna de absorção gasosa de 1 m de altura e 0,07 m de diâmetro, com recheio do tipo anéis de Raschig de vidro, onde se utilizou a água como solvente para remoção do composto orgânico volátil (acetona ou propanona) presente no ar. Posto isso, para alcançar separações mais econômicas e eficientes, o intuito desse trabalho foi o de simular esta coluna em especial, utilizando como ferramenta o *software* Aspen Plus[®], avaliando não só a influência de variáveis operacionais nos fenômenos de transporte como também no comportamento hidrodinâmico. A simulação foi validada com os dados experimentais obtidos em laboratório por Barbosa e Góis (2024), para a queda de pressão, a fração de acetona absorvida e o coeficiente volumétrico de transferência de massa ($K_{L,a}$). Em conclusão, a partir dos resultados simulados obtidos pelo estudo hidrodinâmico juntamente com a transferência de massa, foi possível validar os dados empíricos já obtidos na coluna, referentes à queda de pressão, para o sistema ar-acetona-água com anéis de Raschig, utilizando a modelagem de Sherwood-Leva-Eckert (SLE), que apresentou um desvio médio de 20%. Adicionalmente, validou-se o coeficiente volumétrico de transferência de massa ($K_{L,a}$) para a vazão de gás de 0,85 g/min, com base na modelagem *rate-based* de Bravo-Fair. Para os demais fenômenos, o modelo *rate-based* de Bravo-Fair mostrou-se o mais adequado para o estudo, evidenciando que o aumento da vazão de gás está associado a uma maior queda de pressão, a uma elevação na probabilidade de inundação, a um acréscimo na fração de acetona absorvida, na área interfacial de transferência de massa e a um melhor ajuste do modelo em relação ao $K_{L,a}$ experimental. Assim, o estudo deu confiabilidade em analisar os fenômenos, além de propor melhorias e fundamentar tópicos que ainda não foram estudados experimentalmente na coluna, facilitando assim estudos futuros.

Palavras-Chave: Absorção; Acetona; Água; Aspen-Plus.

ABSTRACT

The process of separating certain components is one of the most important operations in the chemical industry. Absorption columns are used in various unit operations to separate compounds to specify and market them, thus playing a fundamental role in the purification and concentration of chemical substances. The problem related to this equipment is associated with erroneous handling and unfamiliarity with computer modeling, especially from an industrial point of view, which leads to high operating, energy, and raw material costs, as well as affecting product quality, emitting pollutants into the atmosphere, and compromising the plant's operational safety. Therefore, this study focuses on a gas absorption column 1 m high and 0.07 m in diameter, with a glass Raschig ring filling, where water was used as a solvent to remove the volatile organic compound (acetone or propanone) present in the air. That said, to achieve more economical and efficient separations, this work aimed to simulate this column in particular, using the Aspen Plus[®] software as a tool, evaluating not only the influence of operational variables on transport phenomena but also on hydrodynamic behavior. The simulation was validated with experimental data obtained in the laboratory by Barbosa and Góis (2024), for the pressure drop, the fraction of acetone absorbed, and the volumetric mass transfer coefficient ($K_{L,a}$). In conclusion, from the simulated results obtained by the hydrodynamic study together with the mass transfer, it was possible to validate the empirical data already collected in the column, regarding the pressure drop, for the air-acetone-water system with Raschig rings, using the Sherwood-Leva-Eckert (SLE) modeling, which showed an average deviation of 20%. In addition, the volumetric mass transfer coefficient ($K_{L,a}$) was validated for a gas flow rate of 0.85 g/min, based on Bravo-Fair rate-based modeling. For the other phenomena, the Bravo-Fair rate-based model proved to be the most suitable for the study, showing that an increase in gas flow is associated with a greater pressure drop, an increase in the probability of flooding, an increase in the fraction of acetone absorbed, in the interfacial mass transfer area and a better fit of the model about the experimental $K_{L,a}$. Thus, the study provided reliability in analyzing the phenomena, as well as proposing improvements and substantiating topics that have not yet been studied experimentally in the column, thus facilitating future studies.

Keywords: Absorption; Acetone; Water; Aspen-Plus.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
1.1	Objetivo Geral	18
1.2	Objetivos Específicos	18
2	REVISÃO DA LITERATURA	20
2.1	Absorção em colunas com recheios	20
2.2	Princípios teóricos do transporte gás-líquido	27
2.3	Aspectos hidrodinâmicos na coluna	34
2.4	Eficiência da separação	40
2.5	Modelagem e simulação computacional	42
3	MATERIAIS E MÉTODOS.....	46
3.1	Coluna de absorção	46
3.2	Simulador Aspen Plus®	48
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	56
4.1	Regressão de dados termodinâmicos.....	56
4.2	Queda de pressão (ΔP)	59
4.3	<i>Holdup</i> da fase líquida.....	61
4.4	Ponto de inundação	63
4.5	Fração mássica de propanona absorvida na água	65
4.6	Área interfacial para transferência de massa	72
4.7	Coefficiente volumétrico de transferência de massa ($K_L \cdot a$)	75
4.8	HETP - altura equivalente a um prato teórico	78
4.9	HETP para diferentes recheios simulados	82
5	CONCLUSÕES	87
	REFERÊNCIAS.....	89
	Anexo A: Principais equacionamentos e correlações	97
	Anexo B: Resultados do trabalho de Barbosa e Góis (2024)	102

INDICE DE FIGURAS

Figura 1 - Coluna de absorção gasosa e suas respectivas correntes. Fonte: Adaptado de SHIBATA (2017, p.36).	21
Figura 2 - Funcionamento de uma coluna com pratos. Fonte: Adaptado de Chuang e Nandakumar (2000, p.1137).	22
Figura 3 - Torre empacotada com leito superior de recheio estruturado e um leito inferior de recheio aleatório. Fonte: Adaptado de “Packed Column Flood And Pressure Drop”, 2023.	23
Figura 4 - Performance de diferentes recheios a partir da área interfacial e do fator de empacotamento. Fonte: Adaptado de Kister (1992).	24
Figura 5 - Ilustração dos recheios randômicos dos anéis de Raschig e Pall. Fonte: Adaptado de Echenique (2021, p.7).	25
Figura 6 - Selas de Berl e Intalox. Fonte: Adaptado de Bazooyar et al. (2023, p.4).	25
Figura 7 - Teoria dos dois filmes. Fonte: Santos e Albuquerque (2016, p.10).	28
Figura 8 - Determinação do NETS para absorção contracorrente do sistema acetona-água. Fonte: Adaptado de Geankoplis, Hersel e Lepek (2018, p.947).	34
Figura 9 - Análise experimental de uma extratora operando normalmente e com inundação. Fonte: Adaptado de Soboll, Hagemann e Kockmann (2017).	36
Figura 10 - Zona de carregamento e inundação diante da queda de pressão para colunas empacotadas. Fonte: Adaptado de Albright et al. (2008, p.1035).	36
Figura 11 - Perfil de eficiência da HETP para colunas empacotadas. Fonte: Adaptado de Albright et al. (2008, p.1034).	41
Figura 12 - Visão simplificada do processo de verificação e validação do modelo. Fonte: Adaptado de Schlesinger (1979).	43
Figura 13 - Coluna absorvedora com anéis de Raschig.	46
Figura 14 - Banco de dados experimentais para o VLE do sistema acetona-água no Aspen Plus®.	49
Figura 15 - Configurações exigidas pelo equipamento absorvedor.	49
Figura 16 - Configurações do recheio da absorvedora.	50
Figura 17 - Configuração da modelagem rate-based.	51
Figura 18 - Materiais dos recheios randômicos disponíveis no simulador Aspen Plus®. Fonte: Aspen plus input language guide (2004).	53
Figura 19 - Dimensões dos recheios randômicos disponíveis no simulador Aspen Plus®. Fonte: Aspen Plus Input Language Guide (2004).	53
Figura 20 - Modelo NRTL antes da regressão dos parâmetros binários.	57
Figura 21 - Modelo NRTL após a regressão dos parâmetros binários.	58
Figura 22 - Queda de pressão entre os modelos simulados e o experimental.	60
Figura 23 - Erro relativo da queda de pressão experimental com os modelos simulados.	60
Figura 24 - Modelos para holdup da fase líquida.	62
Figura 25 - Ponto de inundação em relação ao limite operacional para as três configurações.	65
Figura 26 - Fração mássica significativa de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem de equilíbrio da configuração de vazão 1.	66
Figura 27 - Fração mássica contínua de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem rate-based de Onda (1968) da configuração de vazão 1.	67
Figura 28 - Fração mássica contínua de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem rate-based de Bravo-Fair (1982) da configuração de vazão 1.	67
Figura 29 - Fração mássica contínua de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem rate-based de Billet (1993) da configuração de vazão 1.	68
Figura 30 - Frações mássicas de acetona para configuração 1 (0,38 g/min de acetona).	69
Figura 31 - Frações mássicas de acetona para configuração 2 (0,62 g/min de acetona).	70
Figura 32 - Frações mássicas de acetona para configuração 3 (0,85 g/min de acetona).	71
Figura 33 - Área interfacial para a configuração 1 (0,38 g/min de acetona).	73
Figura 34 - Área interfacial para a configuração 2 (0,62 g/min de acetona).	73

Figura 35 - Área interfacial para a configuração 3 (0,85 g/min de acetona).	74
Figura 36 - Coeficiente volumétrico de transferência de massa para a configuração 1 (0,38 g/min de acetona).	75
Figura 37 - Coeficiente volumétrico de transferência de massa para a configuração 2 (0,62 g/min de acetona).	76
Figura 38 - Coeficiente volumétrico de transferência de massa para a configuração 3 (0,85 g/min de acetona).	77
Figura 39 - HETP para configuração 1 (0,38 g/min de acetona).	79
Figura 40 - HETP para configuração 2 (0,62 g/min de acetona).	80
Figura 41 - HETP para configuração 3 (0,85 g/min de acetona).	81
Figura 42 - HETP dos diferentes recheios selecionados para o modelo de Onda.	82
Figura 43 - HETP dos diferentes recheios selecionados para o modelo de Bravo-Fair.	83
Figura 44 - HETP dos diferentes recheios selecionados para o modelo de Billet.	84

INDICE DE TABELAS

Tabela 1 - Dados de equilíbrio para o sistema acetona-água em 293 K. Fonte: Adaptado de Sherwood (1937) apud Geankoplis, Hersel e Lepek (2018).....	32
Tabela 2 - Características e dimensões da coluna de absorção.	47
Tabela 3 – Dados-base e coletados na coluna absorvedora em escala laboratorial. Fonte: Barbosa e Góis (2024).....	48
Tabela 4 - Modelos rate-based adotados nas simulações da absorção da propanona por água.	52
Tabela 5 - Recheios selecionados para o estudo comparativo com o anel de Raschig. Fonte: Adaptado de Aspen Plus Input Language Guide (2004).....	54
Tabela 6 - Dados base de vazões da absorvedora laboratorial. Fonte: Barbosa e Góis (2024).....	59
Tabela 7 - Dados de Holdup adimensionais da fase líquida para as correlações adotadas.	62
Tabela 8 - Dados do ponto de carga e de inundação da coluna absorvedora.	64
Tabela 9 - HETP de referência.....	79

NOMENCLATURA**ARÁBICO**

a	área específica de transferência
acet	acetona
a_e	área superficial efetiva por unidade de volume da coluna
a_i	área interfacial total para transferência de massa
a_p	área específica do recheio
a_t	área da seção transversal da coluna
a_w	área superficial molhada por unidade de volume da coluna
BVLE025	banco de dados do equilíbrio vapor-líquido
Ca_L	número capilar
CFD	fluidodinâmica computacional
C_L	parâmetro do coeficiente de transferência de massa do líquido
C_V	parâmetro do coeficiente de transferência de massa do vapor
$D_{i,k}^L$	difusividade líquido
d_p	diâmetro nominal do recheio
$D_{i,k}^V$	difusividade do vapor
EQ	modelagem de equilíbrio
EQ. Estágio 2	modelo de equilíbrio para a coluna com 2 estágios teóricos
EQ. Estágio 3	modelo de equilíbrio para a coluna com 3 estágios teóricos
EQ. Estágio 4	modelo de equilíbrio para a coluna com 4 estágios teóricos
Fr_L	número de Froude do líquido
g	constante gravitacional
G, V	vazão da fase gasosa
H	constante de Henry
$HETP$	altura equivalente a um prato teórico
h_L	<i>holdup</i> adimensional total da fase líquida
h_p, H	altura da seção do recheio
$HPWS$	absorção com água à altas pressões
HTU	<i>height of a transfer unit</i>
h_t	<i>holdup</i> fracionário
$k_{i,k}^L$	coeficiente binário de transferência de massa da fase líquida
$k_{i,k}^V$	coeficiente binário de transferência de massa da fase vapor
K_L	coeficiente de transferência de massa (difusão) da fase líquida

$K_{L,a}$	coeficiente volumétrico de transferência de massa
L	vazão da fase líquida
L/V	razão entre a vazão de líquido e de gás total
NETS	número de estágios teóricos da coluna
NIST	national institute of standards and technology
NRTL	<i>non-random two liquids</i>
P_i	pressão parcial da acetona no gás
RB	modelagem <i>rate-based</i>
Re_L	número de Reynolds do líquido
Re'_L	número de Reynolds para fase líquida baseada na área superficial molhada
Re_V	número de Reynolds do vapor
$Sc_{L,i,k}$	número de Schmidt líquido
$Sc_{V,i,k}$	número de Schmidt do vapor
SLE	sherwood-leva-eckert
UFBA	universidade federal da Bahia
u_s^L, u_L, U_L	velocidade superficial líquido
u_s^V	velocidade superficial do vapor
$U_{G,Lo}$	velocidade do gás no ponto de carga
$U_{G,Fl}$	velocidade do gás no ponto de inundação
V_{acet}	vazão gasosa de acetona alimentada
V_{H_2O}	vazão líquida de água alimentada
VLE	equilíbrio líquido-vapor
VOC	composto orgânico volátil
We_L	número de Weber líquido
x_i	fração molar da acetona no líquido,
y_i	fração molar da acetona no gás

GREGOS

ρ_t^L, ρ_L	densidade do líquido
ρ_t^V	densidade do vapor
$\bar{\rho}^L$	densidade molar do líquido
$\bar{\rho}^V$	densidade molar do vapor
μ^L, μ_L	viscosidade do líquido
μ^V	viscosidade do vapor
σ	tensão superficial do líquido

σ_c	tensão superficial crítico do recheio
ε	fração de vazios do recheio
ΔP	queda de pressão
δy	espessura do filme da fase gasosa
δx	espessura do filme da fase líquida
Ψ	coeficiente de resistência

CAPÍTULO 1

Introdução

1 INTRODUÇÃO

O aprimoramento das técnicas industriais e o estímulo ao consumismo globalizado pós-Revolução Industrial resultaram em um enfoque econômico (lucro), acarretando desafios significativos de natureza ambiental, ou seja, em recursos utilizados de maneira pouco sustentável. Então, a sociedade científica vem direcionando sua atenção para isto devido, principalmente, à intensificação da atividade humana e do incremento térmico ambiental percebido com o passar dos anos (Pinheiro; Cavalcanti; Barros, 2018).

Como abordado por Sirvinskas (2020), a questão da poluição é um desafio global que impacta em várias áreas da sociedade. Ela ocorre quando substâncias nocivas são liberadas, de maneira geral, no ar, na água ou no solo devido a atividades, como o descarte inadequado de resíduos, efluentes da produção industrial e queima de combustíveis fósseis. Estas ações insustentáveis afetam não só o ambiente como a saúde humana, destacando a necessidade de desenvolver e implementar tecnologias capazes de reduzir esses impactos, como é o caso da utilização das torres de absorção na purificação das correntes gasosas.

As colunas absorvedoras industriais desempenham um papel fundamental no âmbito ambiental, atuando como fator crucial nos sistemas de controle de poluição atmosférica das indústrias. Elas ajudam a capturar e remover poluentes gasosos através da utilização de absorventes, antes que sejam liberados na atmosfera, contribuindo para a qualidade do ar. Além disso, essas tecnologias auxiliam as empresas a cumprirem regulamentações ambientais, desempenhando assim um papel significativo na preservação do meio ambiente e na saúde humana (Patuzzo; Frare, 2019).

A utilização das absorvedoras no setor industrial, com enfoque ambiental, torna-se cada vez mais indispensável, devido ao grande volume de compostos orgânicos e inorgânicos produzidos, ou seja, efluentes que são lançados continuamente no meio ambiente. Com a valorização da temática de sustentabilidade (economia verde), para diminuir os impactos causados, as indústrias tendem a otimizar o projeto das colunas absorvedoras, para assim incentivar a consciência ambiental e promover o tratamento dos efluentes de maneira mais eficaz e com menor custo (Algrim et al., 2020).

Ainda nesse cenário, há também a necessidade do tratamento de produtos com o intuito de remover ou diminuir a concentração de contaminantes presentes, principalmente compostos de enxofre (SO_x) ou dióxido de carbono. A exemplo disso, existe o caso da remoção do CO₂ na produção do biogás pela digestão anaeróbica de materiais orgânicos. O biogás é composto em sua maioria por CH₄ e CO₂, além de conter menores quantidades de sulfeto de hidrogênio, oxigênio e nitrogênio (Chew et al., 2021).

Grande parte dos contaminantes liberados nos processos industriais pode ser classificada como

compostos orgânicos voláteis (*volatile organic compounds*-VOC), o que implica na problemática não só relacionada aos impactos ambientais, mas também nos efeitos na saúde humana, pelo fato de alguns deles serem tóxicos e carcinogênicos. Geralmente, estes compostos são produzidos pela combustão dos veículos, pelas indústrias químicas (solventes) e pelas energéticas. Além disso, eles possuem alta volatilidade, o que implica que, à pressão e temperatura ambiente, estejam facilmente presentes no ar (aerossolizado).

A exposição a altas concentrações dos VOCs em um tempo prolongado representa um risco à saúde e ao bem-estar (Chen et al., 2021). Os efeitos dessa substância dependem da substância, do nível e da duração da exposição, podendo ser responsáveis pelo câncer, problemas neurológicos, intoxicação aguda, problemas respiratórios devido ao formaldeído e ao benzeno, entre outros (Zhang et al., 2021).

A acetona, conhecida quimicamente como propanona, é um composto orgânico versátil, empregado na fabricação de polímeros, de produtos farmacêuticos, em formulações de tintas e vernizes. Vale ressaltar que algumas rotas biotecnológicas para produção de biocombustíveis geram subprodutos que contêm acetona (Ahmadpour; Kaviani, 2023; Xiao; Levin, 2000).

A acetona é um VOC de interesse científico por formar sistemas simples: econômicos, acessíveis e de fácil manipulação no quesito laboratorial. Sendo assim, o grupo de pesquisa de processos de separação da Universidade Federal da Bahia (UFBA) tem tido grandes avanços principalmente no que diz respeito tanto à obtenção de dados experimentais de laboratório quanto à simulação de processos envolvendo a absorção gasosa e visando o projeto de novos processos.

Logo, atentando-se às complicações causadas principalmente pelos VOCs provenientes dos processos industriais, surgem estudos e mecanismos de tratamento de efluentes, sendo a coluna de absorção um equipamento eficaz na separação de componentes gasosos, reduzindo suas emissões em plantas químicas através do controle da transferência de massa do contaminante (Shibata, 2017).

Assim, para otimizar as colunas de absorção, a simulação computacional está sendo cada vez mais empregada na maioria das plantas industriais do mundo, a qual visa, através de modelos matemáticos, reproduzir o funcionamento dos equipamentos sem que se necessite de dados reais de plantas. Desse modo, os programas geram resultados, que possibilitam analisar o impacto das variáveis operacionais em todo o processo, como as vazões, temperatura, tipos de recheios e pressões da coluna absorvedora, e a relação com o aspecto temporal (tempo de residência da absorvedora), técnico (eficiência da absorção), econômico (custo energético, de solvente e com a captação do contaminante) e de segurança da planta (Al-Malah, 2022; Aspen Plus[®], 1999).

Portanto, estudos de colunas de absorção são bastante comuns na literatura científica usando o

simulador Aspen Plus[®]. Neto e Góis (2022), por exemplo, simularam e verificaram a influência de variáveis como vazão de solvente, temperatura e pressão na remoção do CO₂ contido no biogás, em uma coluna absorvedora com recheio de anéis de Pall. A partir da quantidade de contaminantes removidos e da pureza do biogás limpo, foi possível constatar o aumento da eficiência energética, além de evitar danos aos equipamentos veiculares e impactos ambientais por causa das propriedades corrosivas. Além do mais, neste estudo, os autores concluíram que há uma grande influência do tipo de recheio sobre a transferência de massa entre as fases e sobre a eficiência da separação, sendo um tema crucial a ser explorado de forma mais abrangente nos trabalhos.

Sob outra perspectiva, um estudo importante feito por Devkota et al. (2021), que analisaram e simularam, no Aspen Plus[®], um projeto de torres absorvedoras no processo de captura de CO₂ de gases liberados na combustão, em uma planta de fabricação de ureia no Nepal. Neste trabalho, foi possível estabelecer a dimensão precisa da absorvedora adequada para remover determinadas quantidades de CO₂, além de se definir a relação quantitativa entre os custos com solventes, eletricidade, produção da planta etc. Os autores não abordaram o uso de VOCs ou o estudo dos recheios, mas ressaltaram a importância da simulação para o dimensionamento do equipamento e a eficiência na separação do contaminante.

Na literatura, há uma investigação experimental da hidrodinâmica, dos fenômenos de transporte e da eficiência de alguns tipos de recheios testados em laboratório usando o sistema acetona-água. Porém, do ponto de vista computacional, esse sistema é mais utilizado em reatores ou outros equipamentos, quando comparado ao presente trabalho. Portanto, a principal contribuição deste estudo reside em definir o modelo mais eficiente de transferência de massa e investigar, em detalhes, os fenômenos internos da coluna de absorção, por meio de simulações computacionais no Aspen Plus[®], utilizando o sistema acetona-água.

Deste modo, com base nas limitações da literatura em relação à ausência de trabalhos específicos em absorvedoras, o presente estudo focará na eficiência da coluna absorvedora a partir da variação dos tipos de recheios e das vazões das fases, além da análise hidrodinâmica de queda de pressão, *holdup*, inundação e coeficientes de transferência de massa. Esse interesse pelo estudo computacional é bastante importante para a comunidade científica, visando comprovar a confiabilidade dos dados simulados para esse sistema, poupando tempo e recursos (recheios, equipamentos, solventes) que manifestam na coleta experimental, além de possuir uma análise mais detalhada do comportamento interno da coluna e poder explorar condições extremas sem comprometer a segurança do equipamento.

1.1 Objetivo Geral

Investigar a transferência de massa e a hidrodinâmica em uma coluna de absorção com anéis de Raschig e sistema água-ar-acetona, validando dados experimentais da literatura e analisando a eficiência do processo a partir do uso da modelagem computacional.

1.2 Objetivos Específicos

- Aprimorar o modelo termodinâmico através de dados de equilíbrio experimentais;
- Determinar, a partir de simulações, o modelo *rate-based* mais adequado para representar os fenômenos hidrodinâmicos e de transferência de massa, especificamente: Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993);
- Validar a queda de pressão e o coeficiente volumétrico de transferência de massa do líquido (K_{La}) com os dados experimentais coletados pelo grupo de pesquisa;
- Simular a eficiência pelo cálculo da altura equivalente a um prato teórico (HETP);
- Analisar a eficiência da absorvedora laboratorial diante de diferentes tipos de recheios randômicos, em termos da HETP, no simulador Aspen Plus®.

CAPÍTULO 2

Revisão da Literatura

2 REVISÃO DA LITERATURA

A presente revisão bibliográfica destina-se aos tópicos abordados em toda a pesquisa e divide-se em quatro partes principais. Primeiramente são apresentados os detalhes do funcionamento, os tipos de colunas absorvedoras e suas respectivas variáveis operacionais. Em seguida, é apresentado o estudo quanto ao fenômeno de transporte que existe em diversos equipamentos, como a transferência de massa, o equilíbrio termodinâmico e o número de estágios da coluna. Posteriormente serão mostrados os fenômenos hidrodinâmicos que ocorrem na coluna, como os fluxos das fases, a inundação, o *holdup* e a queda de pressão. Por último, é demonstrado o principal modelo de eficiência para torre absorvedora com recheio, denominado de altura equivalente a um prato teórico (HETP).

Vale evidenciar que, em determinados tópicos, exemplos da literatura são bastante mencionados para sistemas de CO₂ nas absorvedoras, vista a escassez de trabalhos referentes ao sistema acetona-água, o qual o presente estudo aborda. Diante disto, a análise da literatura foi mais focada nos fenômenos da coluna absorvedora (hidrodinâmica e fenômenos de transporte) do que no sistema utilizado.

A revisão bibliográfica para esta pesquisa foi realizada principalmente por meio das bases *ScienceDirect* e *Google Scholar*. A combinação dessas plataformas garantiu uma abordagem abrangente e atualizada nas áreas de interesse deste estudo.

2.1 Absorção em colunas com recheios

O processo de absorção desempenha um papel fundamental na engenharia química, onde um líquido absorvente é utilizado para dissolver um ou mais componentes solúveis (solutos) de um gás. A mistura gasosa contendo poluentes é alimentada no fundo da torre de absorção, enquanto o solvente líquido é alimentado no topo para absorver os componentes solúveis através de fenômenos de transferência de massa, como pode ser visto na Figura 1. O soluto presente na fase gasosa passa para o líquido até que o equilíbrio seja alcançado entre as duas fases, liberando assim o gás sem contaminantes (Treybal, 1980).

Vale ressaltar que o processo oposto é denominado dessorção ou *stripping*, no qual os gases, ao entrarem em contato com uma mistura líquida, removem seletivamente componentes da fase líquida para a fase gasosa por meio de transferência de massa.

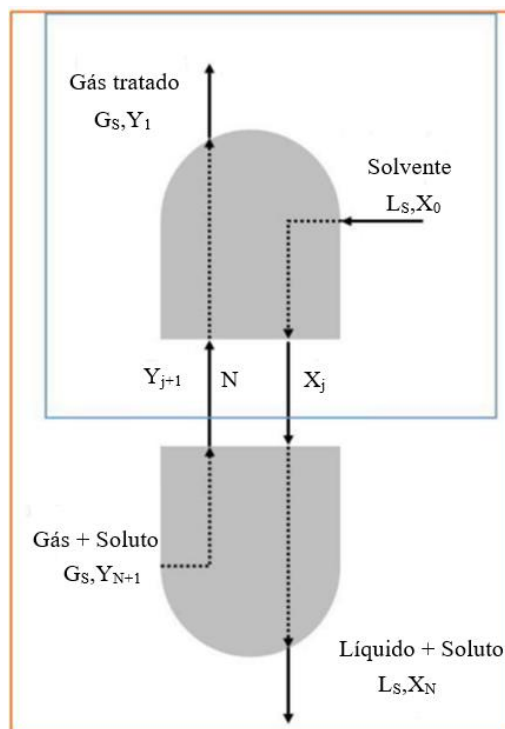


Figura 1 - Coluna de absorção gasosa e suas respectivas correntes. Fonte: Adaptado de SHIBATA (2017, p.36).

No contato líquido-gás na coluna de absorção, as composições variam de acordo com a transferência de massa do processo. Sendo assim, a coluna pode conter apenas um estágio ou múltiplos estágios. Logo, o balanço de massa global da coluna pode ser demonstrado pela Equação 1.

$$(1) G_{N+1} \cdot y_{N+1} + L_0 \cdot x_0 = G_1 \cdot y_1 + L_N \cdot x_N$$

Onde G e L são, respectivamente, as vazões das correntes gasosas e líquidas, e Y e X são as frações das correntes gasosas e líquidas do estágio N , sendo os subscritos 0 , 1 e N evidenciados na Figura 1.

Portanto, o que determina as escolhas entre os variados arranjos de colunas de absorção é o comportamento dos componentes a serem separados, incluindo: a solubilidade, a composição, a resistência à transferência de massa caracterizada pela fase, os custos e a sustentabilidade da operação unitária presentes no projeto. O tipo de contato em uma coluna de absorção é consistente com o de uma coluna de destilação, já que ambas servem para processos de separação e podem variar, principalmente, entre dois tipos: torres de pratos/bandejas e torres empacotadas/recheio.

As colunas com pratos ou bandejas consistem em pratos que forçam o gás ascendente a passar pelos orifícios da bandeja à medida que o líquido descendente flui horizontalmente nos pratos da coluna, assim, criando um contato entre as duas fases, como pode ser visto pela Figura 2. Este tipo é utilizado em setores industriais que apresentam grandes diâmetros de colunas e seriam capazes de lidar com grandes faixas de condições operacionais, demonstrando uma melhor distribuição de líquidos e maior flexibilidade (Kohl e Nielsen, 1997). Algumas das desvantagens são as de que elas não funcionam bem com sistemas que formam espuma e há elevado custo de um prato com material resistente à corrosão

(Laso; Von Stockar, 2000).

Chuang e Nandakumar (2000) retratam os principais conceitos das colunas com pratos, evidenciando as características da operação, as geometrias e dimensionamento dos pratos, além da hidráulica e da eficiência.

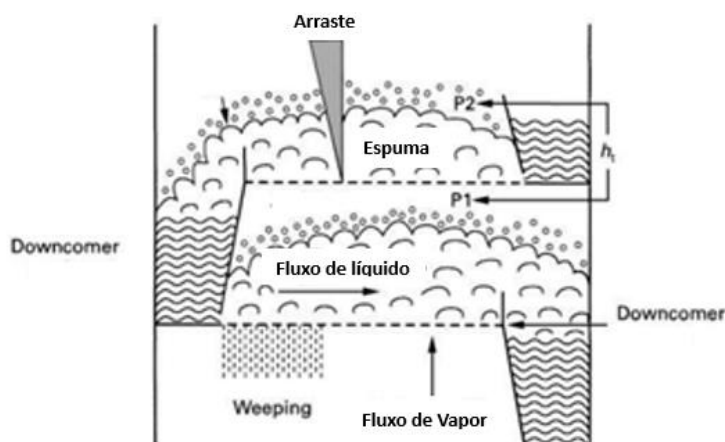


Figura 2 - Funcionamento de uma coluna com pratos. Fonte: Adaptado de Chuang e Nandakumar (2000, p.1137).

Um outro tipo de absorvedora é a com recheio ou empacotada. Elas são preenchidas com materiais ou recheios que melhoram o contato (tempo de residência) entre o soluto e o absorvente, intensificando a transferência de massa. Como apresentado na Figura 3, os materiais de enchimento da torre podem ser preenchidos randomicamente ou em uma estrutura específica (estruturada).

Comparando os dois tipos de empacotamento, o estruturado possui uma queda de pressão muito menor e uma maior eficiência energética em relação ao randômico, devido à melhor distribuição do líquido por toda a área da seção transversal da coluna, já que o líquido é melhor espalhado devido à estrutura. Em “Packed column Flood And Pressure Drop” (2023) é possível analisar as características internas desse tipo de coluna, além do funcionamento e de alguns fenômenos como queda de pressão.

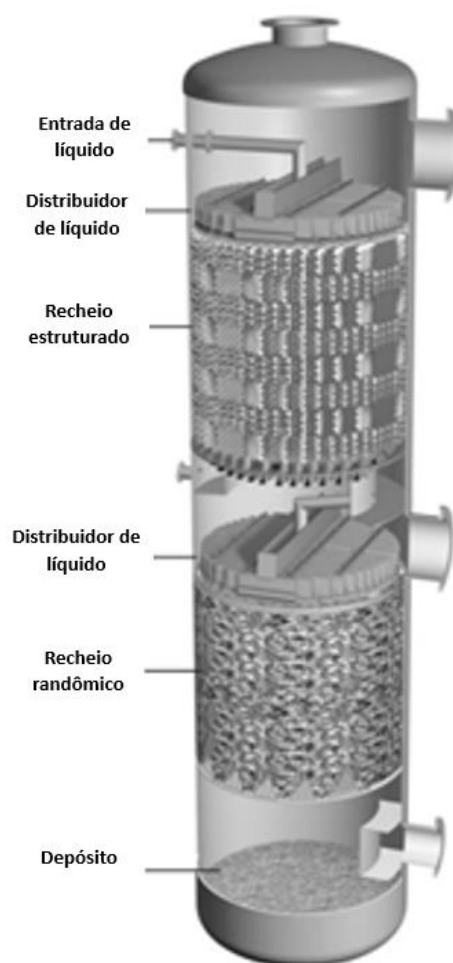


Figura 3 - Torre empacotada com leito superior de recheio estruturado e um leito inferior de recheio aleatório. Fonte: Adaptado de “Packed Column Flood And Pressure Drop”, 2023.

Tanto nas colunas com pratos como nas torres com recheio, o fluxo da fase pesada ou contínua (líquido) é descendente ao mesmo tempo que o fluxo da fase leve ou dispersa (gás) é ascendente, ocorrendo apenas no sentido vertical e, geralmente, em contracorrente.

Comparando as torres de recheio com as colunas de pratos, as empacotadas podem ser aplicadas principalmente quando se trabalha com fluidos viscosos, corrosivos (flexibilidade do material) e com formação de espuma, já que elas apresentam menor queda de pressão e garantem um número elevado de pratos teóricos sem que ocorra alteração nas dimensões da torre (menor diâmetros, e consequentemente menor custo). Porém, a grande desvantagem das torres empacotadas é que sofrem maior risco de inundação ao operar com maior capacidade de carga (Gauto e Rosa, 2011).

Como bem estabelecido na literatura, a escolha dos tipos de recheios em uma absorvedora é baseada em vários quesitos, sendo os principais deles:

- Resistência ao fluxo gasoso e à corrosão;
- Área superficial molhada por unidade de volume do recheio, garantindo que o líquido e o gás tenham um excelente contato;

- Deve ser quimicamente inerte aos fluidos destinados à utilização na torre;
- Custo do recheio por unidade de área efetiva.

Como apresentado em Maćkowiak (2015), os recheios aleatórios são largamente usados na destilação, absorção e *stripping*, em que houve quatro gerações de evolução ao longo da história. A primeira geração (1907 a 1950) deu origem ao anel de Raschig e à sela de Berl, que foram os precursores dos recheios aleatórios modernos. A segunda geração, final da década de 1950 até o início da década de 1970, trouxe o anel Pall (derivado do anel Raschig) e a sela Intalox (derivada da sela Berl). Os recheios de segunda geração ainda são os mais populares e usados na indústria moderna. A terceira e quarta geração (1970 até o presente) foi a evolução do anel Pall e da sela Intalox.

A partir da Figura 4, é possível analisar qual tipo de recheio e dimensões apresentam maior eficiência de absorção, em específico os anéis de Pall e de Raschig, em que é possível analisar a superfície específica (eixo da ordenada), o fator de empacotamento (eixo da abscissa), além da eficiência e capacidade dos recheios. Os recheios de Raschig são os mais antigos, mais baratos, são caracterizados por sua altura ser igual ao seu diâmetro e são em formatos de tubos. Já os anéis de Pall, como são ilustrados na Figura 5, são tubos com janelas laterais e com superfícies internas, aumentando assim a área de contato (molhada) e a eficiência, e diminuindo a queda de pressão em relação ao de Raschig e outros tipos de recheios. Assim, ainda de acordo com a Figura 4, é possível perceber que nem todos os recheios da terceira geração possuem maior capacidade e eficiência em relação aos da segunda geração (Kister, 1992).

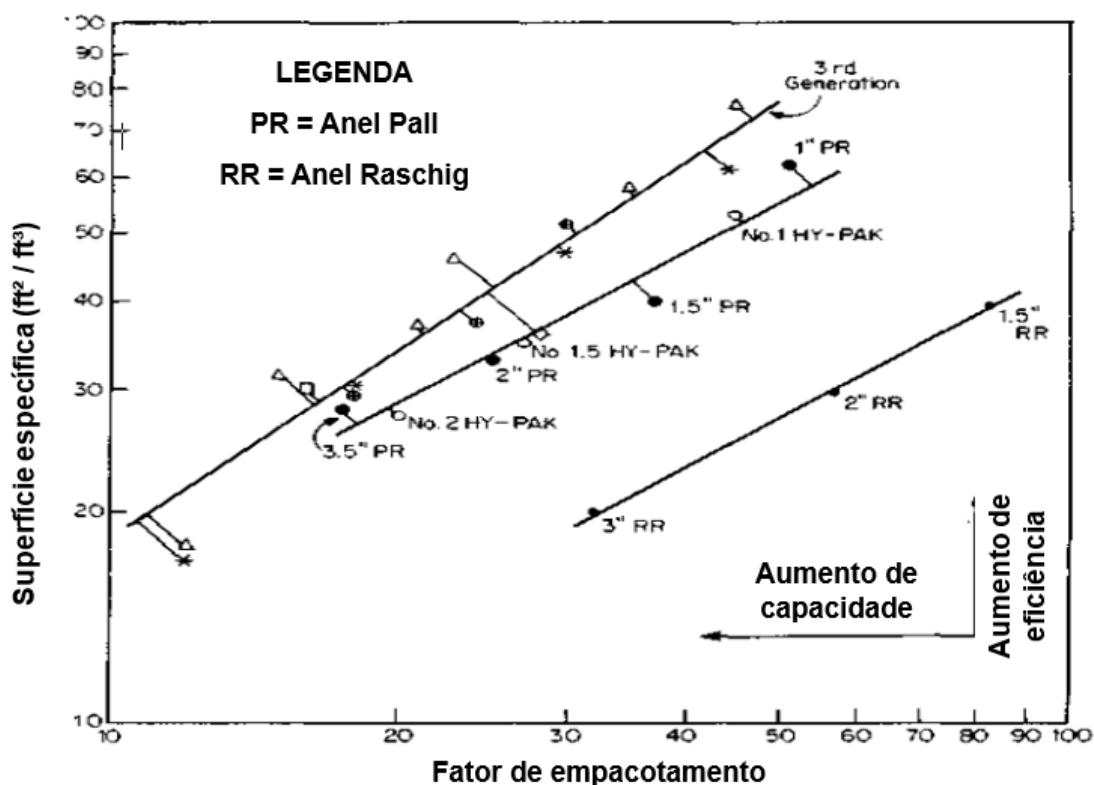


Figura 4 - Performance de diferentes recheios a partir da área interfacial e do fator de empacotamento. Fonte: Adaptado de Kister (1992).

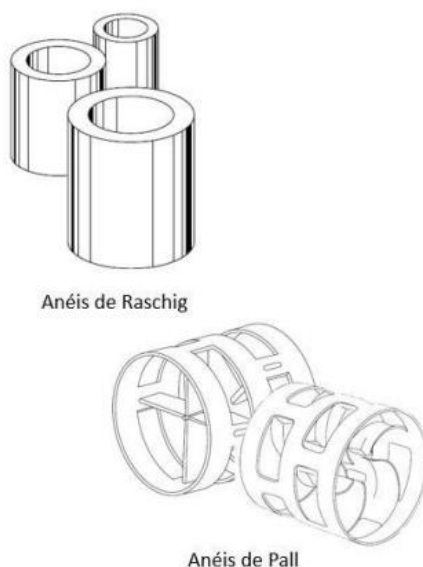


Figura 5 - Ilustração dos recheios randômicos dos anéis de Raschig e Pall. Fonte: Adaptado de Echenique (2021, p.7).

Alguns outros tipos de recheios randômicos, ilustrados na Figura 6, são a sela de Berl e a sela de Intalox, os quais serão utilizados futuramente no presente trabalho para realização de um estudo comparativo da eficiência entre os recheios.



Figura 6 - Selas de Berl e Intalox. Fonte: Adaptado de Bazooyar et al. (2023, p.4).

Vale salientar que o excesso de recheios em uma coluna pequena pode resultar na má distribuição do líquido e na diminuição da taxa de absorção. Assim, é extremamente importante dimensionar corretamente os recheios em relação ao tamanho da coluna de absorção. As recomendações de Foust et al. (1980) e Laso, Manuel e Von Stockar (2000) são as seguintes:

- Para diâmetros de coluna menores que 0,3 m, o recheio deve possuir tamanho menor que 25 mm;
- Para diâmetros de coluna entre 0,3 m e 0,9 m, o recheio deve possuir tamanho entre 25 mm e 38 mm;
- Para diâmetros de coluna maiores que 0,9 m, o recheio deve possuir tamanho entre 50 mm e 75 mm.

Salten e Kenig (2021) também investigaram a influência das geometrias de determinados recheios, sendo estes o anel de Pall e ENVIPAC 2, na eficiência da absorção do CO₂ contido no ar, utilizando uma solução aquosa de hidróxido de sódio. Foi constatado que a maior eficiência da separação está ligada a

uma geometria de empacotamento de grande área superficial, pequeno diâmetro hidráulico e com elevado número de ramificações, bordas ou pontos de cruzamento que redirecionam o fluxo do filme líquido, favorecendo assim a transferência de massa.

Já em trabalhos realizados por Fu et al. (2020) e Kang et al. (2019), os autores utilizaram, respectivamente, os recheios de Anéis de Pall e de Raschig, e analisaram como a área interfacial gás-líquido, a queda de pressão e o *holdup* afetam as duas fases na coluna, sem levar em consideração a transferência de massa entre as espécies. Determinaram que a coluna empacotada perde eficiência em um regime de transição viscoso para turbulento. Além disso, foi possível constatar que todos esses fenômenos, como o *holdup* e a queda de pressão, podem ser previstos por um modelo em um simulador de comportamento fluidodinâmico (CFD) em relação aos dados experimentais.

Pirola e Mattia (2021) também analisaram o efeito da variação do tipo de recheio, além da temperatura e da razão entre as vazões de líquido e gás, sobre a absorção do acetato de etila presente no ar. Observou-se que a coluna com recheio Raschig apresentou uma eficiência semelhante à da coluna com recheio Sulzer. Constataram ainda que a eficiência diminuiu com o aumento da temperatura e com a redução da razão entre as vazões de líquido e gás (L/G).

Assim, é possível afirmar que existe uma grande necessidade de analisar as configurações do recheio corretamente, tendo em vista seu impacto nos fenômenos hidrodinâmicos e de transporte, os quais acontecem no interior do equipamento.

2.1.1 As variáveis operacionais de uma absorvedora

Em uma coluna de absorção empacotada, as variáveis operacionais desempenham um papel crucial no contato do soluto com o solvente, e consequentemente na eficiência da separação. Esta interação entre a fase líquida e a fase gasosa depende de diversos fatores como a vazão do gás, a vazão do líquido, a temperatura e a pressão da torre.

Sendo assim, teoricamente, aumentar a vazão do gás, por exemplo, intensifica a interação entre as fases, aumentando a eficiência da absorção, desde que não ultrapasse um ponto crítico onde haverá arraste do líquido. Além disso, o aumento excedente da taxa de líquido também pode inundar as superfícies de contato, como recheios ou bandejas, comprometendo a separação (Kister, 1992). Vale ressaltar que, no presente estudo, as variáveis operacionais estudadas serão as vazões de gás e líquido, sendo a pressão e a temperatura mantidas constantes.

A temperatura também pode influenciar as interações pela agitação molecular, influenciando a taxa de transferência de massa, e a pressão da coluna influencia diretamente na solubilidade dos componentes do gás na fase líquida, visto claramente na Lei de Henry apresentada pela Equação 2, onde H é a constante de Henry, P_i a pressão parcial do soluto no gás e x_i é a fração molar do soluto i no líquido.

$$(2) \quad P_i = H \cdot x_i$$

Vale ressaltar que, para manter a segurança e a eficiência do processo, as variáveis operacionais possuem limites e não podem ser aumentadas indefinidamente (Geankoplis, 1993).

Neste cenário, Bashar (2018) associou a Lei de Henry com o controle da pressão na eficiência da separação de dióxido de carbono e ácido sulfídrico contidos no biogás bruto, utilizando a tecnologia de lavagem com água de alta pressão (HPWS). A partir dos seus resultados obtidos por estes autores, foi constatado que o aumento da pressão acarretou uma melhor absorção, pois o CO_2 é facilmente dissolvido devido à baixa pressão parcial, definindo assim um valor ótimo dessa variável para uma boa pureza do teor de metano.

O estudo de Lima et al. (2021) investigou a separação acetona-água em uma coluna com recheio de anéis de vidro, analisando a influência de parâmetros operacionais e geométricos na absorção e na queda de pressão. Através de experimentos e análises estatísticas, identificou-se que a concentração de acetona absorvida teve maior influência com vazões de líquido e de gás, uma vez que o aumento dessas vazões promoveu maior turbulência e transferência de massa. Assim, o controle das vazões é essencial para otimizar a eficiência hidrodinâmica da coluna. Além disso, o estudo desenvolveu modelos empíricos para prever a queda de pressão e a concentração de acetona na saída.

2.2 Princípios teóricos do transporte gás-líquido

No desempenho dos equipamentos de separação de engenharia química, existem processos físicos que envolvem transferência de massa, calor e momento, que são a base para a separação de componentes em misturas e são chamados de fenômenos de transporte. Como o próprio termo indica, estes são eventos que ocorrem durante o transporte de fases ao longo de uma coluna de separação, como em uma coluna de absorção. Isto inclui principalmente a difusão mássica de substâncias entre fases e a transferência de calor entre as substâncias (Bird; Stewart; Lightfoot, 2004).

2.2.1 Transferência de massa e difusão

A transferência de massa é um conceito essencial para explicar os fenômenos que acontecem na Engenharia Química e pode ser aplicada para diversas operações unitárias como a destilação, a extração, a adsorção e a absorção. Na absorção, esse conceito se resume na transferência do contaminante presente no gás quando este entra em contato com o líquido absorvente, ou seja, é a difusão do soluto pela interface líquido-gás. Essa transferência está associada à eficiência que o equipamento possuirá e é impactada por diversos fatores como: o tipo de recheio (influência no tempo e na área de contato das fases), as vazões das fases e a concentração do soluto nas correntes, entre outros (Incropera et al., 2008).

Geralmente, a transferência de massa é avaliada por equações e modelos da difusividade entre as fases, sendo a diferença de concentração a força motriz. O modelo mais evidenciado é o de duas películas (teoria dos dois filmes) apresentado por Whitman (1923), em que se considera a resistência à difusão

molecular gerada pelos dois filmes (δy e δx), como mostra a Figura 7. Existem outras teorias também importantes, como a teoria da camada limite e a teoria da penetração (Cremasco, 2016).

No material apresentado por Santos e Albuquerque (2016), é possível observar os principais conceitos de transferência de massa propagados na literatura, além de ilustrações e equações dos modelos de transferência de massa.

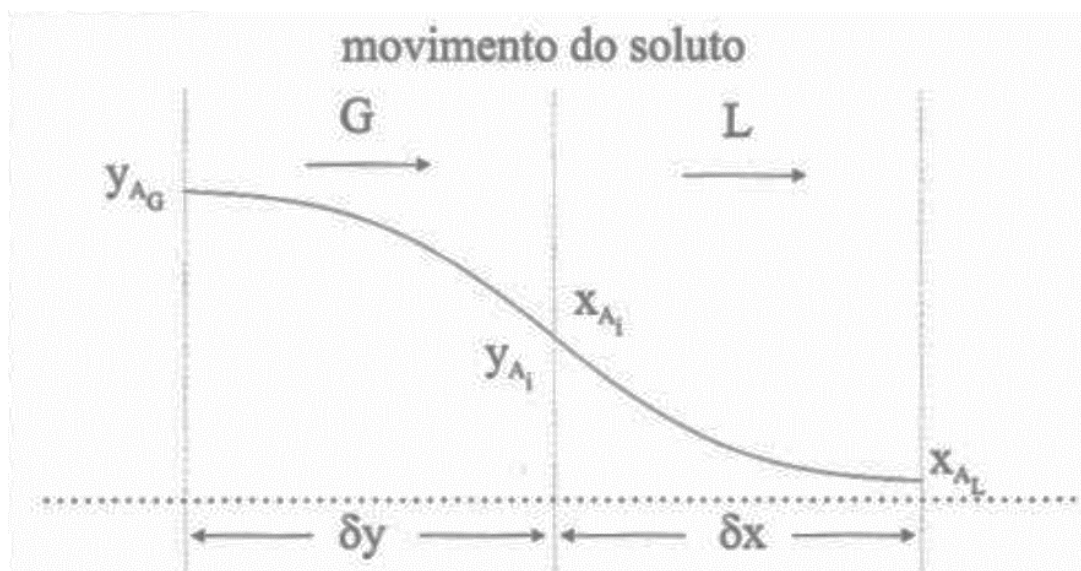


Figura 7 - Teoria dos dois filmes. Fonte: Santos e Albuquerque (2016, p.10).

Sendo assim, a transferência de massa desempenha um papel fundamental na engenharia química como um todo, sendo crucial para o entendimento dos fenômenos envolvidos principalmente nos processos de separação. No contexto da absorção, modelos como a teoria dos dois filmes são comumente utilizados para avaliar a difusividade entre as fases e diversos fatores, como o tipo de recheio e vazões das fases, os quais impactam diretamente nessa transferência.

Na literatura, vários são os estudos apresentados sobre a transferência de massa nas absorvedoras. No estudo apresentado por Albright et al. (2008), por exemplo, as eficiências são calculadas por modelos de transferência de massa, enquanto que no estudo de Perry e Green (2008) diversas correlações para o contato de sistemas bifásicos em diferentes recheios são identificadas.

No estudo publicado por Mahamoudou, Le Pierrès e Ramousse (2022) são apresentadas diferentes abordagens analíticas e numéricas utilizadas para os fenômenos térmicos, hidrodinâmicos e, principalmente, da transferência de massa entre os filmes. Já Quan et al. (2023), por sua vez, analisaram a transferência de massa usando modelos semiempíricos, no processo de absorção reativa de CO_2 em solução misturada de DEEA-HMDA (Dietiletanolamina-Hexametilenodiamina).

O trabalho de Rahbar e Kaghazchi (2005) apresenta um estudo sobre a modelagem de uma torre de absorção empacotada para compostos orgânicos voláteis (VOC), especificamente a separação de vapores de acetona de uma corrente de ar, utilizando água como absorvente e recheio de sela Intalox.

Foram detalhadas as condições operacionais da coluna, como a temperatura e a pressão, e avaliadas as influências das vazões de líquido e gás. Além disso, foram calculados os coeficientes de transferência de massa e utilizados métodos gráficos para cálculo do número de unidades de transferência. O estudo determinou que houve uma excelente separação, cuja eficiência foi semelhante à observada em estudos com outros tipos de recheios, e que essa eficiência depende do tipo de solvente, da composição do VOC e da queda de pressão.

O estudo de Pirola (2019) investigou o sistema ar-acetona-água em uma coluna absorvedora de 1 metro de altura, preenchida com recheio do tipo Sulzer. Foram determinados o balanço de massa e os coeficientes globais de transferência de massa. Simulações realizadas no software PRO/II da AVEVA apresentaram resultados consistentes com os dados experimentais.

Segundo a revisão de Hegely et al. (2017), que abrangeu estudos das últimas oito décadas, foi possível avaliar os métodos experimentais para determinação dos coeficientes de transferência de massa das fases gasosas e líquidas (K_G , K_L) e da área interfacial efetiva (a_e) em colunas recheadas, considerando tanto a absorção química quanto física. Verificou-se que, apesar da variedade de pesquisas, poucos estudos analisaram o K_L na absorção física do sistema acetona-água, como os trabalhos pioneiros de Othmer e Scheibel (1941; 1944) e White e Othmer (1942). Devido à antiguidade dessas pesquisas, o acesso aos artigos é limitado, o que dificulta a compreensão detalhada das contribuições de cada estudo. Além disso, a literatura analisada revelou que há menos trabalhos sobre transferência de massa focados no sistema com acetona, enquanto predomina o foco no dióxido de carbono (CO_2), explorando diferentes tipos de recheios e mecanismos de absorção.

Ainda com base na literatura, como no trabalho de Hemmati et al. (2019) e no banco de dados do simulador, os principais modelos de transferência de massa abordados para colunas empacotadas em contracorrente, são os seguintes:

- O Desenvolvido por Onda, Sada e Takeuchi (1968): são apresentadas equações empíricas para a área interfacial e os coeficientes de transferência de massa em uma absorvedora, utilizando recheios randômicos e com reação química. Inclui também a distinção entre a área superficial total fornecida pelo recheio e a área superficial realmente molhada pelo líquido. As equações encontradas por estes autores foram as seguintes:

$$(3) \quad \begin{aligned} a^I &= a_w A_t h_p \\ a_w &= a_p \left[1 - \exp \left(-1,45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma} \right)^{0,75} \right) Re_L^{0,1} Fr_L^{-0,05} We_L^{0,2} \right] \end{aligned}$$

$$(4) \quad k_{i,k}^V = \begin{cases} 2Re_V^{0,7} Sc_{V,i,k}^{0,333} a_p D_{i,k}^V (a_p d_p)^{-2}, & \text{para } d_p < 0,015m \\ 5,23Re_V^{0,7} Sc_{V,i,k}^{0,333} a_p D_{i,k}^V (a_p d_p)^{-2}, & \text{para } d_p > 0,015m \end{cases}$$

$$(5) \quad k_{i,k}^L = 0,0051(Re'_L)^{0,667} Sc_{L,i,k}^{-0,5} (a_p d_p)^{0,4} \left(\frac{\mu^L g}{\rho_t^L} \right)^{0,333}$$

A partir das equações apresentadas, os termos e suas unidades podem ser interpretados da seguinte forma: a_I é a área interfacial total para transferência de massa (m^2), a_w é área molhada por unidade de volume da coluna (m^2/m^3), a_p é a área específica do recheio (m^2/m^3), σ_c é a tensão superficial crítica do recheio (N/m), σ é a tensão superficial do líquido (N/m), $k_{i,k}^L$ e $k_{i,k}^V$ correspondem ao coeficiente binário de transferência de massa das fases líquida e vapor (m/s), $D_{i,k}^V$ é a difusividade do vapor (m^2/s), d_p é o diâmetro nominal do recheio (m), μ^L é a viscosidade do líquido (Pa·s), g é a aceleração gravitacional (m/s^2), ρ_t^L é a densidade do líquido (kg/m^3), h_p é a altura da seção do recheio (m), Re_V e Re_L são o número de Reynolds do vapor e do líquido (adimensional), Re'_L é o número de Reynolds para fase líquida baseada na área superficial molhada, $Sc_{L,i,k}$ é o número de Schmidt do líquido (adimensional), Fr_L é o número de Froude do líquido (adimensional) e We_L é o número de Weber (adimensional).

- O de Bravo e Fair (1982): desenvolvido para colunas com recheios randômicos e tem como base a teoria dos dois filmes, a qual avalia a resistência do filme de cada fase na transferência de massa. Além disso, esse modelo dá continuidade ao modelo de Onda, Sada e Takeuchi (1968), em que considera a área interfacial e molhada, a geometria e o material do recheio, a tensão superficial, a formação das gotas no líquido, entre outros. Sua principal correlação para transferência de massa com base na área efetiva é mostrada na Equação 6, sendo a equação para os coeficientes de transferência de massa similar ao modelo de Onda definido pelas Equações 4 e 5.

$$(6) \quad a^I = a_e A_t h_p$$

$$a_e = \frac{19,78 a_p (Ca_L Re_V)^{0,392} \sigma^{0,5}}{h_p^{0,4}}$$

A partir das equações apresentadas, a_e é a área superficial efetiva por unidade de volume da coluna (m^2/m^3) e Ca_L é o número capilar do líquido.

Vale ressaltar que o modelo de Rocha, Bravo e Fair (1993) pode ser aplicado para absorção e foi estudado para recheios estruturados. Parâmetros como *holdup*, queda de pressão, inundação e eficiência por transferência de massa são incluídos neste modelo, além das interações entre os filmes das fases, propriedades físicas e variáveis geométricas como aumento da área superficial.

- O de Billet e Schultes (1993): pode ser aplicado tanto para recheios estruturados como randômicos e possui como base o modelo de dois filmes para transferência de massa. Apesar de não considerar diretamente a transferência de massa das gotas, este modelo o faz indiretamente, contabilizando os gradientes de tensão superficial, os quais influenciam a formação de gotas. Suas principais

correlações entre a área interfacial e os coeficientes de transferência de massa para a fase vapor e a fase líquida são evidenciadas pelas Equações 7, 8 e 9.

$$(7) \quad a_e = a_p \frac{1,5}{\sqrt{a_p d_h}} \left(\frac{u_s^L d_h \rho_t^L}{\mu^L} \right)^{-0,2} \left(\frac{(u_s^L)^2 d_h \rho_t^L}{\sigma} \right)^{0,75} \left(\frac{(u_s^L)^2}{g d_h} \right)^{-0,45}$$

$$(8) \quad k_{i,k}^V = C_V \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon - h_t}} \right) \sqrt{\frac{a_p}{d_h}} D_{i,k}^V Re_V^{0,75} Sc_{V,i,k}^{0,333}$$

$$(9) \quad k_{i,k}^L = C_L \left(\frac{g \rho_t^L}{\mu^L} \right)^{0,167} \sqrt{\frac{D_{i,k}^L}{d_h}} \left(\frac{u_s^L}{a_p} \right)^{0,333}$$

A partir das equações apresentadas, u_s^L é a velocidade superficial do líquido (m/s), d_h é o diâmetro hidráulico (m), h_t é o *holdup* fracionado (adimensional), ε é a fração de vazios do recheio (adimensional), e C_V e C_L são os parâmetros do coeficiente de transferência de massa do vapor e do líquido (adimensional).

Em suma, a análise da transferência de massa e o ajuste de seus modelos são indispensáveis para quantificar e qualificar processos reais de separação, contribuindo para o controle, a otimização dos sistemas e a qualidade do produto. Contudo, com base na literatura analisada, ainda há escassez de estudos computacionais sobre a aplicação desses modelos ao sistema acetona-água em colunas absorvedoras empacotadas. Além disso, os trabalhos que abordaram esse sistema utilizaram, de forma geral, diferentes tipos de recheios e condições operacionais distintas das adotadas neste estudo.

2.2.2 Equilíbrio termodinâmico

Em relação ao transporte ou movimento das fases ao longo do equipamento de separação, um ponto importante a se considerar é o estado termodinâmico representado a partir do equilíbrio de fases. Assim, o equilíbrio termodinâmico refere-se à estabilidade de substâncias em diferentes fases (sólidos, líquidos e gases) a uma determinada temperatura e pressão. Sendo assim, diferentes componentes de uma mistura podem coexistir em equilíbrio de fases em diferentes partes do equipamento.

O equilíbrio de fases de uma mistura é controlado pelas leis da termodinâmica e afeta diretamente a eficiência da separação. Esse equilíbrio varia com as substâncias utilizadas (sistema) e com a faixa das variáveis operacionais. Sendo assim, o controle das condições operacionais é extremamente importante para obter a separação estimada. Vale ressaltar que, a depender do estado das fases, o equilíbrio pode ser líquido-vapor para absorção, líquido-líquido para extração, entre outros (Van Ness; Smith; Abbott, 2000).

No trabalho de Lamprea Pineda et al. (2023), por exemplo, é abordado o equilíbrio de

biosurfactantes na melhoria da solubilidade de VOCs hidrofóbicos (tolueno, etilbenzeno + m-xileno, ciclohexano, pentano, hexano e heptano) em água.

Assim, como o presente estudo se trata da absorção do sistema acetona-água e suas fases presentes, o equilíbrio será líquido-vapor e esses dados de equilíbrio experimentais são apresentados na Tabela 1, a partir da fração molar do soluto no líquido e da pressão parcial do soluto no gás.

Tabela 1 - Dados de equilíbrio para o sistema acetona-água em 293 K. Fonte: Adaptado de Sherwood (1937) *apud* Geankoplis, Hersel e Lepek (2018).

Fração molar da acetona no líquido, x_i	Pressão parcial da acetona no gás, P_i (mmHg)
0	0
0,0333	30
0,0720	62,8
0,117	85,4
0,171	103

A escolha adequada do modelo termodinâmico a ser utilizado no processo é essencial para representar corretamente os dados das substâncias e os parâmetros de interação. Surge a necessidade de estabelecer a equação de estado para a fase de vapor, como os modelos de Redlich-Kwong-Soave e Peng-Robinson, por exemplo, e para modelos de coeficiente de atividade para a fase líquida utilizando as equações de Wilson, NRTL, UNIFAC, entre outros (Van Ness, Smith, Abbott, 2000). A escolha dos modelos termodinâmicos, além de considerar as fases envolvidas, também dependerá do tipo das substâncias.

Ahmadpour e Kaviani (2023), por exemplo, apresentaram a torre absorvedora para recuperação de acetona, para produção de plásticos e fibras sintéticas, em que a condição ótima estabelecida foi de 20 estágios de equilíbrio à pressão atmosférica. Neste sistema, os autores utilizaram o modelo de Van Laar e deixaram clara a possibilidade de também utilizar o modelo de Margules com dois parâmetros. Haja visto que, nesse trabalho, o estudo foi focado nas determinações termodinâmicas, em que foi feita uma simulação do processo de separação usando o *software* Aspen Plus®, porém a modelagem não incluiu parâmetros ligados à transferência de massa e à hidrodinâmica, de maneira que os autores ressaltaram a necessidade de estudos complementares.

O estudo de Barbieri, De Guido e Moioli (2024) investigou dados experimentais isobáricos de equilíbrio líquido-vapor para o sistema propanol-água sob pressões de 60 kPa e 80 kPa. Foram considerados diferentes modelos termodinâmicos (NRTL, UNIFAC, Wilson e PSRK), porém a regressão dos parâmetros de interação binários foi realizada para o modelo NRTL. Observou-se que,

para os dados isotérmicos, o modelo PSRK apresentou o melhor desempenho, enquanto para os dados isobáricos, os modelos NRTL (após a regressão) e UNIFAC demonstraram melhor ajuste.

Já Kooijman e Taylor (2006) e Oliveira (2003) observaram que modelos como NRTL também são bastante adequados para o equilíbrio líquido-vapor do sistema acetona-água ou misturas não ideais, devido a um bom ajuste com dados experimentais.

Em resumo, a atenção para o equilíbrio das fases é essencial para uma boa eficiência dos equipamentos de separação, podendo ser influenciada a partir do tipo das substâncias, das condições operacionais e das fases presentes.

2.2.3 Número de estágios teóricos (NETS)

Para determinar a eficiência do processo de transferência de massa para remoção de componentes de uma corrente gasosa, o número de estágios em uma torre de absorção é um indicador importante. Segundo Seader, Henley e Roper (2010), o número de estágios pode ser:

- Real: representa o número de pratos ou bandejas necessários para garantir a separação desejada sob condições reais em uma coluna de absorção. Consideram-se as ineficiências dos equipamentos e suas influências na eficiência da separação.
- Teórico: representa uma estimativa (projeção) do número de pratos que seriam necessários para garantir a separação desejada em uma coluna que não contenha bandejas, como por exemplo nas colunas empacotadas, que é o foco deste estudo.

Para determinar, de maneira intuitiva, quantos estágios teóricos (NETS - *Number of Equilibrium Theoretical Stages*) são necessários para atingir uma determinada eficiência de separação da coluna, uma das formas é utilizar o diagrama McCabe-Thiele como uma ferramenta gráfica. A depender do equipamento, o gráfico pode ser construído e interpretado de formas diferentes.

Filarsky, Schmuck e Schultz (2019), por exemplo, adaptaram o diagrama McCabe-Thiele para determinar os números de estágios necessários para requisitos de alta pureza no processo de absorção. A análise foi feita para um cenário que permitisse o armazenamento imediato de gás na forma de hidratos através do exemplo de gás natural simulado, o qual é composto por metano, etano e propano.

Geankoplis, Hersel e Lepek (2018) ilustraram o diagrama para a absorção do sistema acetona-água, em que, na sua construção, é evidenciada a linha de operação e a linha de equilíbrio com base nas principais composições da acetona no gás e no líquido, sendo mostrado na Figura 8.

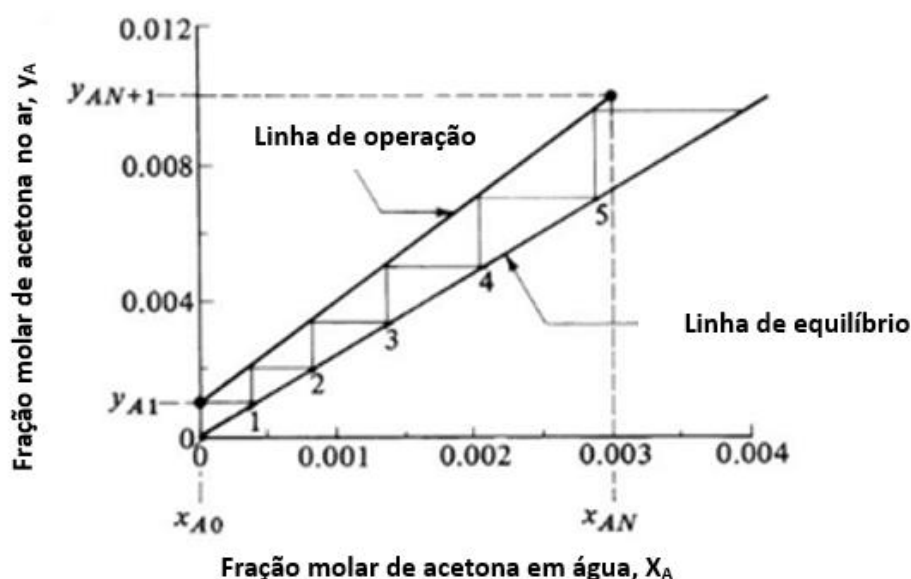


Figura 8 - Determinação do NETS para absorção contracorrente do sistema acetona-água. Fonte: Adaptado de Geankoplis, Hersel e Lepek (2018, p.947).

Do exposto, existe uma diferença no tratamento de colunas com pratos e com recheio, em que para colunas empacotadas, utiliza-se o método gráfico de determinação do número de estágios teóricos, o qual é importante para justificar a eficiência da separação da coluna.

2.3 Aspectos hidrodinâmicos na coluna

O estudo da hidrodinâmica nas torres absorvedoras é essencial para analisar como as fases líquida e gasosa interagem e como isso afeta o equilíbrio, a eficiência da absorção e a segurança operacional, assim evitando custos e problemas que prejudiquem o equipamento.

Geralmente, os principais fenômenos envolvidos na hidrodinâmica das absorvedoras são o fluxo das fases, zona de inundação, *holdup* e a queda de pressão, os quais serão descritos a seguir, sendo seus respectivos fundamentos teóricos baseados em Mackowiak e Hall (2010).

2.3.1 Fluxo das fases

Os fluxos das fases estão intimamente ligados ao arranjo no equipamento, em que o fluxo contracorrente é o mais empregado por maximizar a transferência de massa. A velocidade e a turbulência das fases são importantes nesse cenário, de modo que aumente o tempo de contato das fases ao longo do recheio da coluna e atinja a eficiência de separação desejada.

Hanusch, Rehfeldt e Klein (2018), por exemplo, ressaltaram a importância de se estudar a má distribuição das fases nas colunas com recheios randômicos, em que parâmetros operacionais e experimentais podem ter influência. A análise apresentada por estes autores foi feita na planta piloto em que foi analisada a dependência da distribuição do líquido diante de três tipos de recheios, juntamente com a variação de suas dimensões e das vazões das fases.

2.3.2 Zona de inundação (*flooding*)

A zona de inundação está relacionada diretamente ao dimensionamento da torre e ao descontrole das vazões das fases. Por isso, é importante determinar o limite ou valores máximos para estas variáveis. Esse caso existe quando se tem uma desproporção entre o fluxo de chegada de partículas e o fluxo de coalescência na área de contato, acarretando a grande concentração de partículas na interface de contato gás-líquido.

Se a vazão do gás for significativamente maior que a vazão do líquido, ocorrerá o arraste das gotas de líquido pelo gás. Agora, se o fluxo gasoso for muito menor que o fluxo líquido, ocorrerá a formação de uma região vazia. Em ambos os casos, há uma transferência de massa incompleta, o que leva a uma baixa separação, devido à inexistência de uma boa área de contato entre as fases. A inundação é, portanto, um fator hidrodinâmico que, além de elevar a queda de pressão na torre, resulta na incapacidade da coluna de absorção de continuar operando com eficiência. Por isso, segundo Caldas et al. (2007), geralmente as colunas com recheios são operadas com cargas entre 30 e 80% do ponto de inundação.

Nesta linha de pesquisa, Delahanty, Hughes e Garimella (2021) focaram em caracterizar os limites de inundação usando o sistema de absorção amônia-água. Eles determinaram experimentalmente que os limites de inundação foram bem previstos pelo modelo de Wallis (1969), no qual as correlações são feitas para análise da queda de pressão e inundação. Vale ressaltar que esse e os demais fenômenos hidrodinâmicos não são tão explorados computacionalmente, havendo poucos estudos principalmente para o sistema usando acetona.

A inundação ocorre em vários equipamentos de separação, pois, além das colunas de absorção, a inundação também pode ocorrer nas destiladoras e nas extratoras. Este fenômeno pode ser analisado visualmente e experimentalmente no próprio equipamento. Soboll, Hagemann e Kockmann (2017) mostram, através da Figura 9, o funcionamento de uma extratora funcionando, experimentalmente, em condição normal e em inundação (*flooding*). Assim, de acordo com a imagem da esquerda, é possível ver experimentalmente que a coluna está funcionando normalmente, devido ao borbulhamento da fase gasosa no líquido, havendo assim uma transferência de massa normal. Já na imagem da direita, é possível ver experimentalmente que a coluna não está funcionando normalmente e que está inundando, já que não há o borbulhamento da fase gasosa no líquido (grande coalescência das fases no interior e na parede da coluna) e que foi gerado uma segunda fase contínua que acarretou na obstrução da torre, havendo uma transferência de massa prejudicada.

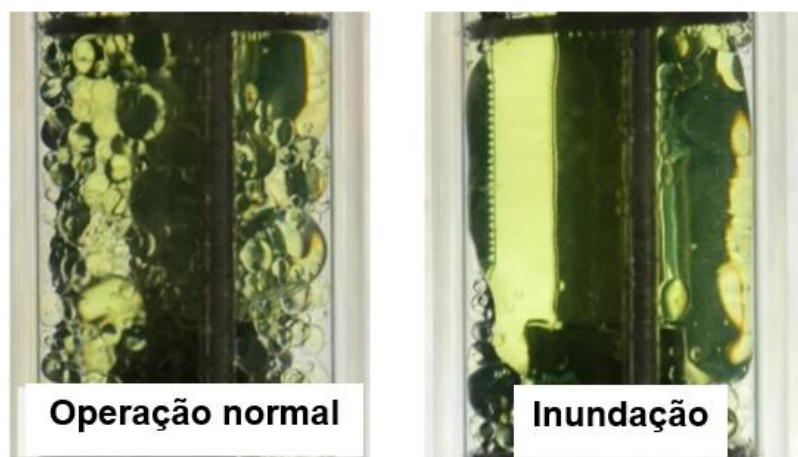


Figura 9 - Análise experimental de uma extratora operando normalmente e com inundação. Fonte: Adaptado de Soboll, Hagemann e Kockmann (2017).

Vale ressaltar, com base na inundação e nos demais fenômenos hidrodinâmicos, que estes não são tão detalhados computacionalmente na literatura, havendo poucos estudos, principalmente, para o sistema usando acetona e para poucos cenários de testes.

Como pode ser visto na Figura 10, normalmente a condição de inundação é calculada a partir da queda de pressão neste ponto e é mais analisada, pela literatura, em colunas com pratos ou com recheio estruturado, nas quais os simuladores comerciais utilizam, geralmente, os modelos de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e Wallis (1969). Além disso, é possível mensurar a zona de inundação a partir das velocidades do líquido e de carga. A zona de carga (*loading*) é quando o aumento da velocidade do gás causa a variação da inclinação da curva, elevando assim a perda de carga.

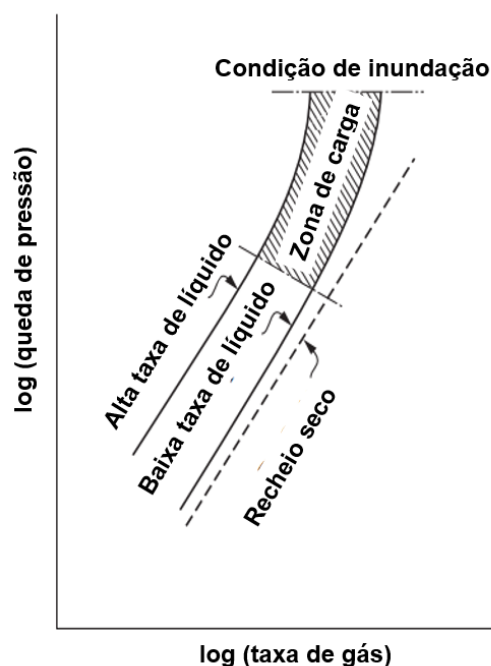


Figura 10 - Zona de carregamento e inundação diante da queda de pressão para colunas empacotadas. Fonte: Adaptado de Albright et al. (2008, p.1035).

Diante do trabalho de Wolf-Zöllner, Seibert e Lehner (2019), é possível analisar uma comparação da aplicabilidade entre esses e outros modelos apresentados na literatura. Assim, no presente estudo, o modelo de Billet e Schultes (1999) foi adotado para o cálculo do ponto de inundação pelos seguintes critérios:

- Apresenta uma equação definida para o ponto de inundação, sem ser diretamente a partir da queda de pressão;
- O modelo expõe uma boa exatidão e pode ser aplicado para colunas com recheios randômicos;
- O modelo também é importante por ser mais completo, já que trabalhos dos mesmos autores são focados em outros fenômenos como *holdup* e transferência de massa.

Diante do modelo de Billet e Schultes (1999), suas equações para a velocidade do gás no ponto de carga ($U_{G,Lo}$) e no ponto inundação ($U_{G,Fl}$) são apresentadas, respectivamente, pelas Equações 10 e 11:

$$(10) \quad U_{G,Lo} = \sqrt{\frac{g}{\Psi_{Lo}}} (\varepsilon - h_{L,Lo}) \sqrt{\frac{h_{L,Lo}}{a_p}} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_G}}$$

$$(11) \quad U_{G,Fl} = \sqrt{2} \sqrt{\frac{g}{\Psi_{Fl}}} \frac{(\varepsilon - h_{L,Fl})^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon^{\frac{1}{2}}} \sqrt{\frac{h_{L,Fl}}{a_p}} \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_G}}$$

Deste modo, com base em Haushofer et al. (2023) e sendo implementado automaticamente nos simuladores, como o Aspen Plus®, foi determinado que, para não ocorrer o fenômeno de inundação na coluna absorvedora, a velocidade de carga do gás deve ser no máximo 80% da velocidade do gás no ponto de inundação. Assim, o limite operacional pode ser evidenciado pela Equação 12:

$$(12) \quad \text{Sem Inundação: } U_{G,Lo} < 0,8 \cdot U_{G,Fl}$$

Assim, analisando o que há existente na literatura, é possível constatar que o modelo de Billet e Schultes (1999) é bastante empregado para analisar o fenômeno de inundação em colunas com recheios randômicos. Sendo assim, este modelo foi adotado no presente estudo com o intuito de confirmar, a partir do uso da modelagem numérica, o que foi observado experimentalmente por Barbosa e Góis (2024), em que as configurações de vazões foram operadas e visualmente observadas sem a presença de inundação na coluna absorvedora.

2.3.3 *Holdup* da fase líquida

Durante o processo de transferência de massa das colunas absorvedoras, esse parâmetro é a quantidade de líquido retido nos espaços vazios do recheio, como acontece no ponto de inundação. Este fator está intimamente ligado à área interfacial disponível para o contato, impactando assim na eficiência de absorção.

É importante o controle da fração de *holdup*, pois valores elevados significam o arraste do líquido e altas quedas de pressão, acarretando problemas operacionais nos equipamentos de separação. Assim, visando a otimização, espera-se manter baixos valores de *holdup* nas operações de transferência de massa (Richardson; Harker; Backhurst, 1990).

Na literatura, Fu et al. (2020) investigaram, com dados de laboratório, o *holdup* em uma coluna com recheio aleatório de anéis de Pall, no processo de remoção de CO₂. Foi determinado que a abordagem hidrodinâmica estabelecida previu o *holdup* da coluna e o cálculo da área interfacial, além de estabelecer que o *holdup* e a velocidade do líquido são maiores na superfície da parede do equipamento.

Niegodajew et al. (2018) e Velo, Carvalho e Hamada (2018) também estudaram, em escala laboratorial, o comportamento do *holdup* em colunas empacotadas, sendo, respectivamente, no reator de leito gotejante e na destiladora. Ambos usaram água como líquido e anéis de Raschig como recheio. Concluíram também que houve uma boa concordância dos resultados com as correlações da literatura, além de que o material do recheio apresentou um *holdup* relativamente alto.

No presente estudo, não houve a disponibilidade dos dados experimentais de *holdup* da absorvedora em foco para serem validados. Assim, os dados serão obtidos somente da simulação com base na transferência de massa. Além disso, correlações empíricas de *holdup* também foram adotadas da literatura com o intuito de verificar a consistência da faixa do *holdup* simulado, para assim determinar qual correlação dentre as estudadas é mais adequada para o sistema acetona-água e qual é mais condizente com as simulações. As principais correlações adotadas da literatura para representar a absorvedora com recheios randômicos, diferentemente das outras correlações existentes, foram:

- Bemer e Kalis (1978): foi derivada assumindo a força de resistência dominante. Sua correlação matemática é evidenciada com base na seguinte Equação 13:

$$(13) \quad h_L = 0,34 a_p^{1/3} U_L^{2/3}$$

A partir da equação apresentada, os termos e suas unidades podem ser interpretados da seguinte forma: h_L é o *holdup* adimensional total da fase líquida, a_p é a área específica do recheio (m²/m³) e U_L é a velocidade superficial do líquido (m/s).

- Engel, Stichlmair e Geipel (1997): consideram a força viscosa e outras propriedades do líquido, como a tensão superficial. Sua correlação matemática é evidenciada com base na seguinte Equação 14:

$$(14) \quad h_L = h_t h_p A_t$$

$$h_t = 0,93 \left(\frac{U_L^2 a_T}{g} \right)^{1/6} \left(\frac{\mu_L^2 a_T^3}{\rho_L^2 g} \right)^{1/10} \left(\frac{\sigma_L a_T^2}{g \rho_L} \right)^{1/8}$$

A partir da equação apresentada, h_t é o *holdup* fracionado (adimensional), h_p é a altura da seção do recheio (m), a_t é a área da seção transversal da coluna (m²), ρ_L é a massa específica do

líquido (kg/m^3), μ_L é a viscosidade do líquido ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) e g é a aceleração gravitacional (m/s^2).

- Mackowiak e Hall (2010): foi derivada assumindo a força viscosa. Sua correlação matemática é evidenciada com base na seguinte Equação 15:

$$(15) \quad h_L = \frac{3}{4} \left(\frac{3}{g} \right)^{1/3} a_p^{2/3} \left(\frac{\mu_L}{\rho_L} \right)^{1/3} U_L^{1/3}$$

Assim, analisando o que há existente na literatura, é possível constatar estudos em que a simulação é mais voltada para outros sistemas e equipamentos, em relação ao do presente estudo, além da exploração ser mais experimental, em que são testados poucos tipos de recheios e possuem custos com os aparatos experimentais.

2.3.4 Queda de pressão (ΔP)

Este fenômeno refere-se à resistência que o recheio oferece ao fluxo das fases e está intimamente ligado aos outros fenômenos hidrodinâmicos. Ainda com base em Mackowiak e Hall (2010), quando a queda de pressão atinge um certo limite em que dificulta o fluxo do líquido pelo recheio, há a formação do ponto de inundação, o que dificulta o fluxo do líquido pelo recheio e consequentemente impacta diretamente na eficiência da absorção e em problemas operacionais.

A queda de pressão, além de afetar diretamente a inundação, também influencia diretamente o *holdup* da coluna. Assim, visando uma boa eficiência de separação, deve-se observar bem os fenômenos hidrodinâmicos e suas interações, em que o ideal são baixas quedas de pressão e *holdup*, evitando assim pontos de inundação.

Biard, Couvert e Giraudet (2018), por exemplo, analisaram, a partir de simulações, a queda de pressão e os fenômenos hidrodinâmicos em colunas com recheios para absorção de VOCs usando água e solventes orgânicos. Porém, eles fixaram o recheio com anéis de Pall metálicos e utilizaram os modelos de Billet-Schultes e de Mackowiak para estes fatores interligados à transferência de massa. Neste trabalho, os autores concluíram que a queda de pressão aumentou quando se utilizaram solventes orgânicos, em comparação com a água.

Sendo assim, com base na literatura apresentada e em trabalhos, como o de Khadanga et al. (2024) e Son e Won (2019), a queda de pressão é bastante estudada tanto a nível experimental como computacional, já que a partir desta é possível realizar a análise em outros fatores hidrodinâmicos que comprometem a eficiência da coluna de absorção.

À vista disso, no presente estudo, a queda de pressão será avaliada a partir do modelo de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e o modelo Sherwood-Leva-Eckert (SLE) apresentado por Strigle (1994), já que o trabalho destes autores envolve o desenvolvimento de dados experimentais para sistemas ar-

água. Vale ressaltar que outros modelos existentes divergem do presente sistema, pois são aplicados para recheios randômicos de materiais e gerações mais novas, ou para recheios estruturados.

2.4 Eficiência da separação

Em processos industriais, é de extrema importância o monitoramento do equipamento, e uma das formas de avaliar o desempenho e ter noção se as colunas de absorção estão cumprindo com suas funções de separação é através de cálculos quantitativos de eficiência.

A determinação da eficiência de separação é importante pois, além de estar conectada com o equilíbrio das fases, a transferência de massa e a termodinâmica, esta impacta na qualidade do produto e é um dos principais objetos de estudo para a otimização da coluna, visando a redução de custos e recursos.

Ao aplicar modelos já estabelecidos na literatura para absorvedoras, é possível prever a eficiência da transferência de massa, otimizando assim as condições operacionais e garantindo um projeto adequado da coluna de separação. Além disso, a validação através destes modelos existentes para esta torre fornece uma base científica sólida para decisões de projeto e operacionais, visando assim a melhoria da eficiência global.

O modelo mais empregado de eficiência para colunas de absorção é o cálculo da HETP (*Height Equivalent to a Theoretical Plate*), enquanto o modelo de Murphree é empregado para colunas com pratos reais. De acordo com a literatura, a exemplo de Geankoplis, Hersel e Lepek (2018), a eficiência para colunas empacotadas é mensurada a partir da HETP e não da altura da unidade de transferência (*Height of a Transfer Unit* - HTU). Assim, como o presente estudo é focado na coluna com recheio aleatório (pratos teóricos), o foco será analisar no simulador a eficiência a partir da HETP, sendo esse cálculo incluído no Aspen Plus®.

2.4.1 Altura equivalente a um prato teórico (HETP)

Em Maćkowiak (2015), esse modelo é bastante usado na prática para as colunas com recheios, as quais não possuem nenhum prato real. A eficiência das colunas é calculada através da altura necessária desta coluna para alcançar a eficiência de uma única placa teórica. De forma simplificada, a HETP pode ser calculado através da Equação 16 abaixo:

$$(16) \quad HETP = \frac{H}{NETS}$$

, sendo H a altura da seção de recheio da coluna (m) e $NETS$ o número de estágios teóricos.

Para uma maior eficiência, o modelo deve apresentar menores valores da HETP, sendo assim uma relação inversa. Alguns fatores afetam esse cálculo, como o tipo e tamanho do recheio (área superficial por unidade de volume), as vazões e distribuições das fases, as pressões, as propriedades físicas, entre outros (Kister, 1992).

A partir da Figura 11 é possível observar, ao longo de uma determinada variável de entrada, que a melhor eficiência de separação e melhor distribuição de líquido estão associadas a um baixo valor da HETP, respeitando os limites operacionais de inundação. Assim, altos valores da HETP significam que a coluna precisaria ter mais pratos teóricos para ajudar na má distribuição do líquido.



Figura 11 - Perfil de eficiência da HETP para colunas empacotadas. Fonte: Adaptado de Albright et al. (2008, p.1034).

Na literatura, vários são os estudos apresentados sobre a importância do cálculo da HETP em equipamentos como as absorvedoras e destiladoras. Starrantino et al. (2023), por exemplo, focaram em correlações da HETP para colunas com recheios estruturados em sistemas com hidrocarbonetos. Para isso, eles realizaram uma análise de sensibilidade para determinar o efeito das propriedades físicas na previsão da HETP, sendo esta análise realizada com simulações de Monte Carlo. Foi determinado que, para recheios estruturados, os modelos de Billet-Schultes e de Song obtiveram as melhores performances.

Já o trabalho de Van Duc Long et al. (2020) ressaltou a medição da HETP por uma perspectiva industrial, em que foram realizadas simulações, no Aspen Hysys[®], de uma coluna com recheio estruturado e sistema envolvendo diclorodifluorometano (Freon-12). Os resultados simulados obtiveram boa concordância com dados experimentais de uma destiladora industrial em batelada. Outros estudos, como o de Pöschmann et al. (2023), também analisaram o cálculo da HETP em destiladoras com recheios estruturados, porém focaram em medições experimentais e utilizaram o sistema ciclohexano/n-heptano.

Pirola e Mattia (2021) analisaram a HETP de maneira superficial e, de acordo com a Equação 16 já mencionada, focaram no efeito da variação do recheio na absorção do acetato de etila (VOC) presente no ar. Para isso, eles utilizaram duas colunas, uma com recheio estruturado e a outra com recheio randômico, e simularam no *software* AVEVA PRO/II. Foi determinado que a simulação obteve uma boa concordância com os dados experimentais e que a eficiência das duas colunas foi semelhante.

Assim, a respeito da análise da HETP, com base na literatura atual, há muitos trabalhos que envolvem destiladoras, que utilizam recheios estruturados e sistemas diversos. Assim, o presente estudo diverge por trazer investigações específicas, a partir da simulação computacional no Aspen Plus®, de uma absorvedora com recheio randômico e sistema com acetona-água. Além disso, mais um fator distintivo é que a análise da HETP em estudo será feita a partir da modelagem *rate-based*, a qual será calculada para cada um dos modelos de transferência de massa: Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993).

De modo geral, a revisão realizada da literatura aqui apresentada, aborda mais a análise dos fenômenos de uma perspectiva experimental e limitada (fenômenos isolados, sistemas específicos e certos tipos de equipamentos, como a destiladora e o reator) em relação ao envolvido no presente estudo, o qual aborda uma investigação por uma perspectiva computacional da hidrodinâmica, dos fenômenos de transporte interligados e da eficiência de em uma absorvedora laboratorial usando o sistema acetona-água.

2.5 Modelagem e simulação computacional

O estudo de modelagem e simulação de um processo consiste em um conjunto de equações matemáticas que corresponde a um sistema físico-químico, representando a relação entre as entradas e saídas do sistema. Sua relevância está na capacidade de analisar sistemas experimentalmente complexos, prever comportamentos e cenários para auxiliar na tomada de decisões, otimizar o processo e permitir análises em ambiente controlado (Shinnar, 1978).

Assim, as principais vantagens da modelagem e simulação são: redução de custos e tempo, flexibilidade para explorar diferentes cenários, facilidade de interpretação dos resultados, interdisciplinaridade, maior segurança operacional e a possibilidade de explorar condições extremas do processo. Já as principais desvantagens são: dificuldade em selecionar e desenvolver modelos adequados, complexidade dos processos reais, tempo elevado para modelagem de sistemas complexos, dependência de dados empíricos para validação, complexidade no uso dos *softwares*, entre outros (Law, 2015).

O processo de modelagem e simulação é representado por etapas organizadas e interconectadas que permitem estudar um sistema real. Com base no diagrama, ilustrado na Figura 12, proposto por Schlesinger (1979), o ciclo pode ser representado pelas seguintes etapas:

- I. Realidade de interesse: corresponde ao fenômeno ou problema a ser investigado;
- II. Confirmação: garante que os objetivos e requisitos do estudo sejam claramente estabelecidos;
- III. Modelagem: constrói-se um modelo matemático, composto por equações diferenciais e fórmulas que representam o sistema real;
- IV. Validação: verifica-se se o modelo reproduz com precisão o comportamento observado na realidade;

- V. Implementação de *software*: o modelo matemático é convertido em um modelo computacional que envolve programação, como Python ou MATLAB;
- VI. Verificação: antes de executar simulações, é assegurado que o *software* funcione sem erros de implementação;
- VII. Resultados da simulação: os resultados são gerados e analisados, sendo comparados com dados reais;
- VIII. Atividades de modelagem e simulação: incluem o desenvolvimento e ajustes dos modelos;
- IX. Atividades de avaliação: são análises críticas contínuas para validar a precisão e a relevância do estudo.

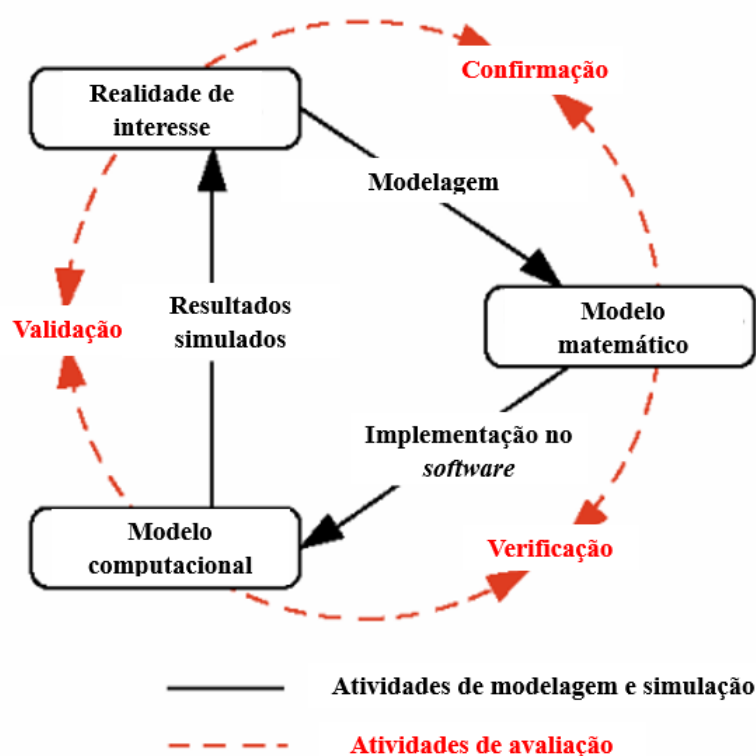


Figura 12 - Visão simplificada do processo de verificação e validação do modelo. Fonte: Adaptado de Schlesinger (1979).

O trabalho de Li et al. (2015) desenvolveu modelos de transferência de massa para simular a absorção química de CO₂ por solução aquosa de monoetanolamina (MEA) em colunas empacotadas. Foi utilizada uma metodologia que integrou modelagem computacional de transferência de massa, transferência de calor e dinâmica de fluidos. O modelo proposto permitiu simular detalhadamente a distribuição de concentração, temperatura e velocidade nessas colunas. Os resultados mostraram uma concordância satisfatória entre simulações e dados experimentais, validando o método tanto para sistemas em escala piloto quanto industrial.

No mapeamento de referências envolvendo a modelagem e simulação, em síntese, estudos se

destacaram, como:

- O trabalho de Moradi, Bahmanyar e Azizpour (2024), que explorou a extração de acetona da água usando simulações de dinâmica molecular;
- A pesquisa de Meziane et al. (2023), que focou na modelagem da combustão de acetona em reatores agitados;
- O estudo de Shekhar (2015), que simulou uma coluna de adsorção no *software* Aspen Adsim para remoção de acetato de etila do ar;
- Os trabalhos de Hemmati et al. (2018, 2019), que simularam, no *software* Aspen Plus, a absorção do CO₂ por solução aquosa de monoetanolamina (MEA) usando os modelos baseados nas taxas de transferência de massa (Onda, Bravo-Fair e Billet).

Assim, observa-se que, na busca por os estudos de modelagem envolvendo absorção com acetona, a literatura geralmente aborda sistemas que incluem outras substâncias ou equipamentos distintos dos processos convencionais de absorção.

CAPÍTULO 3

Materiais e Métodos

3 MATERIAIS E MÉTODOS

No presente capítulo serão apresentados os materiais e os métodos utilizados na presente pesquisa, sendo o principal equipamento o computador. Primeiramente será apresentado o equipamento de absorção física utilizado nas simulações, bem como a fonte dos dados experimentais de transferência de massa e das composições do soluto, obtidos no estudo de Barbosa e Góis (2024). Em seguida, será apresentado o procedimento computacional realizado deste equipamento no simulador comercial Aspen Plus® V.10, para validação dos dados experimentais e a exploração dos quesitos: hidrodinâmica, geometria, transferência de massa e seus impactos na eficiência do equipamento. Vale ressaltar que os conjuntos de dados experimentais de entrada e os resultados das simulações receberam tratamento no *software* Microsoft Excel.

Ressalta-se que não houve pesquisa experimental no presente estudo, uma vez que os dados utilizados foram obtidos da literatura. Além disso, a coluna absorvedora laboratorial foi considerada, neste estudo, como um modelo físico para as simulações realizadas no *software* Aspen Plus®.

3.1 Coluna de absorção

Os dados-base utilizados neste estudo foram coletados em coluna de absorção com recheio, de anéis de Raschig de vidro. A coluna é localizada no laboratório de processos de separação, na Universidade Federal da Bahia (UFBA), e pode ser mostrada pela Figura 13. As principais características e dimensões da coluna estão evidenciadas na Tabela 2.



Figura 13 - Coluna absorvedora com anéis de Raschig.

Tabela 2 - Características e dimensões da coluna de absorção.

Características	Tipos e Valores
Sistema	Ar-acetona-água
Altura da Coluna (m)	1,00
Diâmetro da coluna (m)	0,07
Recheio randômico	Anéis de Raschig
Material do recheio	Vidro
Dimensão do recheio (mm)	9,5
Altura de recheio (m)	0,79

Os dados experimentais, que são utilizados no presente trabalho, foram coletados por Barbosa e Góis (2024) através da absorvedora, mostrada na Figura 13, e são utilizados no presente trabalho para validação das simulações realizadas para obtenção do coeficiente volumétrico de transferência de massa da fase líquida ($K_{L,a}$). Vale ressaltar que os resultados experimentais determinados nessa literatura foram apresentados no Anexo B.

Esses dados experimentais são apresentados na Tabela 3, onde (V_{acet}) é a vazão mássica alimentada da acetona; (V_{ar}) a vazão mássica do ar alimentado; (L) a vazão mássica da água pura alimentada; (L/V) a razão entre a vazão de água e a vazão total de gás; (ΔP) a queda de pressão da coluna; (y_{n+1}) a fração de acetona no ar alimentado e (x_n) a fração mássica de acetona absorvida na água. As análises dos fenômenos foram realizadas utilizando-se três arranjos ou configurações de vazões, com o intuito de facilitar o entendimento das variações e combinações de parâmetros utilizados. Isto significa que, para cada arranjo formado pela vazão de acetona e de ar, foram feitas 5 variações da vazão de água, medindo-se então a concentração de acetona na saída do líquido. Informações mais detalhadas sobre o procedimento experimental destes dados podem ser obtidas em Barbosa e Góis (2024).

Tabela 3 – Dados-base e coletados na coluna absorvedora em escala laboratorial. Fonte: Barbosa e Góis (2024).

	V_{acet} (g/min)	V_{ar} (g/min)	L (g/min)	L/V	$\Delta P \times 10^{-3}$ (Pa)	$y_{n+1} \times 10^{-4}$	Concentração acetona na água (g/L)	$x_n \times 10^{-4}$ (massa)
Configuração 1	0,38	490	860	1,75	1,167	7,76	0,3235	3,23
			900	1,84	1,128		0,2549	2,55
			940	1,92	1,118		0,2641	2,64
			1000	2,04	1,113		0,2336	2,33
			1400	2,12	1,123		0,2458	2,46
Configuração 2	0,62	980	860	0,88	1,083	6,33	0,4333	4,33
			900	0,92	1,128		0,5004	5,00
			940	0,96	1,147		0,4898	4,90
			1000	1,02	1,137		0,5447	5,44
			1400	1,06	1,142		0,4882	4,88
Configuração 3	0,85	1470	860	0,58	1,083	5,78	0,5874	5,87
			900	0,61	1,167		0,8908	8,90
			940	0,64	1,147		0,7216	7,21
			1000	0,68	1,054		0,9702	9,69
			1400	0,71	1,162		0,5248	5,25

3.2 Simulador Aspen Plus®

As simulações no Aspen Plus® foram realizadas obedecendo a uma sequência de condições e dados do sistema alimentado. Isto significa que, para cada uma das três configurações de vazão, as principais sequências de informações preenchidas no simulador foram as seguintes:

- I. O cadastro dos componentes envolvidos;
- II. A avaliação e regressão do modelo termodinâmico com o sistema acetona-água;
- III. O preenchimento das correntes e variáveis da absorvedora;
- IV. A simulação com modelagem de equilíbrio;
- V. A simulação com modelagem *rate-based* e suas respectivas análises de sensibilidade.

No presente estudo, optou-se pelo modelo termodinâmico NRTL para representar o coeficiente de atividade do sistema acetona-água. Essa escolha deve-se à não idealidade desse sistema binário, além da capacidade do modelo de incorporar parâmetros ajustáveis, os quais caracterizam com precisão as forças atrativas e repulsivas específicas entre os componentes. O modelo NRTL também se mostrou adequado para representar o equilíbrio líquido-vapor (VLE) e sistemas com diferenças significativas de polaridade e tamanho molecular.

Este modelo deve ser fidedigno e representar precisamente os dados experimentais do sistema acetona-água. Assim, para isso, foi feita no simulador uma regressão dos parâmetros binários desse

modelo diante do banco de dados “BVLE025” presente no NIST (*National Institute of Standards and Technology*) e evidenciada na Figura 14, onde há dados experimentais de equilíbrio para diversos sistemas e condições operacionais.

Experimental data						
Usage	TEMPERATURE	PRESSURE	X	X	Y	Y
	K	N/sqm	ACETONE	H2O	ACETONE	H2O
STD-DEV	0,1	0,1%	0,1%	0	1%	0
DATA	373,124	101000	0,003	0,997	0,044	0,956
DATA	373,124	101000	0,011	0,989	0,204	0,796
DATA	376,325	101000	0,011	0,989	0,147	0,853
DATA	357,823	101000	0,025	0,975	0,422	0,578
DATA	348,124	101000	0,054	0,946	0,615	0,385
DATA	348,223	101000	0,082	0,918	0,678	0,322
DATA	341,424	101000	0,104	0,896	0,73	0,27
DATA	337,724	101000	0,156	0,844	0,791	0,209
DATA	337,124	101000	0,194	0,806	0,795	0,205
DATA	336,424	101000	0,262	0,738	0,855	0,145
DATA	336,924	101000	0,33	0,67	0,825	0,175
DATA	335,524	101000	0,445	0,555	0,832	0,168
DATA	333,524	101000	0,795	0,205	0,896	0,104
DATA	333,124	101000	0,941	0,059	0,959	0,041

Figura 14 - Banco de dados experimentais para o VLE do sistema acetona-água no Aspen Plus®.

Após essa etapa, estabeleceu-se o estado estacionário e cadastrou-se o equipamento absorvedor, incluindo suas correntes de entrada e saída, vazões e frações mássicas, conforme os dados da Tabela 3. Adotaram-se também a temperatura e a pressão ambiente (25 °C e 1 atm), e as quedas de pressão da coluna foram simuladas e validadas.

Em seguida, como pode ser mostrado na imagem do programa apresentada na Figura 15, foi estabelecido o modelo de equilíbrio e foram preenchidos os dados do equipamento como o NETS, sem condensador e sem refeedor, sendo estes fatores exigidos pelo simulador, já que nele, a absorvedora está contida dentro do bloco de destiladoras. Vale ressaltar que no “tipo do cálculo” requerido pelo simulador, é disponibilizada a opção tanto de equilíbrio como de *rate-based*, sendo este adotado posteriormente.

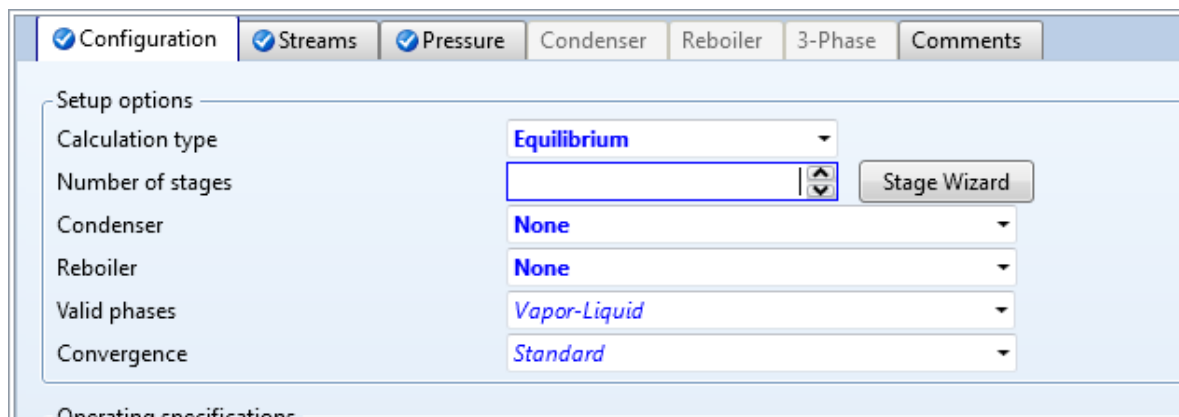
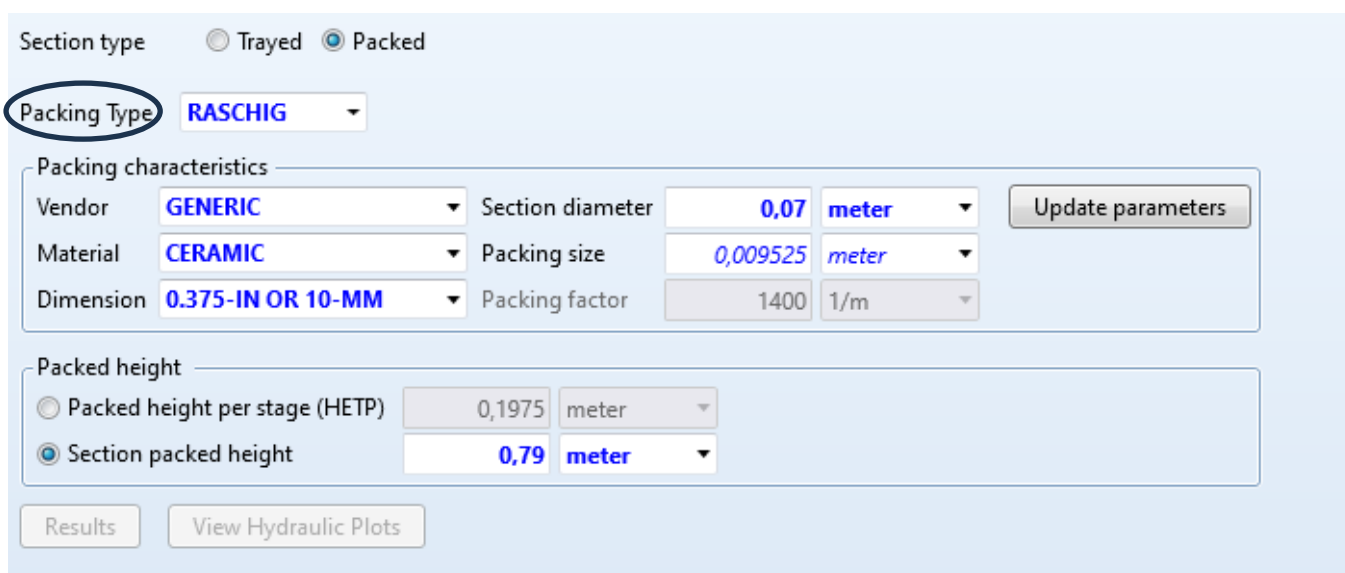


Figura 15 - Configurações exigidas pelo equipamento absorvedor.

A faixa de NETS considerada para a absorvedora no presente estudo foi entre 2 e 4 estágios teóricos, os quais foram determinados a partir do método gráfico de McCabe-Thiele. Para isso, a linha de equilíbrio foi representada a partir dos dados da Tabela 1, enquanto a linha de operação foi montada para cada vazão de gás e água (configurações de acordo com a Tabela 3). Diante dos vários gráficos gerados devido aos diferentes valores de vazões, para determinação do número de estágios teóricos da coluna, foi estabelecida uma faixa entre 2 e 4 estágios teóricos para análise dos fenômenos internos da coluna.

Além disso, foram preenchidos no *software* os seguintes dados de entrada: o equilíbrio líquido-vapor, a queda de pressão coletada experimentalmente, recheio randômico de Raschig com material cerâmico de dimensão 10 mm, além de suas respectivas dimensões e da coluna, como evidenciado na Figura 16. Entretanto, deve-se salientar que nenhuma reação entre a acetona e a água foi cadastrada, já que possuem grande afinidade e estabilidade.



Section type ☐ Trayed ☒ Packed

Packing Type **RASCHIG**

Packing characteristics

Vendor	GENERIC	Section diameter	0,07	meter	Update parameters
Material	CERAMIC	Packing size	0,009525	meter	
Dimension	0.375-IN OR 10-MM	Packing factor	1400	1/m	

Packed height

☐ Packed height per stage (HETP) 0,1975 meter

☒ Section packed height 0,79 meter

Results View Hydraulic Plots

Figura 16 - Configurações do recheio da absorvedora.

Após a modelagem de equilíbrio, foi adotada a modelagem *rate-based* ou baseada nas taxas, pois esta é a modelagem que mais representa os fenômenos reais por ser limitada pela transferência de massa, levando em consideração a resistência de cada fase no processo de difusão, o arraste de gotas de líquido no vapor, as áreas interfaciais de contato, entre outros (Almoslh et al., 2020).

Assim, para a modelagem *rate-based*, como pode ser evidenciado na Figura 17, houve algumas informações novas a serem preenchidas como: fluxo contracorrente, convergência avançada para absorvedora, consideração da teoria dos filmes com a correção de não idealidade, sem reação entre as fases vapor e líquida, e os modelos para cálculo do coeficiente de transferência de massa: Onda (1968), Bravo-Fair (1982) ou Billet (1993). De forma geral, estes são os principais modelos de transferência de massa abordados, na literatura e no simulador, para quase todos os tipos de recheios randômicos. Vale ressaltar que, para determinados recheios, ainda existem outros modelos singulares além desses modelos principais

(abordados no presente estudo).

Type	Packed
Diameter	0,07
Diameter units	meter
Rate-based calculation	<input checked="" type="checkbox"/>
Flow model	Countercurrent
- Tuning Factors	
Interfacial Area	1
Heat transfer factor	1
Average flow path factor	
Liquid mass transfer coefficient factor	1
Vapor mass transfer coefficient factor	1
- Liquid Phase	
Film resistance	Consider film
Number of discretization points	
Film non-ideality correction	<input checked="" type="checkbox"/>
- Vapor Phase	
Film resistance	Consider film
Number of discretization points	
Film non-ideality correction	<input checked="" type="checkbox"/>
- Correlation Methods	
- Mass Transfer	
Mass transfer coefficient method	Billet-93
Correlation Id/User Number	Billet-93
- Heat Transfer	
Heat transfer coefficient method	Bravo-Fair82
Correlation Id/User Number	Generalized
- Interfacial Area	
Interfacial area method	Onda-68

Figura 17 - Configuração da modelagem rate-based.

Ainda com base nos dados experimentais e na dimensão e no recheio fixo da coluna absorvedora, em seguida, foi feita a análise de sensibilidade no simulador em que se buscou os resultados variando: as vazões de acetona e água de acordo com a Tabela 3, o número de estágios teóricos (NETS) entre 2 e 4, e o cálculo do coeficiente de transferência (K_L) utilizando os modelos de Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993), com intuito de determinar qual modelo é mais adequado para representar a separação do sistema acetona-água.

Vale enfatizar que, como o presente estudo esteve focado na simulação da coluna absorvedora, a etapa de modelagem matemática não envolveu o desenvolvimento de novas equações diferenciais, mas sim a aplicação de modelos já consolidados na literatura, visando selecionar aqueles mais adequados ao cenário em estudo. Nesse contexto, referências foram tidas como base, como o trabalho de Hemmati et al. (2018), que destaca os principais modelos e equações baseados na taxa de transferência de massa, oferecendo um direcionamento claro para abordagens em colunas de absorção.

Assim, diante da Tabela 4, é possível ver os principais modelos e considerações para a modelagem rate-based. Além disso, são apresentadas na tabela as justificativas das respectivas escolhas dos modelos, tendo em vista principalmente suas disponibilidades no simulador, suas aplicabilidades diante do sistema em foco e da absorvedora do presente estudo, e com base nas evidências da literatura para outros sistemas.

Tabela 4 - Modelos *rate-based* adotados nas simulações da absorção da propanona por água.

Abordagem	Modelagem <i>rate-based</i>	Justificativas das escolhas
Correlação de transferência de massa	Onda (1968), Bravo-Fair (1982), e Billet (1993)	São os três principais modelos de transferência de massa abordados para colunas empacotadas e disponíveis no simulador e na literatura.
Correlação do <i>holdup</i> da fase líquida	Stichlmair-Bravo-Fair (1989) e Billet-Schultes (1993)	Disponibilidade no simulador e aplicabilidade no cálculo da fase líquida e para recheios randômicos.
Método de inundação pelas velocidades	Billet-Schultes (1999)	Com base literal, o modelo expõe uma boa precisão e pode ser aplicado para colunas com recheios randômicos, além de também ser considerado mais completo, já que os autores do modelo estudaram outros fenômenos como <i>holdup</i> e transferência de massa.
Queda de Pressão	Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e Sherwood-Leva-Eckert (SLE) apresentado por Strigle (1994).	Aplicabilidade para sistemas ar-água e recheios randômicos. Outros modelos existentes são aplicados para recheios randômicos de materiais e gerações mais novas, ou para recheios estruturados.
Difusividade binária do líquido (K_L)	Wilke-Chang (1955)	Disponibilidade no simulador e aplicabilidade para cálculo da fase líquida.
Opções da resistência do filme	Considerou-se a resistência do filme da fase líquida e do vapor com a correção de não idealidade e sem reação no filme.	Adotou-se no simulador a teoria dos dois filmes por ser válida para representar os processos reais de transferência de massa, diferente do modelo de equilíbrio.
Fluxo do modelo	Contracorrente	Fluxos em contracorrente na absorvedora do laboratório.

Após realizar todo o procedimento de modelagem no simulador para a absorvedora em questão, onde os fenômenos de transferência de massa e da hidrodinâmica foram analisados para o recheio de Raschig, o próximo passo foi simular e avaliar este equipamento diante de outros recheios randômicos. Assim, foi realizado um estudo comparativo da eficiência (a partir da HETP) do recheio de Raschig, considerado como referência e utilizado na absorvedora laboratorial em foco, diante de outros recheios randômicos disponíveis no simulador.

A seleção dos recheios a serem comparados foi com base em três critérios: mesmo tipo de recheio (randômico), mesmo material (cerâmica) e dimensões mais próximas possíveis do anel de Raschig simulado anteriormente, sendo a variedade de materiais e dimensões apresentadas, respectivamente, nas Figuras 18 e 19.

1 = PLASTIC	4 = CARBON	7 = STANDARD
2 = METAL	5 = METAL-32	8 = STEEL
3 = CERAMIC	6 = METAL-16	9 = POLYPROPYLENE

Figura 18 - Materiais dos recheios randômicos disponíveis no simulador Aspen Plus®. Fonte: Aspen plus input language guide (2004).

101 = 1.5-MM	205 = NO-0.5P	409 = 50
102 = 2-MM	206 = NO-0.5	501 = STYLE-2
103 = 2.5-MM	207 = NO-1A	502 = STYLE-3
104 = 3-MM	208 = NO-1P	601 = 1X
105 = 4-MM	209 = NO-1X	602 = 1Y
106 = 5-MM	210 = NO-1	603 = 1.4Y
107 = 6-MM 0.25"	211 = NO-1.5P	604 = 1.6Y
108 = 10-MM 0.375"	212 = NO-2A	605 = 2X
109 = 13-MM 0.5"	213 = NO-2P	606 = 2Y
110 = 15-MM 0.6"	214 = NO-2X	607 = 2.5Y
111 = 16-MM 0.625"	215 = NO-2	608 = 3X
112 = 19-MM 0.75"	216 = NO-3A	609 = 3Y
113 = 20-MM 0.875"	217 = NO-3P	610 = 4Y
114 = 25-MM 1"	218 = NO-3	611 = 125X
115 = 30-MM 1.25"	219 = NO-4P	612 = 125Y
116 = 35-MM 1.375"	220 = NO-4	613 = 250X
117 = 38-MM 1.5"	221 = NO-5P	614 = 250Y
118 = 40-MM 1.6"	222 = NO-5	615 = 350X
119 = 50-MM 2"	223 = NO-7	616 = 350Y
120 = 75-MM 3"	224 = NO-0.3	617 = 500X
121 = 90-MM 3.5"	225 = NO-0.7	618 = 500Y
122 = 100-MM 4"	226 = NO-1.5301 - II	619 = 170Y
123 = 45-MM 1.8"	401 = 200	627 = 250YC
124 = 60-MM 2.36"	402 = 300	701 = 1T
127 = 80-MM	403 = 400	702 = 2T
128 = 125-MM	404 = 700	703 = 3T
201 = NO-0A	405 = 28	704 = 4T
202 = NO-0P	406 = 48	705 = 5T
203 = NO-0	407 = 88	
204 = NO-0.5A	408 = 25	

Figura 19 - Dimensões dos recheios randômicos disponíveis no simulador Aspen Plus®. Fonte: Aspen Plus Input Language Guide (2004).

Após filtrar os recheios disponíveis de acordo com os critérios já mencionados, os recheios selecionados são apresentados na Tabela 5. Vale ressaltar que esse estudo comparativo foi feito medindo-se a HETP dos recheios selecionados e mantendo-se constantes: a dimensão da coluna, a seção de recheio e as configurações (1-3) de vazões, de acordo com o trabalho de Barbosa e Góis (2024).

Diante da variedade de recheios randômicos incluída no simulador, apenas a sela de Berl e Intalox foram as que mais se aproximaram do recheio laboratorial de Raschig, sendo que os demais recheios divergiram por serem padronizados em outro material (como aço ou metal) ou por apresentarem dimensões significativamente maiores.

Tabela 5 - Recheios selecionados para o estudo comparativo com o anel de Raschig. Fonte: Adaptado de Aspen Plus Input Language Guide (2004).

Tipo do recheio	Vendedor	Dimensão (mm)	Material	Área superficial (m ² /m ³)	Fração de vazios (ε)
Anel Raschig (referência)	Genérico	10	Cerâmica	472	0,655
Sela Berl	Genérico	13	Cerâmica	465	0,62
Sela Intalox	Genérico	13	Cerâmica	625	0,78

O recheio de Raschig utilizado nos experimentos de Barbosa e Góis (2024) era fabricado em vidro, porém este não é disponibilizado no simulador. Por isso, optou-se pela cerâmica como alternativa mais próxima, já que suas propriedades apresentam maior similaridade com as do vidro em comparação com os demais materiais disponíveis no *software*. Essa escolha foi adotada em todas as simulações do presente estudo. Esta boa associação deve-se ao fato de ambos terem a sílica como componente principal, são materiais frágeis e quebradiços, diferentemente dos metais, e ambos possuem boa resistência térmica e química. Vale enfatizar que, nos experimentos laboratoriais e nos trabalhos a respeito, não se utilizou o recheio de vidro devido às altas temperaturas que o material suporta, mas sim devido à acessibilidade.

Assim, finalizando o tópico metodológico, toda a organização foi detalhada, inicialmente, em torno da absorvedora laboratorial, sendo apresentadas as dimensões, o sistema, os dados operacionais retirados do trabalho de Barbosa e Góis (2024), entre outros. Posteriormente, foi detalhada a parte computacional desta absorvedora no Aspen Plus®, sendo explorados a hidrodinâmica, a transferência de massa e a eficiência. Além disso, foram explicitados: os requisitos exigidos no simulador, a modelagem termodinâmica, as modelagens do equipamento (equilíbrio e transferência de massa) e as configurações e variações internas do recheio da coluna.

CAPÍTULO 4

Resultados e Discussões

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

No presente tópico são apresentados os resultados gráficos relevantes a respeito da coluna absorvedora, simulada com anéis de Raschig, diante dos fenômenos hidrodinâmicos e de transferência de massa.

Inicialmente, foi obtida a regressão do modelo termodinâmico NRTL para melhoria dos parâmetros binários diante do sistema utilizado. Posteriormente, foram obtidos os resultados simulados para a hidrodinâmica diante dos modelos *rate-based* (Onda/1968, Bravo-Fair/1982 e Billet/1993) e correlações da literatura como: a queda de pressão, o *holdup* da fase líquida e o ponto de inundação. Em seguida, foram obtidos os resultados simulados relacionados à transferência de massa diante do modelo de equilíbrio e *rate-based* como: a fração mássica de acetona absorvida, a área interfacial e o coeficiente volumétrico de transferência de massa (K_{La}). Posteriormente, foi analisada a eficiência da coluna a partir da HETP, em que ao analisar todos os fenômenos já mencionados, foi possível estabelecer o modelo de transferência de massa mais adequado para o sistema proposto, além de validar os dados experimentais disponíveis. Por último, foi feita uma análise comparativa das eficiências da HETP entre diferentes tipos de recheios.

Vale salientar que dentre os fenômenos estudados, somente a queda de pressão, a fração mássica de acetona absorvida e o coeficiente volumétrico de transferência de massa (K_{La}) foram simulados e comparados com os dados experimentais de Barbosa e Góis (2024). Assim, os demais fenômenos foram determinados somente a partir de simulações, como o *holdup*, a inundação, a área interfacial e a HETP.

Para realizar uma maior conclusão acerca da análise dos dados simulados, o essencial seria comparar, para cada fenômeno e para as mesmas condições operacionais testadas, com dados experimentais obtidos. Para realizar uma comparação adequada em cada fenômeno, as condições operacionais, o sistema e o dimensionamento do equipamento devem ser semelhantes aos utilizados no presente estudo, porém, encontram-se na literatura recente trabalhos com recheios e vazões diferentes, ou com diferente tipo de VOC e arranjo de equipamento, o que dificulta a comparação experimental com o presente estudo.

4.1 Regressão de dados termodinâmicos

Apesar da literatura consolidar o modelo NRTL para o sistema acetona-água, o ajuste dos parâmetros desse modelo ainda depende das condições operacionais de cada sistema. Assim, neste trabalho foi realizada uma regressão do modelo com o intuito de variar os parâmetros binários do equilíbrio líquido-vapor, de forma a ajustar o mais próximo dos dados experimentais contidos na biblioteca NIST (“*National Institute of Standards and Technology*”), a qual está contida no simulador Aspen Plus®. Nesse caso, o melhor banco de dados utilizado como referência foi o “BVLE025”, retirado do trabalho de York e Holmes (1942), que contém dados da fração mássica de acetona em relação à

variação de temperatura.

É importante destacar que a regressão de dados termodinâmicos foi realizada utilizando exclusivamente o software Aspen Plus[®]. Além disso, os pontos dispersos nos gráficos representam os dados experimentais do banco de dados “BVLE025”, utilizados como referência, enquanto as curvas representam o modelo NRTL a ser ajustado para fase líquida e vapor, com seus respectivos parâmetros binários (antes e após a regressão).

Assim, a Figura 20 mostra as curvas do modelo NRTL antes da regressão, mostrando que este modelo não era muito adequado para representar os pontos experimentais do equilíbrio líquido-vapor do sistema acetona-água. Já na Figura 21, foi mostrado um melhor ajuste do modelo após a regressão dos parâmetros binários e diante dos dados do banco de dados escolhido.

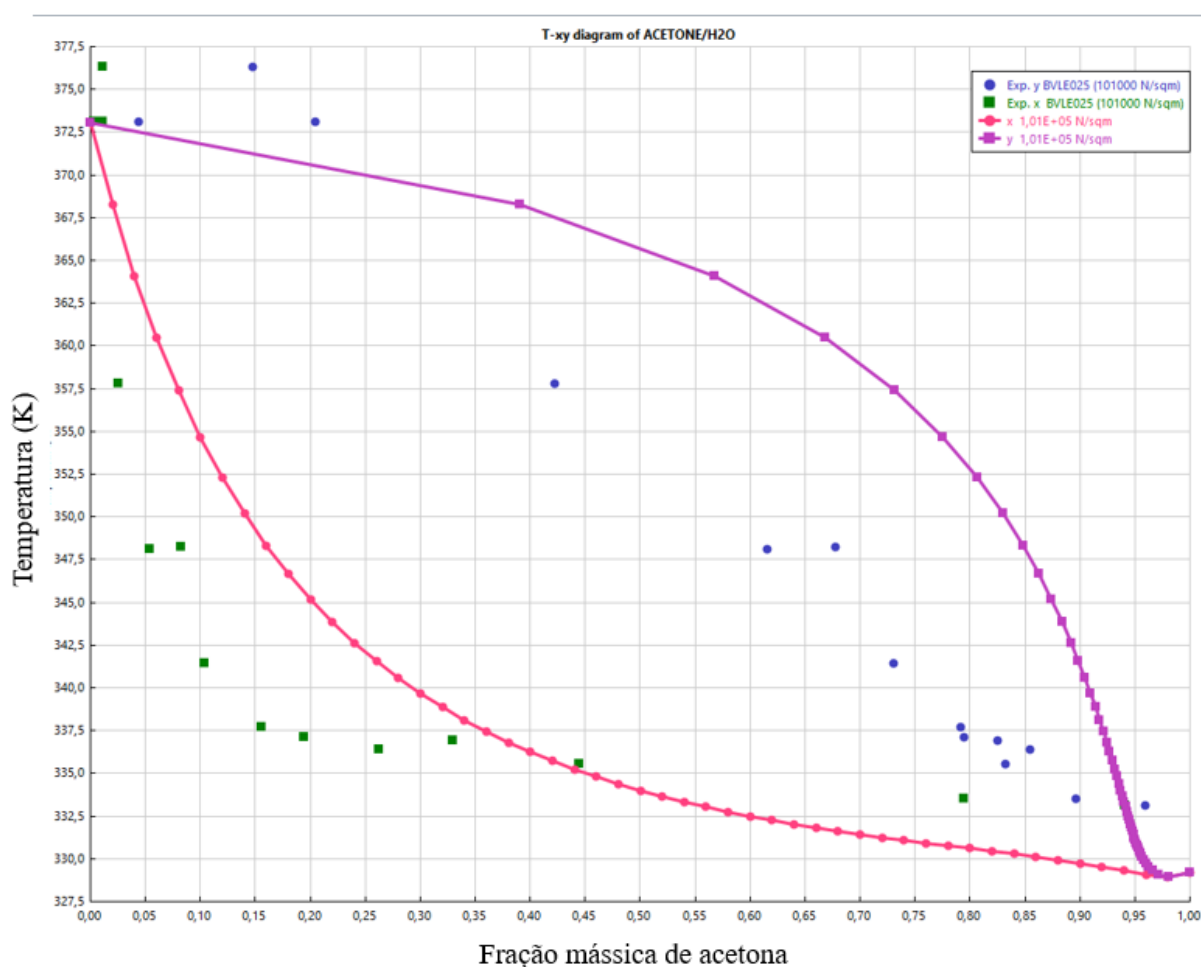


Figura 20 - Modelo NRTL antes da regressão dos parâmetros binários.

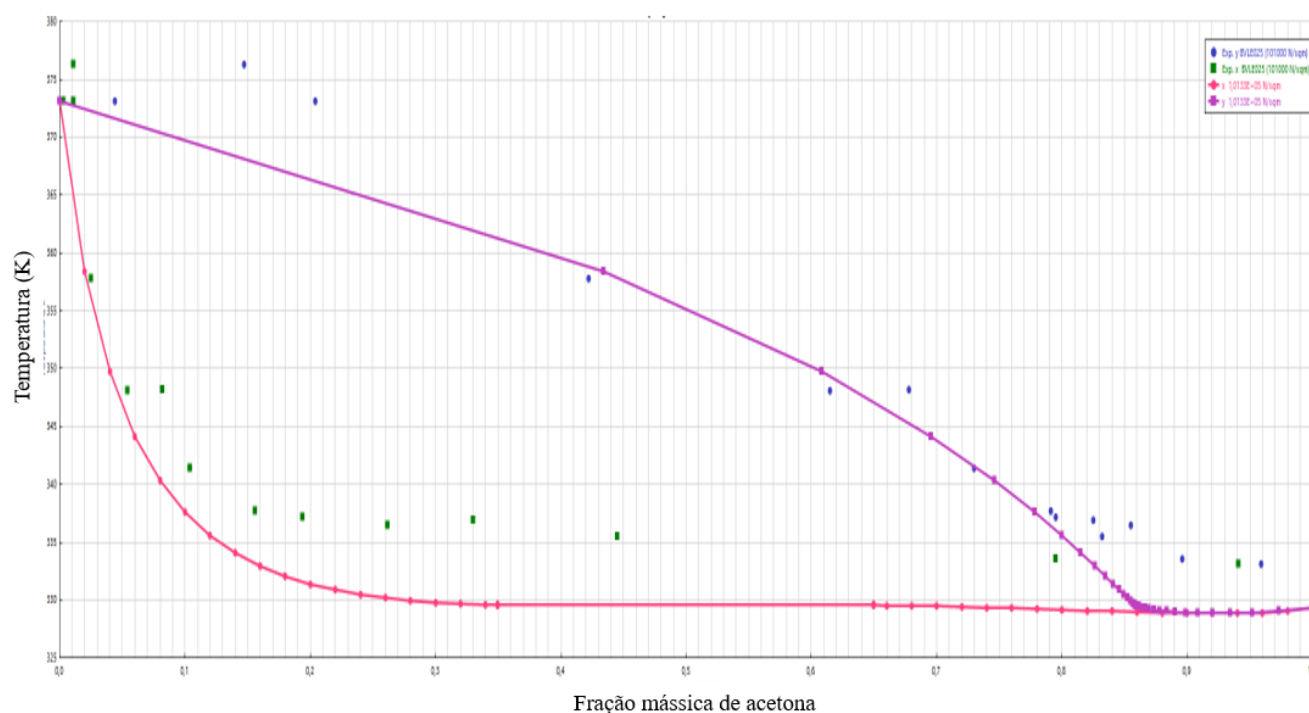


Figura 21 - Modelo NRTL após a regressão dos parâmetros binários.

Com base nos gráficos, o modelo NRTL antes da regressão mostrou, conforme ilustra a Figura 20, uma divergência com os pontos de referência do banco de dados. Após a regressão dos parâmetros binários do modelo, como demonstra a Figura 21, as curvas do modelo melhor se ajustaram para os mesmos pontos experimentais, expressando assim uma melhor adequação dos novos parâmetros binários na representação do equilíbrio líquido-gás do sistema acetona-água. Esses valores ajustados foram, então, utilizados nas simulações posteriores.

Foi possível observar que houve um maior desvio para elevadas frações de água, provavelmente em decorrência das interações intermoleculares intensas entre os componentes, principalmente ligações de hidrogênio. Essas fortes interações, por sua vez, tendem a reduzir as pressões de vapor do sistema, modificando o equilíbrio das fases e deslocando os pontos experimentais para regiões de temperaturas mais altas (Monakhova et al., 2014; Silva, 2016).

Vale enfatizar que a regressão do modelo depende das condições operacionais utilizadas e da natureza da própria equação, a qual pode ser adequada ou não para determinado tipo de componente e mistura. Nesse caso, o banco de dados “BVLE025” é representado por uma condição isobárica de 101.000 N/m² e temperatura na faixa de 60°C até 100°C, condição esta que diverge um pouco da condição ambiente (25°C) utilizada no presente trabalho. Porém, este foi o banco de dados que mais se aproximou do presente estudo e apresentou uma quantidade adequada de 14 pontos experimentais.

4.2 Queda de pressão (ΔP)

Para validação da queda de pressão na coluna empacotada com anéis de Raschig, foram simulados dois modelos em questão: o modelo de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e o modelo de Sherwood-Leva-Eckert (SLE) apresentado por Strigle (1994).

O modelo de Stichlmair é uma expressão matemática generalizada que inclui principalmente fatores referentes ao contato do líquido dentro do recheio, como porosidade, *holdup*, entre outros. Já o modelo SLE aborda uma correlação gráfica e é aplicado à queda de pressão calculada com base na razão entre a densidade do líquido e a densidade da água. De forma geral, a aplicabilidade de ambos os modelos é para sistemas ar-água e recheios randômicos, diferente de outros modelos existentes, os quais divergem do presente sistema pois são aplicados para recheios randômicos de materiais e gerações mais novas, ou para recheios estruturados.

Foi possível analisar o comportamento da pressão em relação às vazões totais de gás, V (configurações 1 a 3) e à vazão de água, L , a partir da razão L/V , como pode ser lembrado e simplificado a partir da Tabela 6.

Tabela 6 - Dados base de vazões da absorvedora laboratorial. Fonte: Barbosa e Góis (2024).

Configuração	V_{acet} (g/min)	L (g/min)	L/V
1	0,38	860	1,75
		900	1,84
		940	1,92
		1000	2,04
		1400	2,12
2	0,62	860	0,88
		900	0,92
		940	0,96
		1000	1,02
		1400	1,06
3	0,85	860	0,58
		900	0,61
		940	0,64
		1000	0,68
		1400	0,71

A Figura 22 mostra a comparação dos modelos simulados em relação à queda de pressão experimental medida no manômetro do laboratório por Barbosa e Góis (2024). Já a Figura 23 representa os desvios numéricos que os dados simulados apresentaram em relação aos experimentais.

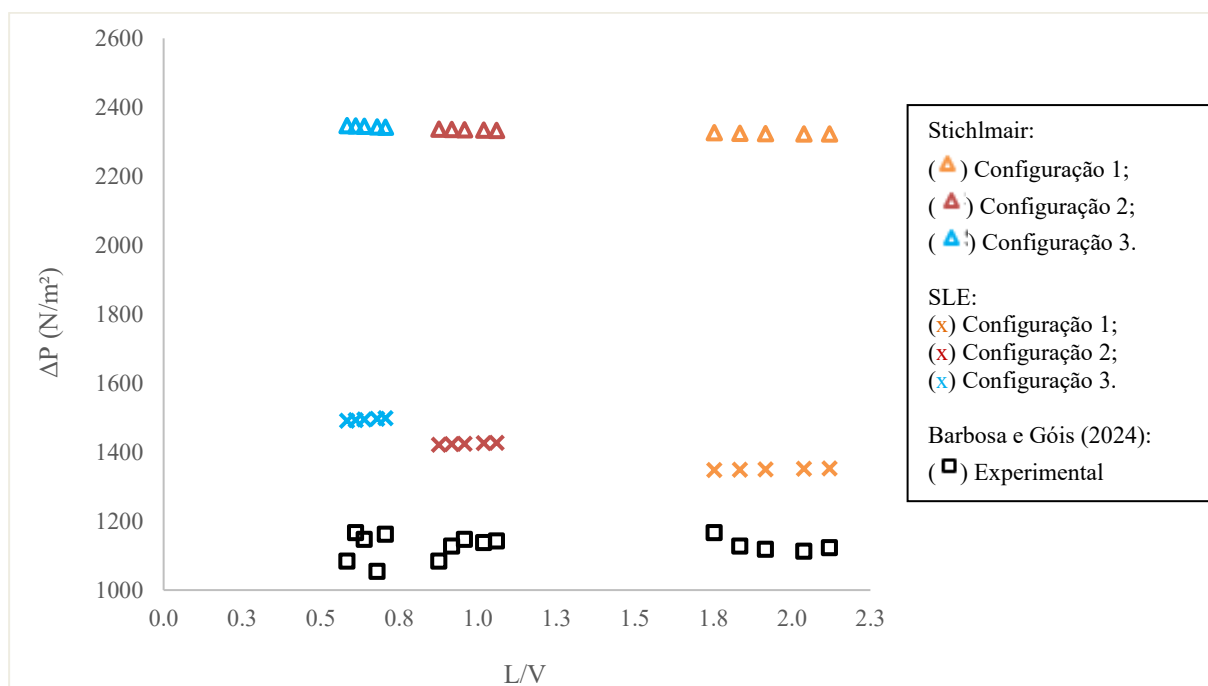


Figura 22 - Queda de pressão entre os modelos simulados e o experimental.

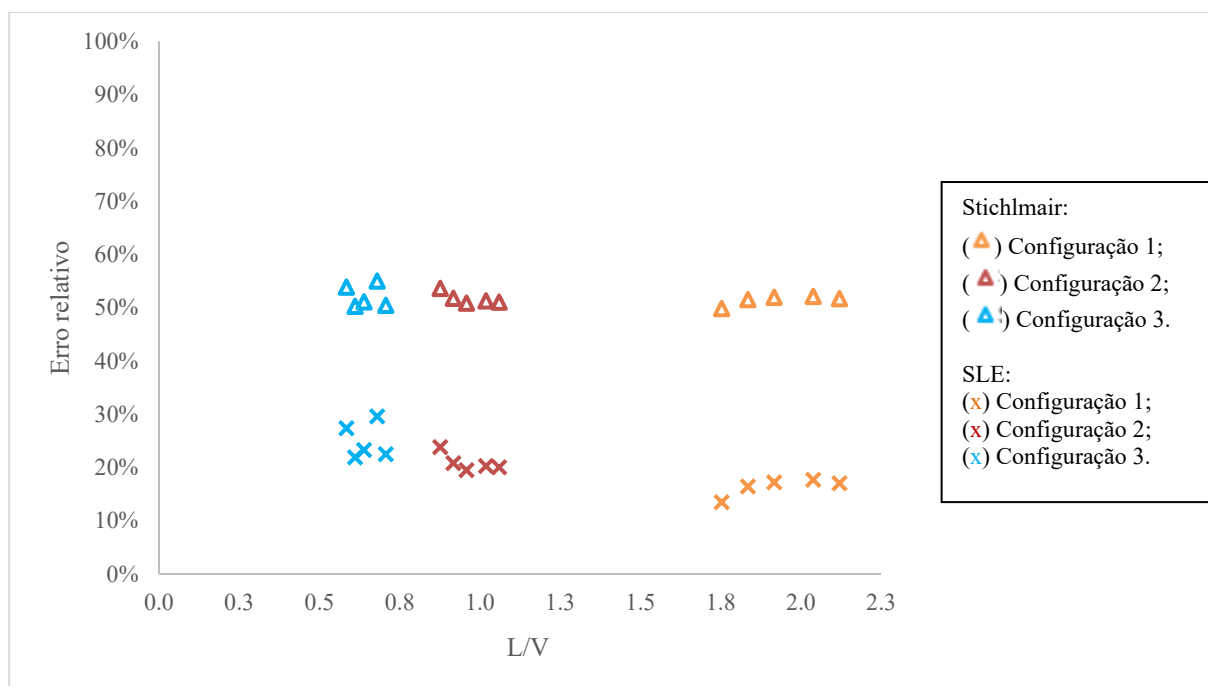


Figura 23 - Erro relativo da queda de pressão experimental com os modelos simulados.

Diante dos resultados gráficos acima, para validação dos dados da queda de pressão utilizados no presente trabalho, conclui-se que o modelo simulado de Sherwood-Leva-Eckert (SLE) teve uma melhor representatividade com os dados experimentais de Barbosa e Góis (2024), apresentando desvios entre 13% e 30%. Os desvios mais elevados foram observados em condições de maior vazão de gás (configuração 3), provavelmente devido ao aumento do arraste de líquido e ao risco de inundação na coluna, fatores que comprometem a exatidão dos modelos. Vale ressaltar que, segundo a literatura,

desvios considerados aceitáveis se situam geralmente entre 10% e 20% (Dorai et al., 2015; Zawadzki; Blatkiewicz, 2023).

Já o modelo de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) não se ajustou aos dados experimentais, apresentando desvios elevados na faixa entre 50% e 54%. A convergência e divergência dos modelos podem estar relacionadas ao fato do modelo de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) ser mais generalizado, podendo ser aplicado também para recheios estruturados, e do modelo de Sherwood-Leva-Eckert (SLE) ser mais adequado devido ao fato de ser um modelo desenvolvido por diversos contribuintes, para sistemas ar-água e com o fator de empacotamento dos recheios implementado.

4.3 Holdup da fase líquida

Conforme já descrito no item 2.3.3, o *holdup* da fase líquida representa a quantidade de líquido retido nos espaços vazios da seção de recheio. Assim, neste trabalho é evidenciado o *holdup* da fase líquida na coluna empacotada, pois o foco é a limitação das condições operacionais. Para isso, foi utilizada, no simulador Aspen Plus®, a modelagem já cadastrada de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e a modelagem de Billet e Schultes (1993), sendo esta última aplicada para todos os tipos de recheios.

Correlações para o *holdup* da fase líquida, utilizadas em trabalhos como o de Fu et al. (2020), foram adotadas no presente estudo com o intuito de servir como referência para o *holdup* calculado a partir da modelagem de transferência de massa simulada (*rate-based*). Assim, as principais correlações utilizadas foram: Mackowiak e Hall (2010), Bemer e Kalis (1978) e Engel, Stichlmair e Geipel (1997). Estas foram adotadas no presente estudo principalmente pela aplicabilidade a recheios randômicos e a quesito de referência para comparação com os modelos cadastrados no simulador.

A Tabela 7 evidencia os valores de *holdup* adimensional da fase líquida calculados para as respectivas correlações, tendo em vista que não varia com as vazões de gás (configurações 1 a 3, Tabela 6), mas com as vazões de água, já que as equações dependem da velocidade superficial do líquido e não do gás.

Tabela 7 - Dados de Holdup adimensionais da fase líquida para as correlações adotadas.

Vazão de H ₂ O alimentada (g/min)	Fração de <i>holdup</i> da fase líquida (adimensional)		
	Bemer e Kalis (1978)	Engel, Stichlmair e Geipel (1997)	Mackowiak e Hall (2010)
860	0,0636	0,0909	0,0457
900	0,0656	0,0923	0,0464
940	0,0675	0,0937	0,0470
1000	0,0703	0,0956	0,0480
1040	0,0722	0,0969	0,0487

Vale enfatizar que os dados da fração de *holdup* foram expressos de maneira adimensional, na qual é normalizado em relação ao volume do leito da coluna, permitindo assim uma maior facilidade ao comparar o desempenho de diferentes colunas ou diferentes condições operacionais, sem se preocupar com as unidades físicas específicas.

A Figura 24, representa a comparação dos valores simulados da fração de *holdup* da fase líquida em relação às correlações adotadas, satisfazendo todas as vazões mássicas de acetona de 0,38 g/min, 0,62 g/min e 0,85 g/min (configurações 1 a 3, Tabela 6), já que estes modelos não dependeram das condições do gás, mas somente do líquido e das características do recheio. Deve-se salientar que os testes com o *holdup* foram todos obtidos de simulações.

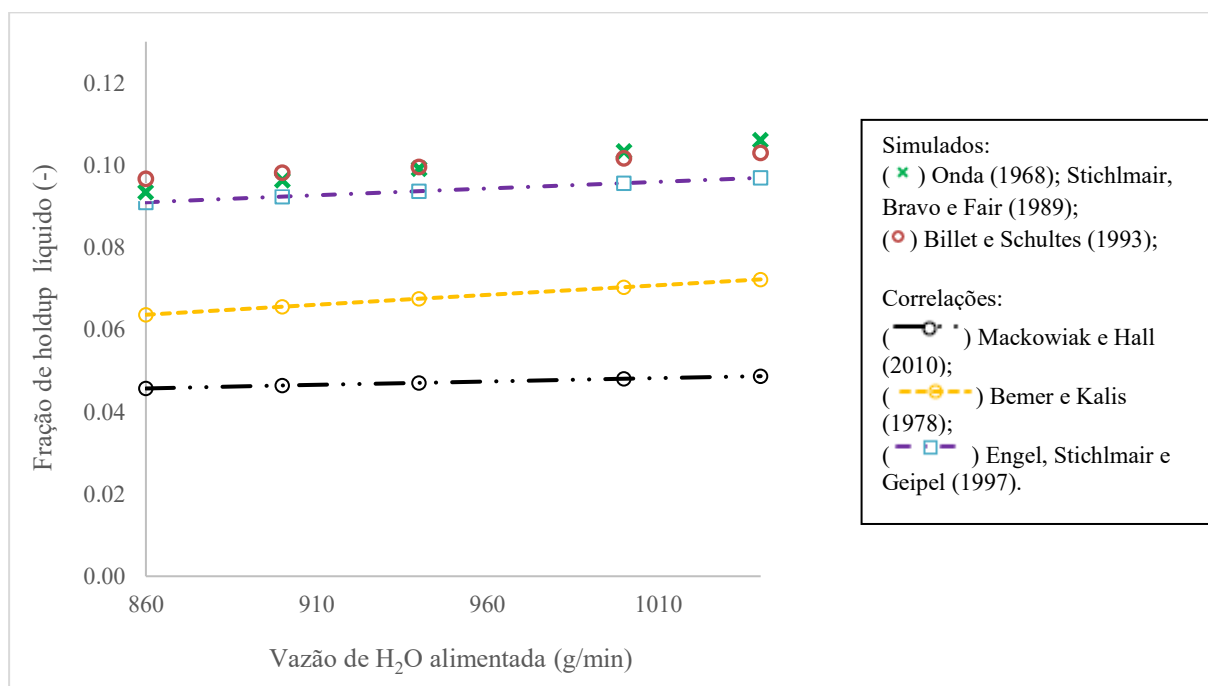


Figura 24 - Modelos para holdup da fase líquida.

Ao analisar a Figura 24, é possível perceber que tanto para os modelos simulados como para as correlações adotadas, existe um ligeiro crescimento da fração de *holdup* da fase líquida diante do aumento da vazão de solvente, o que significa que mais solvente é retido na seção do recheio. Além disso, foi notada uma excelente concordância dos modelos simulados e baseados na transferência de massa de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e de Billet e Schultes (1993). Apesar desses modelos simulados apresentarem os maiores *holdups* quando comparados com as outras correlações, de forma geral, foram valores não muito elevados, o que justifica o fato de não influenciar a operabilidade da coluna no presente estudo.

Para consolidar a análise, apesar da correlação de Bemer e Kalis (1978) ser derivada assumindo a força de resistência dominante e a correlação de Mackowiak e Hall (2010) ser derivada assumindo a força viscosa, estas não apresentaram uma boa concordância com as simulações, diferentemente da correlação de Engel, Stichlmair e Geipel (1997) que além de considerar a força viscosa também considera outras propriedades do líquido, como a tensão superficial.

Verificou-se que, no trabalho de Linek, Moucha e Rejl (2001), o *holdup* aumentou diante do incremento da velocidade do líquido, com valores observados de holdup entre 0,02 e 0,2, intervalo este semelhante ao identificado na presente pesquisa, reforçando assim a consistência dos resultados. Já no trabalho de Heymes et al. (2006), para o tratamento de tolueno no ar com água em uma absorvedora empacotada, o modelo de Billet e Schultes apresentou valores de *holdup* próximos ao experimental, enquanto o modelo de Mackowiak também apresentou um grande desvio.

Diante dos desvios identificados no gráfico, pôde-se confirmar o ótimo ajuste entre os modelos simulados com o de Engel, Stichlmair e Geipel (1997), além de se notar que, à medida que a vazão de água aumenta, os desvios entre o modelo simulado e as correlações também aumentam.

4.4 Ponto de inundação

Também como já visto no item 2.3.2, a zona de inundação é um fenômeno inoperante em um equipamento e está relacionada diretamente ao dimensionamento da torre e ao descontrole das vazões das fases, existindo assim uma desproporção entre o fluxo de chegada de partículas e o fluxo de coalescência na área de contato.

A análise do fenômeno de inundação foi realizada no presente estudo com o intuito de validá-la matematicamente e associá-la com os outros fenômenos, já que todo o presente trabalho simulado foi realizado sabendo-se que na coleta experimental, realizada por Barbosa e Góis (2024), as configurações de vazões foram operadas sem a presença de inundação na coluna absorvedora.

O modelo de Billet e Schultes (1999) foi adotado para calcular este fenômeno a partir das velocidades de carga, $U_{G,Lo}$ (Equação 10) e de inundação, $U_{G,Fl}$ (Equação 11), com seus respectivos dados mostrados na Tabela 8 e tendo as características e constantes aplicadas nos cálculos para o recheio de Raschig.

Tabela 8 - Dados do ponto de carga e de inundação da coluna absorvedora.

Vazão de gás, V (g/min)	Vazão de H ₂ O, L (g/min)	$U_{G,Lo} \times 10^3$ (m/s)	$U_{G,Fl} \times 10^3$ (m/s)
490,38	860	3,282	4,432
	900	3,213	4,313
	940	3,148	4,200
	1000	3,057	4,043
	1040	3,000	3,945
980,62	860	5,444	7,240
	900	5,329	7,045
	940	5,220	6,861
	1000	5,070	6,603
	1040	4,976	6,443
1470,85	860	7,319	9,647
	900	7,164	9,387
	940	7,018	9,141
	1000	6,816	8,799
	1040	6,689	8,585

Deste modo, com base em Haushofer et al. (2023) e sendo implementado automaticamente nos simuladores, como o Aspen Plus[®], foi determinado que, para não ocorrer o fenômeno de inundação na coluna absorvedora, a velocidade de carga do gás deve ser no máximo 80% da velocidade do gás no ponto de inundação. Assim, de acordo com a Equação 12 já mencionada no item 2.3.2: $U_{G,Lo}$ deve ser menor que $0,8U_{G,Fl}$.

Assim, como mostra a Figura 25, o ponto de inundação foi analisado de acordo com a velocidade de carga para cada valor da razão L/V, diante da condição limite de 80% da velocidade no ponto de inundação. Vale ressaltar que esse fenômeno não foi abordado nos modelos de transferência de massa adotados neste trabalho (Onda, Bravo-Fair e Billet), já que depende diretamente das propriedades do recheio e das condições de vazão.

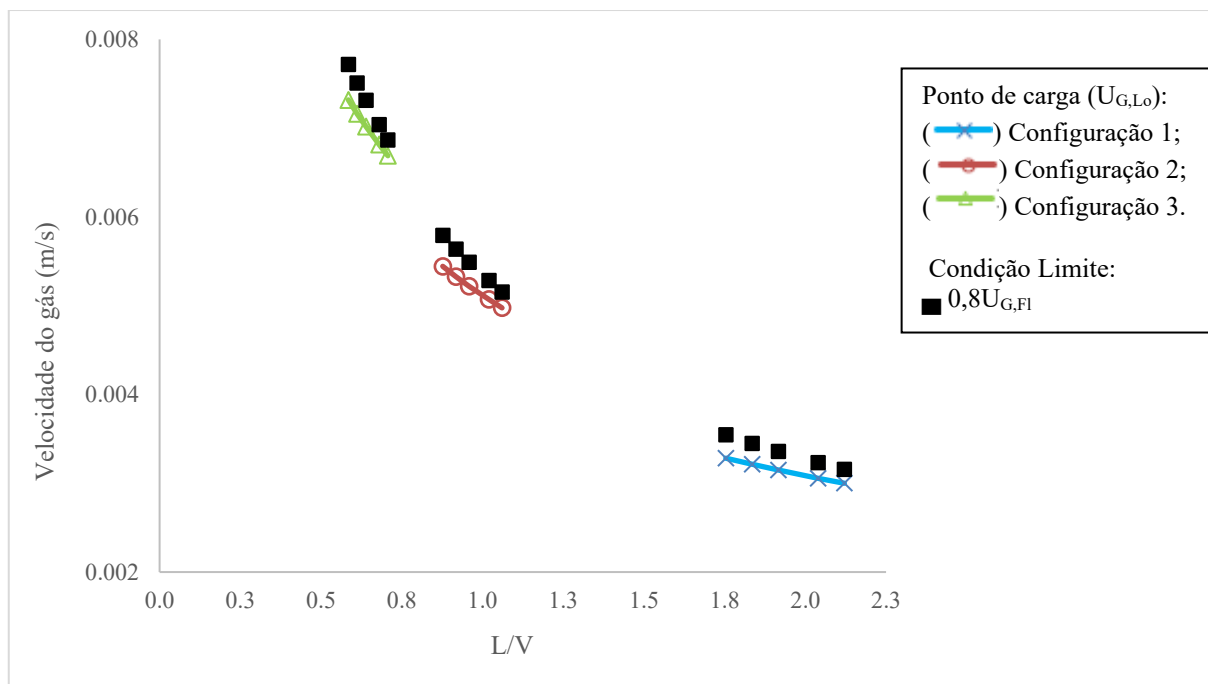


Figura 25 - Ponto de inundação em relação ao limite operacional para as três configurações.

Ao analisar a Figura 25, foi possível perceber preliminarmente que as curvas das velocidades de carga para todas as configurações de vazões ficaram ligeiramente abaixo do limite operacional de 80%, expressando assim uma concordância com a análise experimental da coluna, já que houve ausência de inundação em toda a faixa de vazão trabalhada. Além disso, foi possível perceber o aumento da inclinação das curvas de carga diante do aumento da vazão de gás.

Observou-se ainda que o aumento da vazão de gás (menor razão L/V) aproximou, ligeiramente, o sistema do limite operacional da coluna. Isso ocorre porque, quanto maior a velocidade do gás, mais intenso se torna o arraste das gotas de líquido, reduzindo a eficiência da transferência de massa entre as fases e aumentando o risco de inundação devido à formação de espuma.

4.5 Fração mássica de propanona absorvida na água

A fração mássica absorvida representa a proporção mássica de um componente específico que é removida da fase gasosa e transferida para a fase líquida ao longo da coluna. A determinação da fração absorvida foi essencial para associar a capacidade de absorção diante das três configurações de vazões utilizadas, sendo que as simuladas realizadas com o modelo de equilíbrio e com a modelagem *rate-based* (RB) foram comparadas com as medições experimentais, para cada uma das configurações.

As Figuras 30, 31 e 32 representam, respectivamente, a comparação das frações mássicas medidas de acordo com a vazão mássica de acetona de 0,38 g/min, 0,62 g/min e 0,85 g/min, sendo estas vazões e frações experimentais baseadas no trabalho de Barbosa e Góis (2024). É relevante destacar que todos os gráficos foram avaliados dentro de um mesmo intervalo de escala, sendo a abscissa de 860 a 1040 g/min e a ordenada de 2×10^{-4} a 1×10^{-3} , com o intuito de facilitar, visualmente, a comparação da fração mássica

absorvida entre as três configurações de vazões.

Nas figuras, foram apresentadas o valor da fração mássica de acetona absorvida (X_n) a partir da utilização da modelagem de equilíbrio (EQ) de acordo com a variação do número de estágios teóricos (2 a 4), sendo seus respectivos termos mencionados como “EQ. Estágio 2”, “EQ. Estágio 3” e “EQ. Estágio 4”. Além disso, também foram utilizados os três modelos *rate-based*: Onda RB (1968), Bravo-Fair RB (1982) e Billet RB (1993), sendo seus respectivos dados abordados como o valor de um único estágio, ou seja, foi considerado apenas um valor médio que representa uma coluna com estágios teóricos entre 2 e 4.

Assim, para modelagem *rate-based*, foi abordado apenas um valor de fração mássica absorvida que representa todos os estágios (entre 2 e 4) e não um valor para cada um dos estágios, já que não houve variação significativa, diferentemente da modelagem de equilíbrio, em que foi significativo um valor de fração mássica absorvida para cada estágio. Esta variação significativa para o modelo de equilíbrio é demonstrada na Figura 26, e a variação insignificativa da fração mássica para os modelos *rate-based* de Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993) é ilustrada a partir da sobreposição gráfica, respectivamente, nas Figuras 27, 28 e 29. Vale ressaltar que esses efeitos foram mostrados apenas para configuração de vazão 1 a título de compreensão visual, mas também foram observados os mesmos efeitos para configurações de vazão 2 e 3.

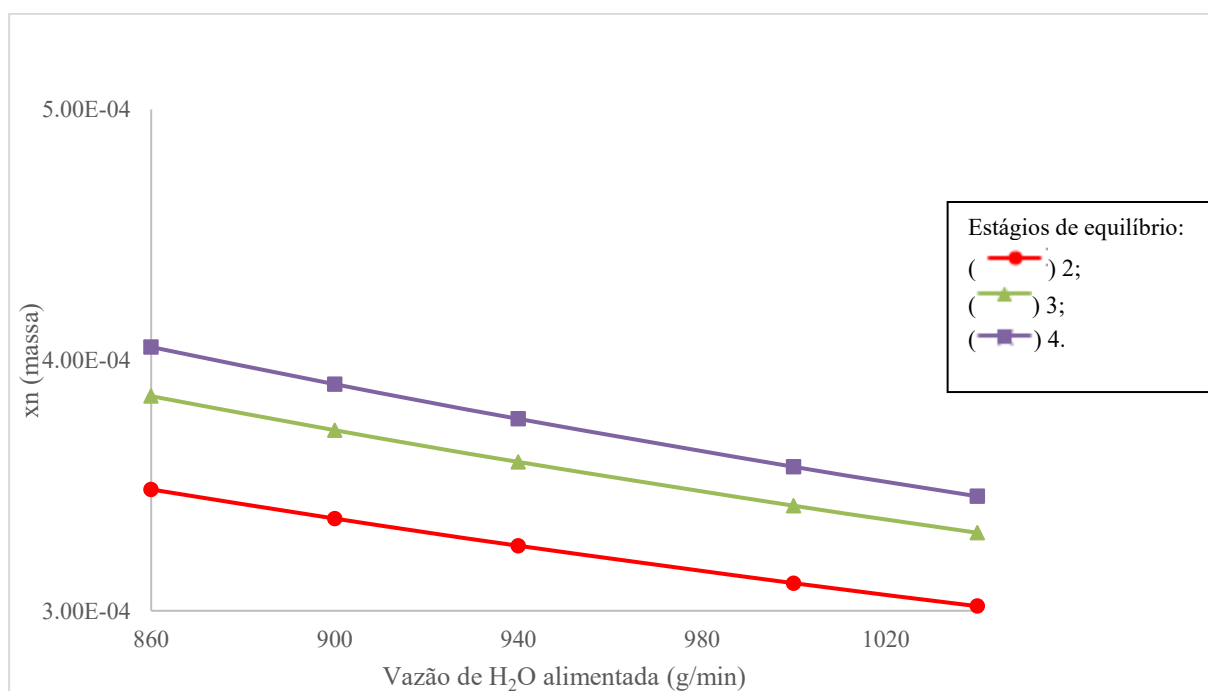


Figura 26 - Fração mássica significativa de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem de equilíbrio da configuração de vazão 1.

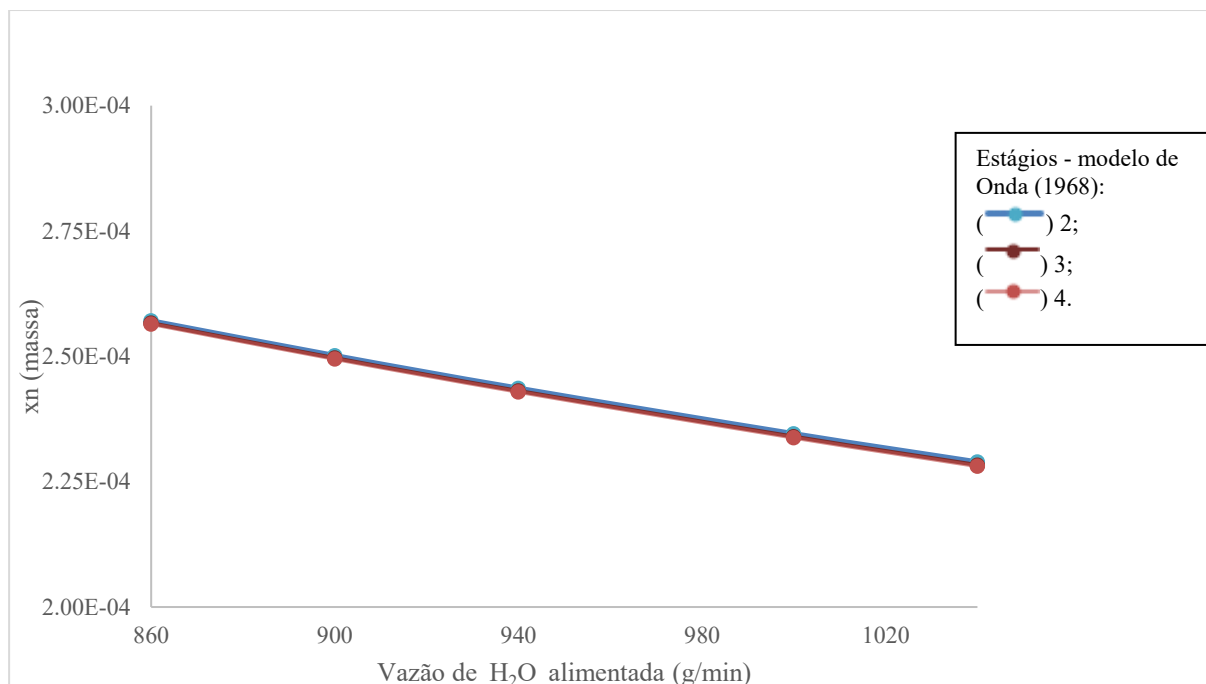


Figura 27 - Fração mássica contínua de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem rate-based de Onda (1968) da configuração de vazão 1.

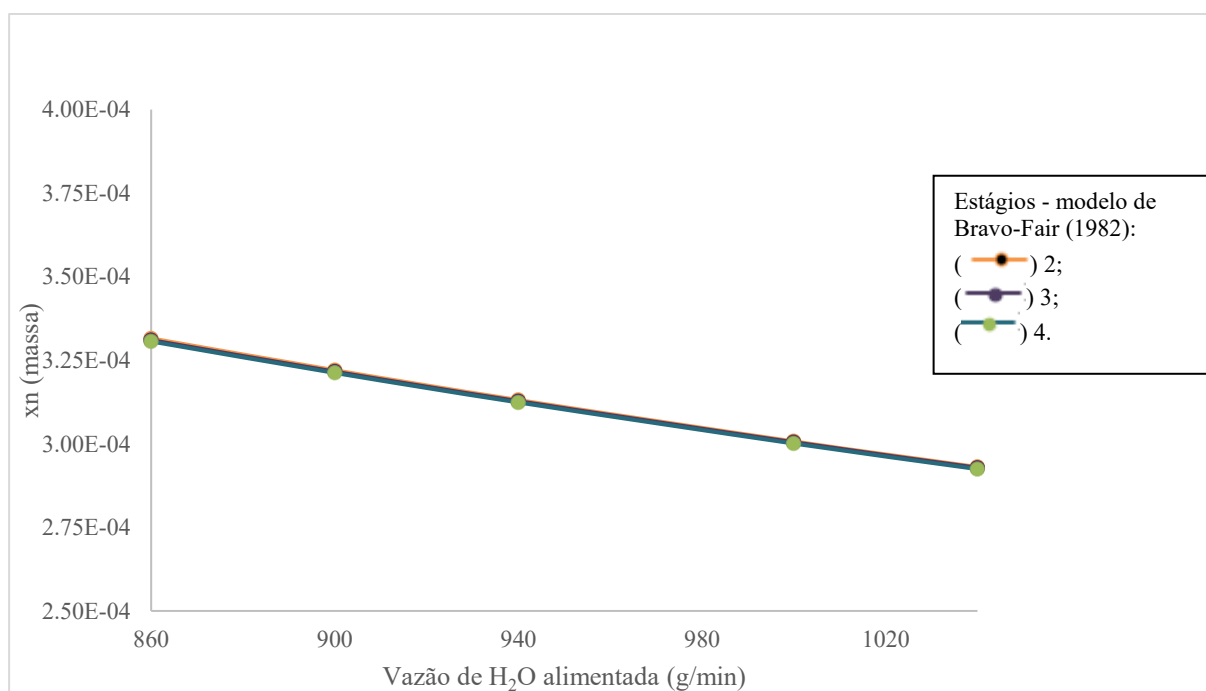


Figura 28 - Fração mássica contínua de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem rate-based de Bravo-Fair (1982) da configuração de vazão 1.

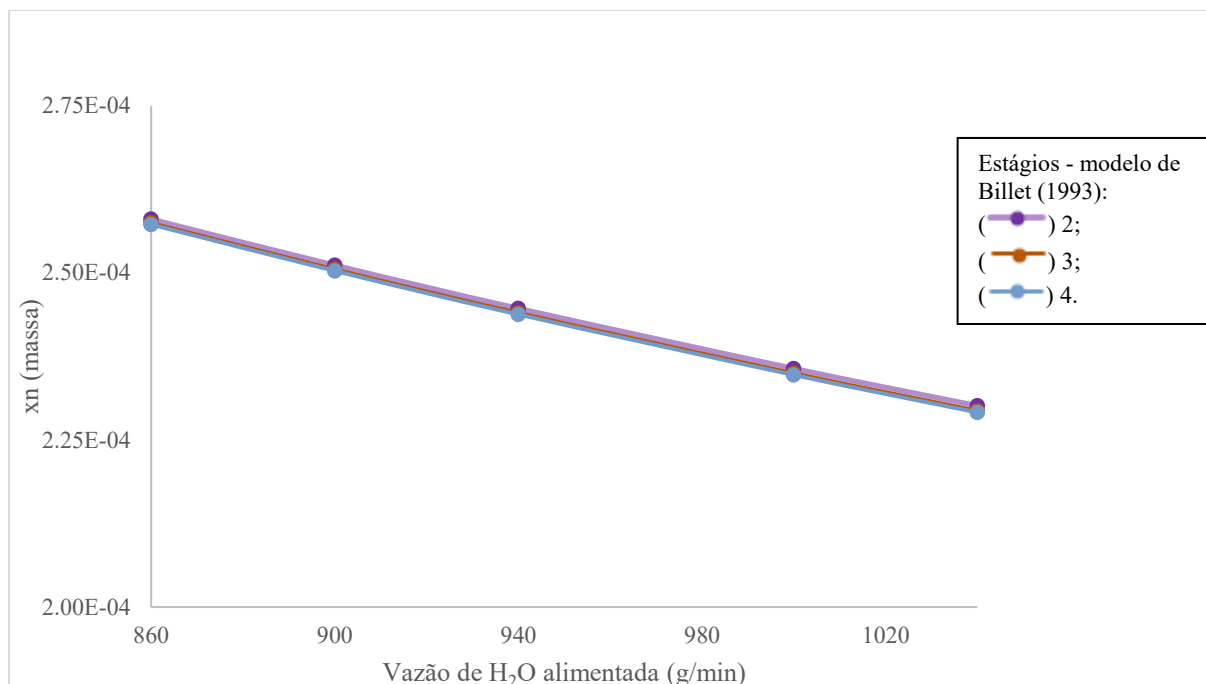


Figura 29 - Fração mássica contínua de acetona em relação aos estágios teóricos para a modelagem rate-based de Billet (1993) da configuração de vazão 1.

Sintetizando-se os efeitos acima em um só gráfico, ao analisar a Figura 30, a qual se trata da baixa vazão de gás (0,38 g/min), foi possível determinar que tanto para a modelagem de equilíbrio quanto para os três modelos *rate-based* (Onda, Bravo-Fair e Billet), as frações absorvidas de acetona apresentaram uma pequena redução com o aumento da vazão de solvente. Esse comportamento pode estar atribuído a fatores hidrodinâmicos, como a proximidade de inundação, que comprometem a eficiência da transferência de massa, uma vez que, com o aumento da vazão do solvente, a corrente líquida passa mais rapidamente pela coluna, diminuindo o tempo de contato entre as fases, a concentração de acetona ao longo da coluna e, conseqüentemente, a capacidade de absorção (Lima et al., 2021; Wankat, 2017). Além disso, os resultados dos modelos baseados na transferência de massa de Onda (1968) e Billet (1993) são bem semelhantes (sobreposição gráfica) e se mais aproximam, sem muitos desvios, dos dados experimentais para esta configuração.

Com base em Heymes et al. (2006), as abordagens de Onda (1968) e Billet (1993) são semelhantes em termos de modelagem, mas a forma das equações difere. A justificativa dessa semelhança deve-se ao fato de ambos os modelos associarem a área interfacial molhada às propriedades físico-químicas do sistema, além de determinar e deduzir os coeficientes de transferência de massa do gás e do líquido a partir, respectivamente, da velocidade do gás e do líquido. No trabalho de Abedi et al. (2021), para uma condensadora, foi possível ver similaridade dos modelos de Onda (1968) e Billet (1993) para os coeficientes de transferência de massa.

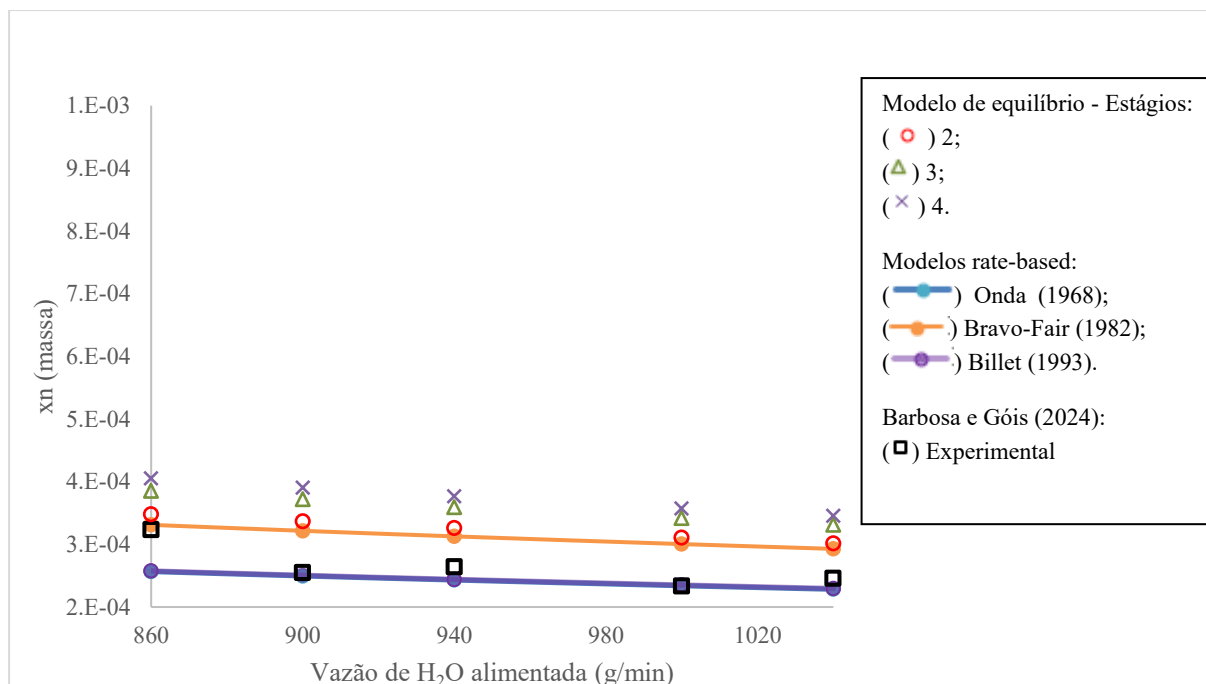


Figura 30 - Frações mássicas de acetona para configuração 1 (0,38 g/min de acetona).

Para essa configuração 1 de baixa vazão de gás (0,38 g/min de acetona), foi possível notar que, de modo geral, para frações mássicas de acetona absorvida obtidas dos modelos simulados, a modelagem de *rate-based* obteve uma melhor adequação em relação à de equilíbrio. Ademais, para vazões de água superiores a 900 g/min, as abordagens de Onda (1968) e de Billet (1993) obtiveram melhores ajustes e resultados semelhantes entre si, sendo que esta equivalência dos modelos já foi explicada anteriormente.

Ao observar a Figura 31, a qual se trata da vazão de gás intermediária (0,62 g/min de acetona), foi possível determinar novamente que as frações absorvidas sofreram uma pequena redução com o aumento da vazão de solvente, tanto para a modelagem de equilíbrio (EQ) quanto para os três modelos *rate-based*, sendo esse comportamento já justificado anteriormente. Nesse caso, os modelos baseados na transferência de massa de Onda (1968) e Billet (1993) ainda são bem próximos, porém o modelo de equilíbrio é o que melhor representou os dados experimentais para esta configuração.

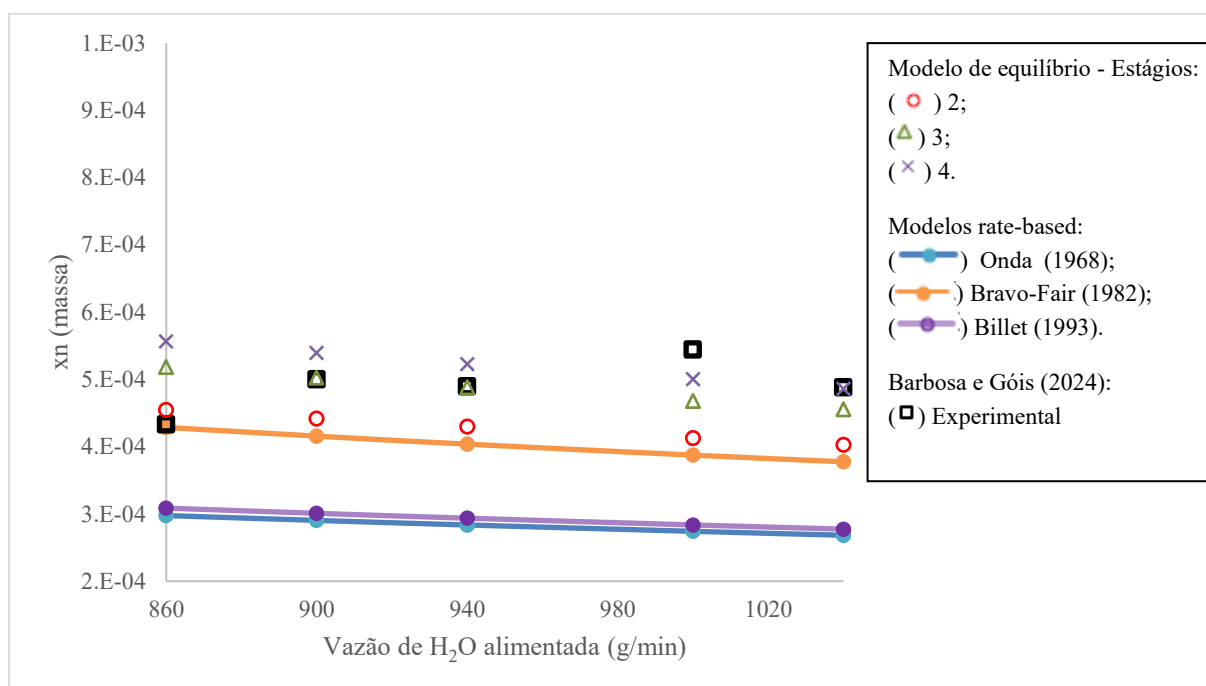


Figura 31 - Frações mássicas de acetona para configuração 2 (0,62 g/min de acetona).

Para a configuração 2, da vazão intermediária de gás, foi possível notar que, de modo geral, para frações mássicas de acetona absorvida obtidas dos modelos simulados, a modelagem de equilíbrio obteve uma melhor adequação em relação à de *rate-based*. Ademais, ao analisar apenas a modelagem de equilíbrio, o estágio 2 apresentou melhor ajuste na vazão de 860 g/min, o estágio 3, na faixa de 900 a 940 g/min, e o estágio 4, para vazões superiores a 940 g/min.

Em baixas vazões de solvente, este possui menor capacidade de arraste de acetona, porém maior tempo de residência, permitindo que o equilíbrio seja alcançado mais facilmente em estágios menores (segundo estágio), onde a concentração de acetona ainda é alta. Por outro lado, em vazões elevadas de solvente, são necessários mais estágios (quarto estágio) para compensar o tempo de contato reduzido entre as fases, garantindo a eficiência do processo (Ahmed; Hameed, 2018).

Investigando a Figura 32, a qual se trata da alta vazão de gás (0,85 g/min de acetona), foi possível determinar novamente que as frações absorvidas sofreram uma pequena redução com o aumento da vazão de solvente para todos os modelos. Nesse caso, o modelo com melhor ajuste foi o de equilíbrio, porém apresentou alguns desvios significativos em relação aos dados experimentais. Vale ressaltar que esses desvios para alta vazão de gás podem estar associados aos erros contidos nas medições laboratoriais ou à proximidade com a zona de inundação, por isso não há uma representação tão fidedigna da simulação.

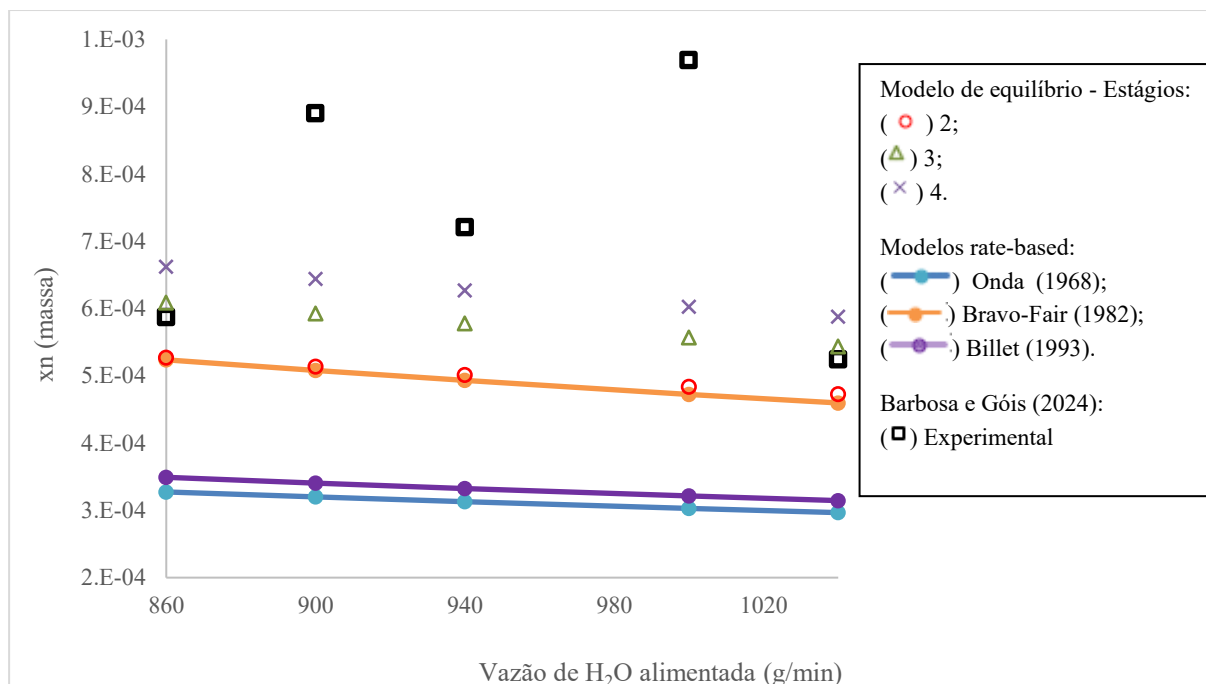


Figura 32 - Frações mássicas de acetona para configuração 3 (0,85 g/min de acetona).

Para esta configuração 3 (elevada vazão de gás), observou-se que, de modo geral, para frações mássicas de acetona absorvidas obtidas dos modelos simulados, a modelagem de equilíbrio obteve uma melhor adequação em relação à de *rate-based*. Ademais, ao analisar apenas a modelagem de equilíbrio, o estágio 3 apresentou melhor ajuste na vazão de 860 g/min e 1040 g/min, e o estágio 4, para as demais vazões.

De maneira geral, foi possível determinar que, ao comparar todas as figuras acima para as três configurações, o aumento da vazão de gás foi associado a maiores frações mássicas de acetona absorvida na água e foi observada uma maior divergência quando comparados os modelos estabelecidos entre si. Além disso, a baixa e intermediária vazão de gás foi representada com pequenos desvios entre os modelos, porém a alta vazão de gás não foi representada adequadamente pelos modelos *rate-based*, provavelmente devido à proximidade com a zona de inundação. Vale enfatizar que os dados experimentais são reais e baseados nas limitações da transferência de massa, então deveriam ser bem representados pelos modelos *rate-based*. Porém, esta comparação não é tão efetiva ao relacionar as frações absorvidas quanto ao comparar os coeficientes volumétricos de transferência de massa da fase líquida ($K_L a$), como será mostrado posteriormente.

Foi possível analisar que a fração mássica de acetona absorvida foi maior para a modelagem de equilíbrio em relação à baseada na taxa de transferência de massa. Com base em Almoslh et al. (2020), o equilíbrio não leva em consideração o arraste das gotas de líquido no vapor, este que está associado com fenômenos de *holdup*, inundação e que afetam a eficiência da separação e tempo de contato das fases, diferentemente dos modelos *rate-based*, que além de considerar todos esses quesitos considera também a

área interfacial das fases e a espessura dos filmes (com ou sem reação química). Nesse presente trabalho, ainda é viável comparar com o modelo de equilíbrio, pois o sistema não possui reação, então esse modelo poderia ser aplicado.

Analisando o comportamento *rate-based*, segundo Hemmati et al. (2019), o modelo de Onda (1968), apesar de usar a mesma expressão para coeficiente de transferência de massa de Bravo-Fair (1982), expressa uma grande diferença nos gráficos explicada pelo fato do modelo de Onda utilizar o número de Reynolds do líquido baseado na área superficial molhada, enquanto o modelo de Bravo-Fair utiliza o número de Reynolds do líquido baseado na área superficial efetiva, sendo esta a mais significativa. Já a divergência dos modelos de Onda e Billet com os dados experimentais não se deve à semelhança entre as equações, mas à funcionalidade dos modelos.

O modelo de Onda, apesar de ser usado para recheios randômicos, como é no caso desse trabalho, não leva muita especificidade na área de contato das fases e o modelo de Billet também não apresenta muita adequação, pois foi estabelecido para todos os tipos de recheios (modelo mais generalizado), levando em consideração o parâmetro do coeficiente de transferência de massa da fase líquida baseada na forma e estrutura do recheio (C_L). Assim, os modelos de Onda e Billet foram próximos entre si, por ambos apresentarem baixas frações absorvidas.

4.6 Área interfacial para transferência de massa

Para determinar o desempenho da transferência de massa, foi analisada a correlação da área interfacial para cada um dos modelos *rate-based* em foco neste trabalho, sendo que seus respectivos dados foram gerados apenas com as simulações, não havendo dados experimentais para validação.

Assim, diante das Figuras 33, 34 e 35, foi possível determinar esta área interfacial diante das respectivas configurações de vazões de gás de 0,38 g/min, 0,62 g/min e 0,85 g/min (configurações 1, 2 e 3), variando a vazão de água alimentada e utilizando-se os três modelos de transferência de massa já adotados e descritos anteriormente: Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993).

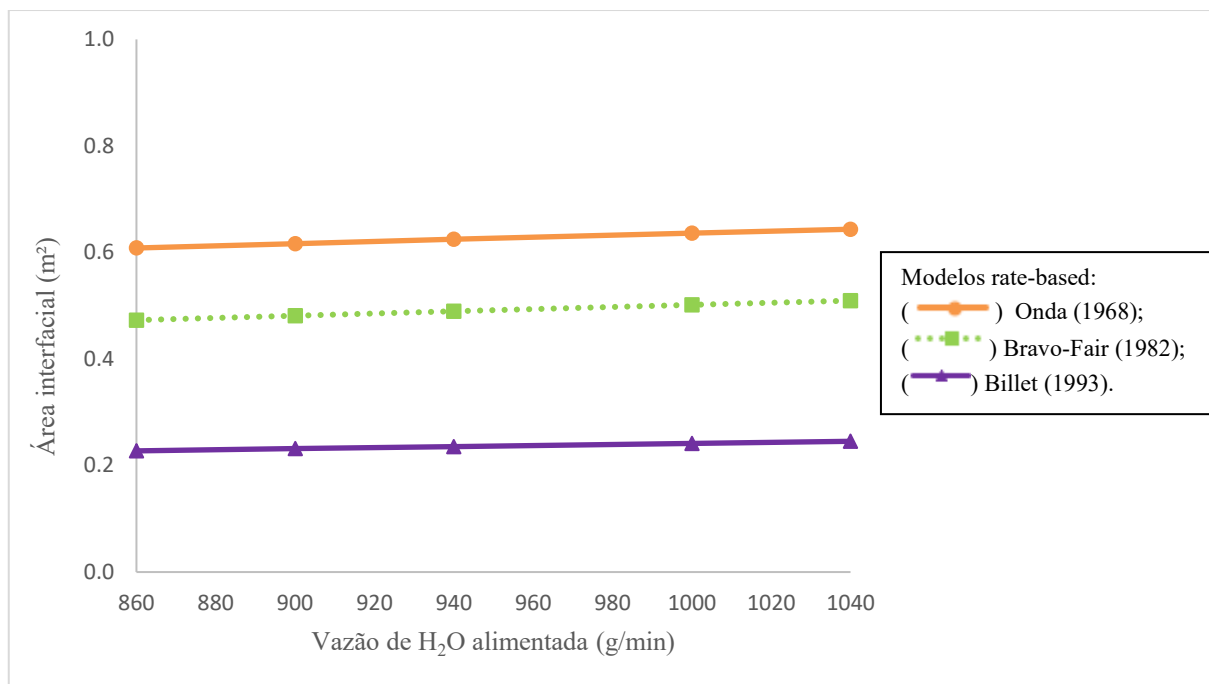


Figura 33 - Área interfacial para a configuração 1 (0,38 g/min de acetona).

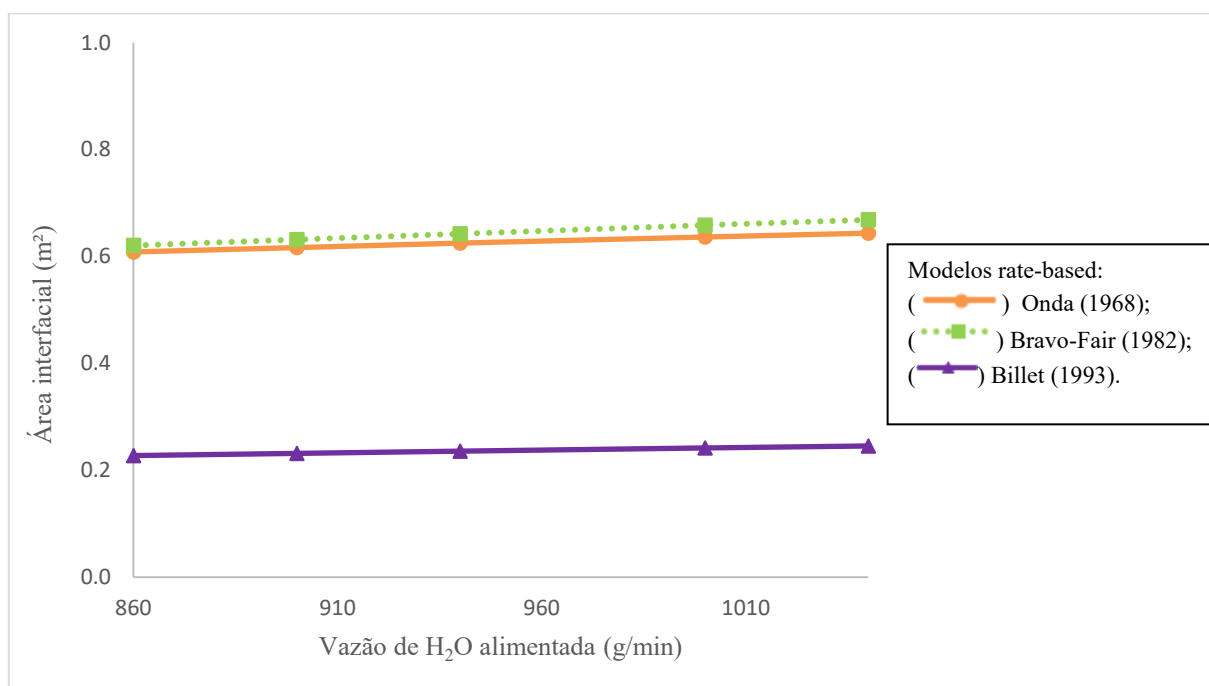


Figura 34 - Área interfacial para a configuração 2 (0,62 g/min de acetona).

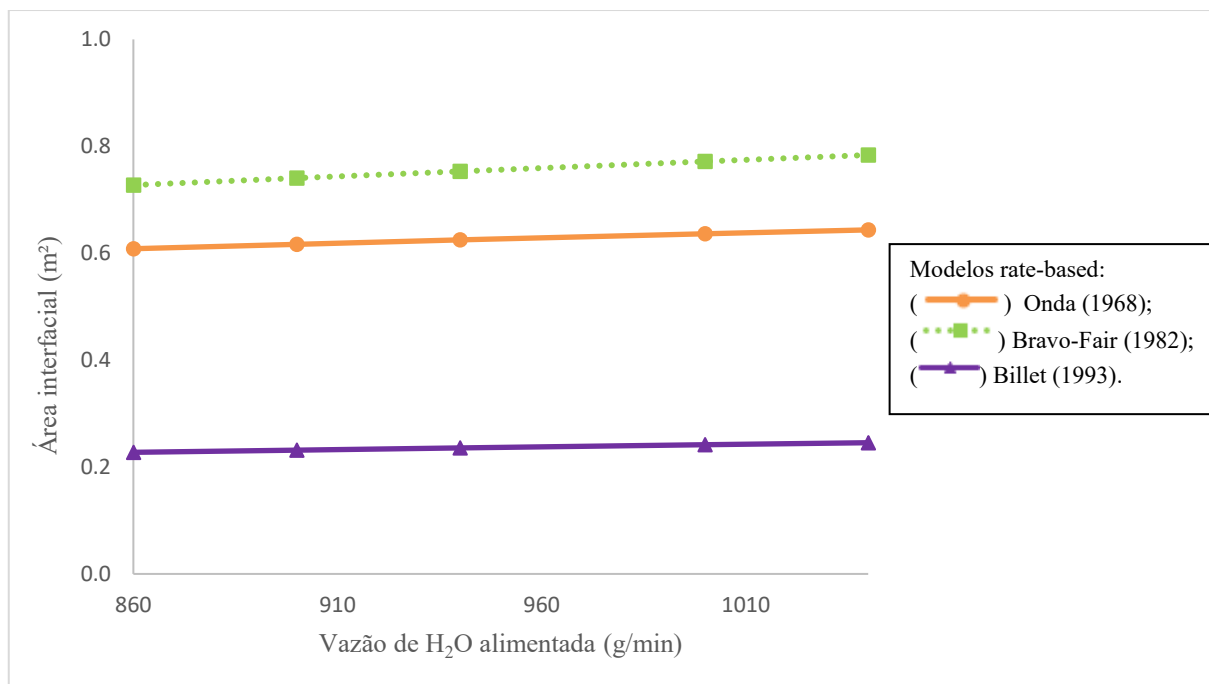


Figura 35 - Área interfacial para a configuração 3 (0,85 g/min de acetona).

A partir da análise das figuras acima, foi possível constatar que a área interfacial simulada para os três modelos de transferência de massa (Onda, Bravo-fair e Billet) apresentou um leve aumento diante de uma maior quantidade de água alimentada. Para todos os três modelos, essa área interfacial total de transferência de massa dependeu diretamente da área molhada ou efetiva, a qual está associada diretamente à velocidade superficial da fase líquida, esta que determina as distribuições ao longo do recheio e o tempo de residência entre as fases. Essas correlações entre a área molhada e a área interfacial podem ser observadas nas Equações 3, 6 e 7 já apresentadas no tópico 2.2.1.

Por isso, analisando os gráficos das três figuras acima (configurações 1-3), percebe-se que, para os modelos de Onda e Billet, as áreas interfaciais não variaram com a vazão de gás, já que as respectivas correlações de área interfacial são independentes da velocidade do gás. Porém, em relação ao modelo de Bravo-Fair, este foi o único em que a correlação para a área interfacial apresentou uma dependência direta com as configurações de vazões de gás, já que esta considera tanto a velocidade superficial da fase líquida como também da fase de vapor.

A partir dos resultados obtidos desta análise, foi possível perceber também que, para a baixa configuração de gás 1, a área interfacial para o modelo de Bravo-Fair foi inferior ao modelo de Onda e superior ao modelo de Billet. Para a configuração intermediária de gás 2, a área interfacial para o modelo de Bravo-Fair foi equivalente ao modelo de Onda e superior ao modelo de Billet. Já para a maior configuração de vazão de gás 3, a área interfacial para o modelo de Bravo-Fair foi superior aos outros dois modelos de transferência de massa.

Sendo assim, foi notado que o modelo de Bravo-Fair foi mais minucioso, pois incluiu ambas as

fases e apresentou uma maior área interfacial de transferência de massa, para a maior vazão de gás trabalhada.

4.7 Coeficiente volumétrico de transferência de massa ($K_L a$)

Para o controle e a otimização dos processos de transferência de massa, como aeração ou outros processos de separação, o coeficiente volumétrico de transferência de massa é uma medida importante para quantificar a taxa na qual um componente específico é transferido entre a fase gasosa e a fase líquida dentro de uma seção de recheio. Esse coeficiente é calculado a partir do produto entre o coeficiente de transferência de massa do lado do líquido (K_L) e a área específica de transferência (a) de um determinado tipo de recheio. No presente estudo, priorizou-se a análise do coeficiente da fase líquida, uma vez que o gás (ar) utilizado apresentou comportamento inerte, havendo, assim, maior influência da fase líquida na solubilidade da acetona.

Vale enfatizar que, no simulador Aspen Plus[®], o modelo de Wilke-Chang foi o mais adequado e adotado para o cálculo da difusividade do lado do líquido em soluções diluídas (Wilke; Chang, 1955). Assim, neste trabalho foi feita a validação deste coeficiente com os dados experimentais, diante das três modelagens de transferência de massa *rate-based* simuladas: Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993), como é mostrada pelas Figuras 36, 37 e 38, as quais são, respectivamente, para as configurações de vazões de gás de 0,38 g/min, 0,62 g/min e 0,85 g/min.

Melhor dizendo, nas figuras são comparados os dados do coeficiente volumétrico de transferência de massa dos três modelos, obtidos por simulações no Aspen Plus, com os dados experimentais obtidos em Barbosa e Góis (2024).

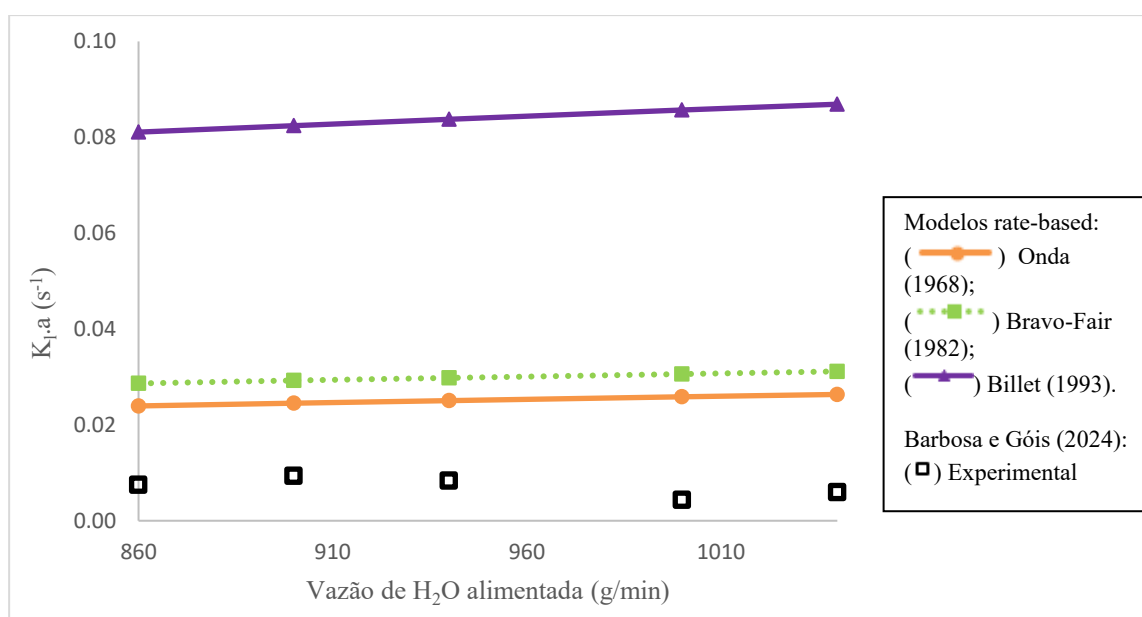


Figura 36 - Coeficiente volumétrico de transferência de massa para a configuração 1 (0,38 g/min de acetona).

Para esta configuração 1 de baixa vazão de gás (0,38 g/min de acetona), foi possível notar que, para todas as vazões de água entre a faixa de 860 e 1040 g/min, o modelo de Onda (1968) obteve uma melhor adequação em relação ao modelo de Bravo-Fair (1982), este que ainda obteve melhores ajustes do que o modelo de Billet (1993). Porém, de forma geral, todos os três modelos apresentaram desvios consideravelmente elevados em relação aos pontos experimentais.

A Figura 37 expressa os coeficientes volumétricos de transferência de massa para a configuração 2 (vazão intermediária de gás, igual a 0,62 g/min de acetona). Foi possível estabelecer que, para todas as vazões de água entre a faixa de 860 e 1040 g/min, os modelos de Bravo-Fair (1982) e Onda (1968) obtiveram uma melhor exatidão em relação ao modelo de Billet (1993).

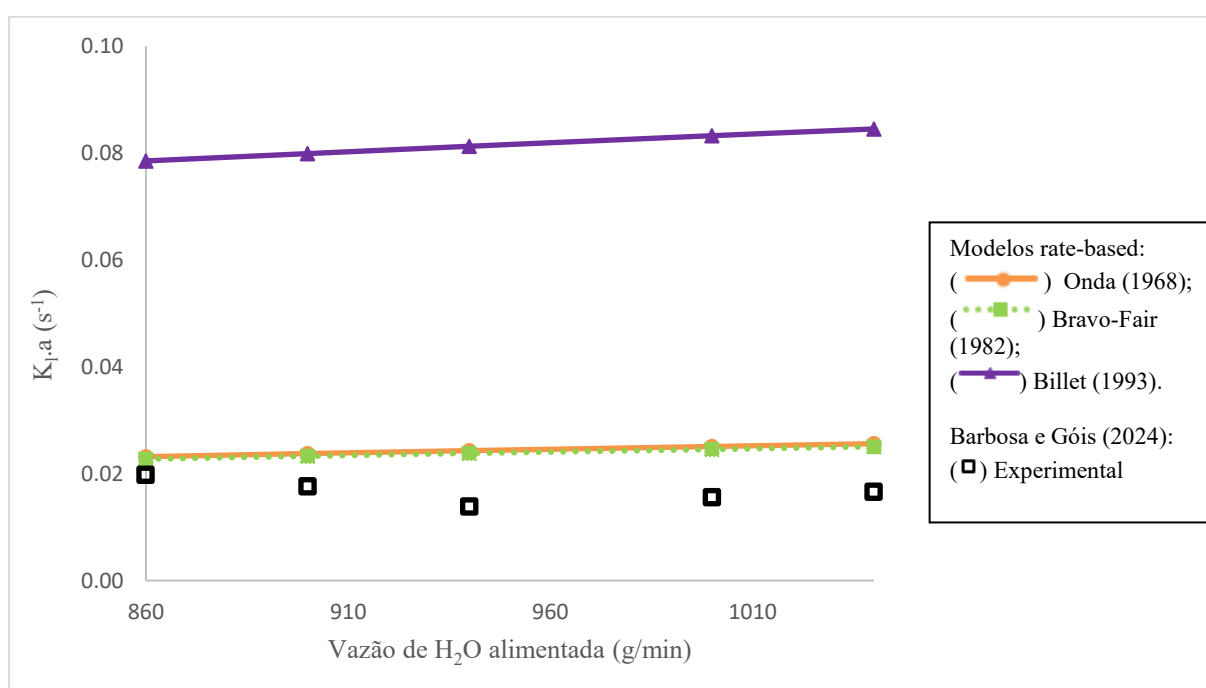


Figura 37 - Coeficiente volumétrico de transferência de massa para a configuração 2 (0,62 g/min de acetona).

A Figura 38 expressa os coeficientes volumétricos de transferência de massa para a configuração 3 (vazão elevada de gás, igual a 0,85 g/min de acetona). Foi possível notar que, para todas as vazões de água entre a faixa de 860 e 1040 g/min, o modelo de Bravo-Fair (1982) foi significativamente melhor em relação ao modelo de Onda (1968), este que obteve melhores ajustes em relação ao modelo de Billet (1993). Vale ressaltar que o modelo de Bravo-Fair apresentou um menor erro (cerca de 2%) em relação aos dados experimentais para a vazão de água de 1000 g/min.

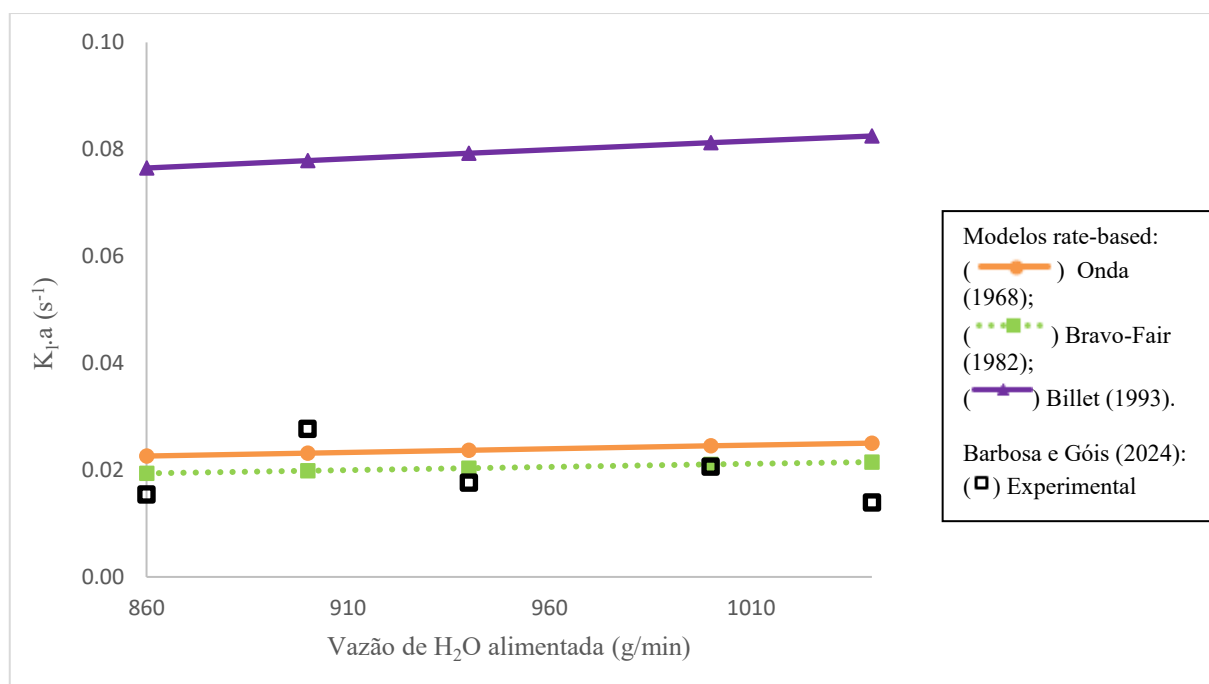


Figura 38 - Coeficiente volumétrico de transferência de massa para a configuração 3 (0,85 g/min de acetona).

Diante dos gráficos apresentados, pôde-se inicialmente perceber que, para todos os modelos simulados, o coeficiente volumétrico de transferência de massa ($K_{L,a}$) sofreu um ligeiro aumento ao elevar a quantidade de água alimentada. Esse comportamento está associado à maior disponibilidade de solvente, o que favorece a transferência de massa entre as fases. O aumento desse coeficiente indica uma melhor distribuição do líquido e da área interfacial, potencializando a eficiência do processo. Porém, como já foi observado anteriormente, vazões elevadas de água reduzem a fração de acetona absorvida, devido ao menor tempo de contato entre as fases e à diminuição da concentração de acetona ao longo da coluna, comprometendo a absorção. Portanto, o aumento da vazão de solvente mostra-se vantajoso apenas até um limite operacional (Wang, 2015).

Observou-se que, no trabalho de Linek, Moucha e Rejl (2001), utilizando dados experimentais e o modelo de Billet, o $K_{L,a}$ aumentou diante do incremento da velocidade do líquido. Além disso, apresentou valores de $K_{L,a}$ entre $0,001 s^{-1}$ e $0,05 s^{-1}$, intervalo este semelhante ao identificado na presente pesquisa, reforçando assim, a consistência dos resultados

Ao relacionar os resultados para as diferentes configurações de gás, foi possível perceber que somente o $K_{L,a}$ para o modelo de Bravo-Fair foi variado, já que apenas sua área interfacial de transferência de massa varia significativamente com a vazão de gás, diferentemente dos modelos de Onda e Billet. Além disso, somente o modelo de Billet foi o mais divergente em relação aos dados experimentais, e para baixas vazões de gás (configuração 1) nenhum dos modelos conseguiu validar com adequação os dados experimentais.

O modelo de Bravo-Fair foi o mais adequado para representar os dados experimentais, mas especificamente para a alta configuração de vazão de gás (configuração 3), e como foi visto no tópico anterior, foi este modelo que apresentou uma melhor área interfacial para transferência de massa, sendo o mais flexível diante das vazões de gás.

Como já evidenciado nos tópicos anteriores e visto no trabalho de Hemmati et al. (2019), o modelo de Bravo-Fair se sobressai em relação aos modelos de Onda e Billet por sua correlação da área interfacial efetiva incluir mais variáveis como, as taxas de gás ao longo da coluna empacotada, as tensões superficiais, a superfície específica do tipo de recheio e a má distribuição de líquido. Em outros trabalhos, como em Hemmati et al. (2018), a modelagem de Onda e Billet se sobressaíram ao modelo de Bravo-Fair. Assim, é possível afirmar que a melhor adequação do modelo vai depender dos diferentes tipos, gerações e tamanhos de recheios.

Nos resultados simulados do presente estudo, foi visto que a modelagem não obteve um bom ajuste para baixas vazões de gás (configuração 1), enquanto que foi bem correspondida para altas vazões de gás (configuração 3). Essa divergência pode ser atribuída, provavelmente, ao fato de que elevadas vazões gasosas aumentam a carga de acetona no sistema, intensificando a turbulência e potencializando a transferência de massa, condições essas que estão alinhadas com as premissas adotadas nos modelos teóricos, como homogeneidade de fase (Zielinski; Hanley, 1999).

A análise abordada anteriormente também foi concluída experimentalmente e pôde ser fundamentada no trabalho de Barbosa e Góis (2024). Foi determinado que, para o coeficiente volumétrico de transferência de massa do líquido, a baixa vazão de gás (0,38 g/min) apresentou baixos valores de R^2 e a alta vazão de gás (0,85 g/min) apresentou altos valores de R^2 , indicando que o modelo empírico conseguiu melhor representar este coeficiente volumétrico do líquido para a maior vazão de gás.

Além disso, no trabalho de Barbosa e Góis (2024), foi determinado pela análise estatística que o coeficiente volumétrico de transferência de massa do líquido sofreu muito mais influência da vazão de ar do que da vazão de água. Esse comportamento também foi percebido no trabalho de Heymes et al. (2006) e no presente estudo, em que através da modelagem simulada de Bravo-Fair, o K_{La} sofreu uma influência significativa das vazões de ar (comparação entre as Figuras 36, 37 e 38) do que em relação à vazão de água (eixo das abscissas nos respectivos gráficos). O aumento da vazão de ar garantiu um aumento da carga de propanona presente (dentro do saturador), disponibilizando mais moléculas desse soluto na coluna, beneficiando assim sua transferência de massa da fase gasosa para a fase líquida.

4.8 HETP - altura equivalente a um prato teórico

Para medir a eficiência de uma coluna empacotada, foi adotado o cálculo da altura equivalente a um prato teórico (HETP - *Height Equivalent to a Theoretical Plate*), em metros. Esse cálculo depende do número de estágios da coluna, e este fator, em uma absorvedora, está associado à propriedade do

sistema, às vazões das correntes e ao tipo de recheio. Assim, não foi possível determinar valores experimentais a partir da literatura diante das mesmas condições utilizadas no presente estudo.

Então, com base em Fernandes (2011), a referência adotada foi o cálculo da HETP a partir da razão entre a altura da seção de recheio (H) e o número de estágios teórico (NETS) como já evidenciado previamente pela Equação 16. Assim, a HETP de referência não dependeu da vazão de água nem de gás, mas do número de estágios teóricos, os quais são variados no presente estudo entre 2 e 4, e da altura da seção de recheio, a qual é fixa e possui valor de 0,79 m. A HETP usada como referência foi a média dos valores encontrados nessa faixa de NETS (2 - 4), como mostra a Tabela 9.

Tabela 9 - HETP de referência.

Configuração	HETP (metros)
Estágio 2	$0,79/2 = 0,395$
Estágio 4	$0,79/4 = 0,198$
Média	0,296

As Figuras 39, 40 e 41 apresentam, respectivamente, a HETP gerada para as três configurações de vazão de gás (0,38 g/min, 0,62 g/min e 0,85 g/min), sendo que em cada figura, foi analisada em relação à HETP de referência e aos três modelos de transferência de massa simulados: Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993).

Todos os gráficos foram analisados para um mesmo intervalo de escala, sendo a abscissa de 860 a 1040 g/min e a ordenada de 0 a 1, com o intuito de facilitar, visualmente, a comparação da HETP entre as três configurações de vazões. Vale ressaltar que a faixa de HETP simulada foi aceitável, tendo em vista que trabalhos como Larachi, Lévesque e Grandjean (2008) utilizaram a faixa de HETP entre 0 m e 1,2 m.

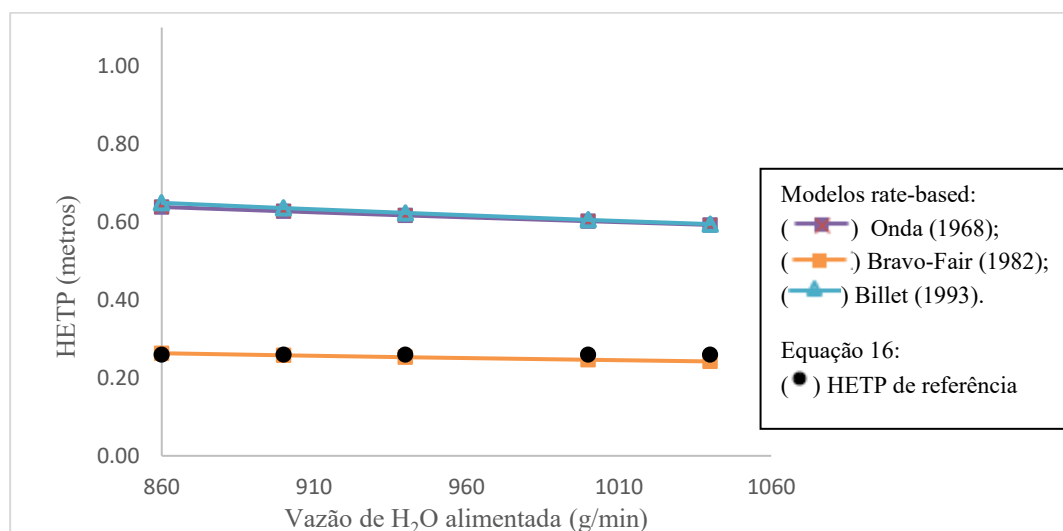


Figura 39 - HETP para configuração 1 (0,38 g/min de acetona).

Diante da Figura 39, referente à configuração 1 (baixa vazão de gás, igual a 0,38 g/min de acetona), foi possível estabelecer que, de modo geral, o modelo de Bravo-Fair apresentou melhor exatidão aos valores de referência em todas as vazões de água analisadas, com desvios significativamente menores em comparação aos outros modelos. Além disso, os menores valores de HETP indicaram uma melhor representação da absorção para o modelo de Bravo-Fair. Por outro lado, os modelos de Onda e Billet exibiram desvios elevados e próximos entre si, comportamento já discutido em seções anteriores devido às similaridades em suas premissas hidrodinâmicas.

A Figura 40 expressa a HETP para a configuração 2 (vazão intermediária de gás, igual a 0,62 g/min de acetona). Foi possível notar que o comportamento foi semelhante ao obtido para configuração 1, em que a modelagem de Bravo-Fair foi a mais adequada para representar os dados de referência. Além disso, os modelos de Onda e de Billet apresentaram desvios similares, porém mais elevados em comparação à configuração 1 de vazão de gás. Esse incremento de HETP com a vazão de gás, observado no modelo de Onda e Billet, pode estar associado à aproximação do limite de inundação e à necessidade de aumentar o número de estágios ou a altura da coluna, visando compensar a redução da eficiência hidrodinâmica.

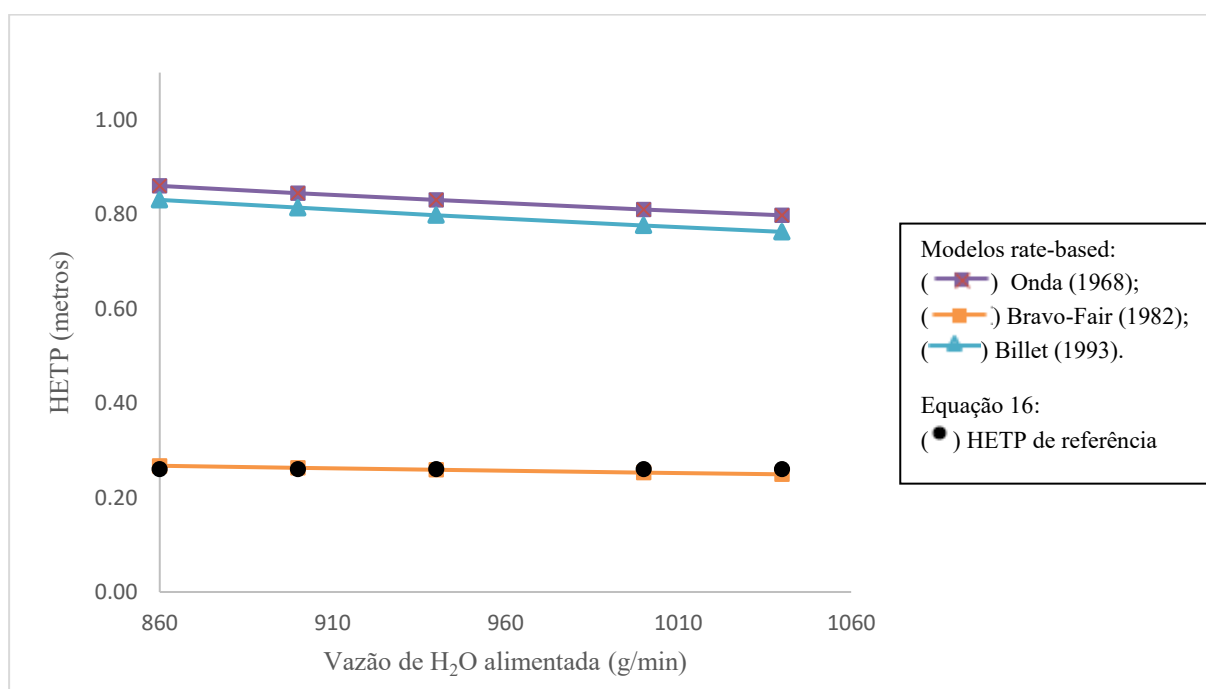


Figura 40 - HETP para configuração 2 (0,62 g/min de acetona).

A Figura 41 expressa a HETP para a configuração 3 (vazão elevada de gás, igual a 0,85 g/min de acetona). Observou-se um comportamento semelhante ao obtido pelas configurações 1 e 2, em que, mais uma vez, o modelo de Bravo-Fair foi o mais adequado e que, para os modelos de Onda e Billet, os desvios foram mais elevados do que para as configurações anteriores (maior HETP).

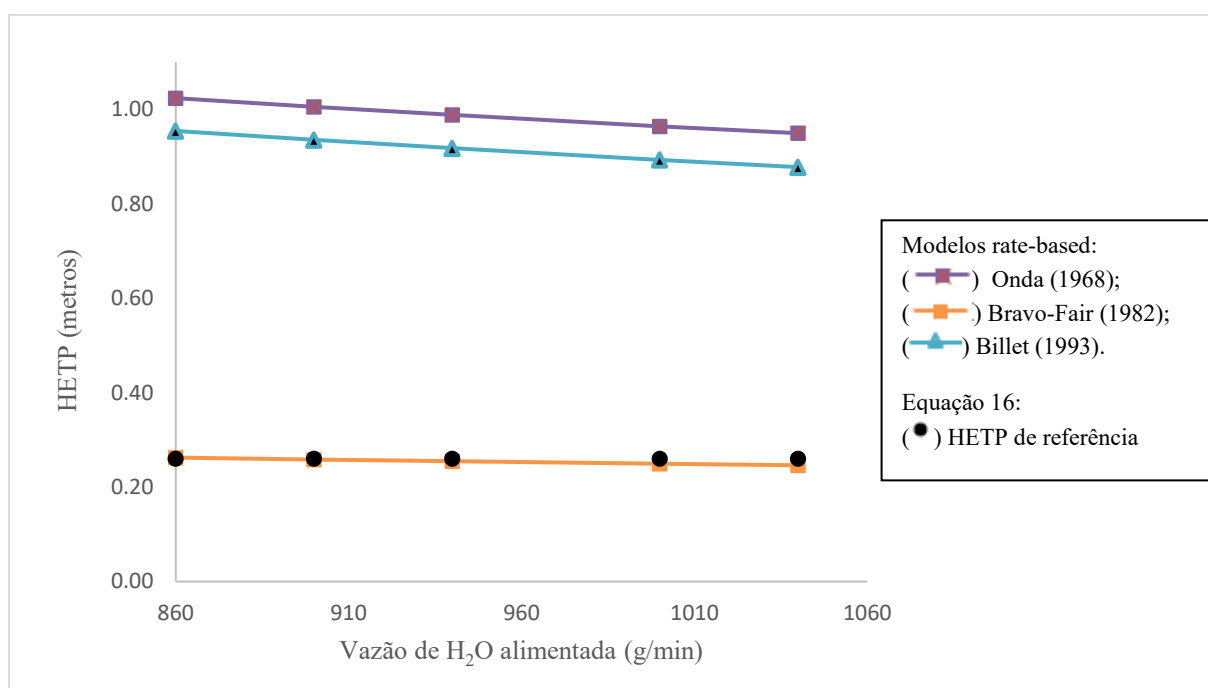


Figura 41 - HETP para configuração 3 (0,85 g/min de acetona).

Analisando todos os resultados apresentados, foi possível estabelecer que, para os modelos de Onda e Billet simulados, a HETP aumentou significativamente com o aumento da vazão de gás (variando as configurações) e aumentou ligeiramente com a redução da vazão de água, divergindo cada vez mais do valor de referência e apresentando uma menor eficiência.

Já para o modelo de Bravo-Fair simulado, a HETP não variou com a vazão de gás e apresentou uma ligeira redução com o aumento da vazão de água. Além disso, este modelo foi o que apresentou uma ótima concordância com o valor de referência e baixos valores da HETP, indicando que as fases líquida e gasosa entram em contato de forma mais eficiente, assim significando um menor tamanho da coluna e baixo custo de operação.

A adequação do modelo de Bravo-Fair em relação aos modelos de Onda e Billet, evidenciada pelo menor HETP e melhor ajuste com os dados de referência, pode ser explicada por considerar múltiplos fatores que comprometem a hidrodinâmica, conforme fundamento por Hemmati et al. (2019). Assim, a correlação da área interfacial efetiva do modelo de Bravo-Fair está relacionada com as taxas de fluxo de solvente e gás ao longo da coluna empacotada (Reynolds), depende proporcionalmente da velocidade do líquido (umedecimento do recheio) e inversamente das tensões superficiais. Assim, uma menor tensão superficial provoca gotas menores e consequentemente maior área de contato, porém se houver uma alta taxa de gás, pode arrastar essas gotas, dificultando a transferência de massa no recheio. Além disso, a correlação da área interfacial está associada à superfície específica do tipo de recheio e à má distribuição de líquido.

4.9 HETP para diferentes recheios simulados

A análise comparativa dos recheios selecionados foi feita diante do recheio de referência (Raschig) e com base na HETP de referência já abordada no tópico anterior. Assim, analisou-se a diferença da HETP diante das três configurações de vazões (1-3), a partir da razão L/V . Esta análise foi realizada no simulador para cada um dos modelos de transferência de massa já adotados neste trabalho, sendo os modelos de Onda (1968), Bravo-Fair (1982) e Billet (1993) apresentados, respectivamente, pelas Figuras 42, 43 e 44.

É importante destacar que as análises comparativas foram conduzidas de forma simplificada, uma vez que os recheios de selas de Berl e Intalox (13 mm) foram simulados com diâmetros ligeiramente superiores ao anel Raschig (10 mm). Essa diferença dimensional, embora pequena, pode influenciar os parâmetros hidrodinâmicos e a eficiência de separação (HETP).

Em todos os gráficos, a faixa da HETP foi fixada até 2 metros, com o intuito de facilitar a comparação visual entre as figuras. Vale ressaltar que foi estabelecido o recheio de referência (Raschig) por ser o predominante em todo o trabalho e na absorvedora laboratorial considerada. Além disso, também foi estabelecida a HETP de referência, a qual é uma expressão matemática, já descrita na Equação 16, utilizada como parâmetro para se comparar as demais HETP.

Para o modelo de Onda da Figura 42, todos os recheios adotados apresentaram uma divergência da HETP significativa entre si e em relação ao de referência, sendo que todos os três recheios exibiram, de forma geral, HETP elevadas em relação aos outros modelos, ou seja, todos possuíam uma baixa eficiência quando utilizado esse modelo. Analisando os recheios entre si, o de Raschig apresentou uma melhor eficiência devido ao menor HETP, já o Intalox apresentou uma pior eficiência devido ao maior HETP, comportamento este que diverge do observado na literatura.

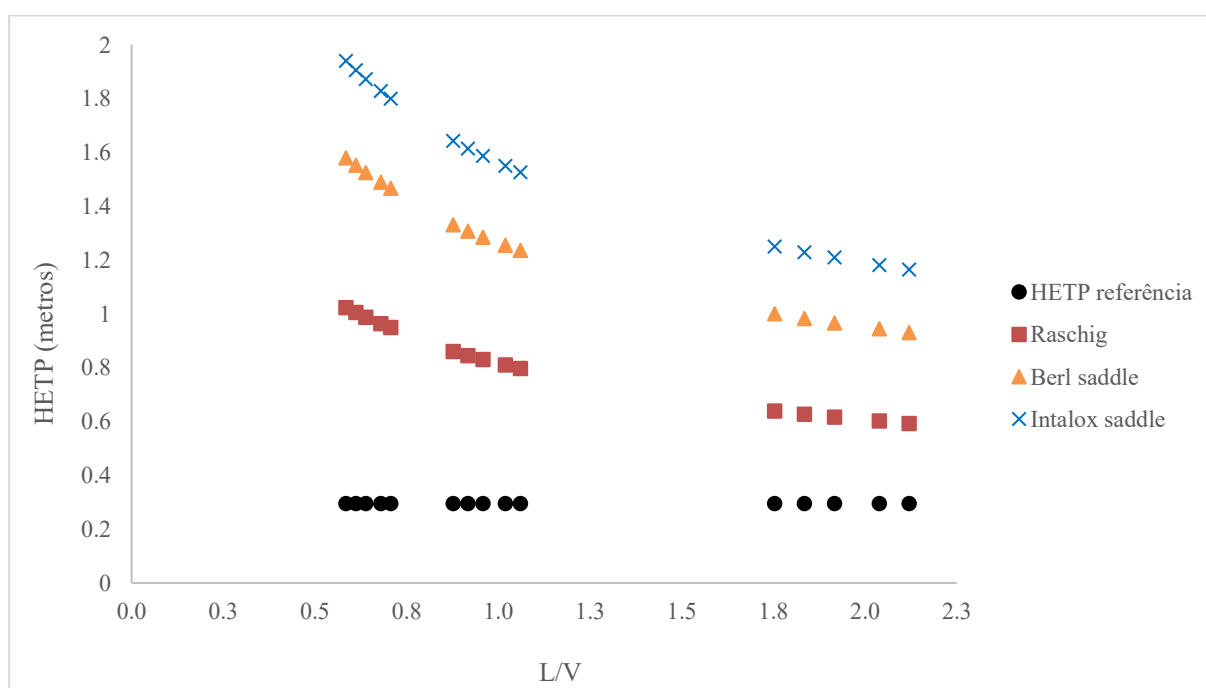


Figura 42 - HETP dos diferentes recheios selecionados para o modelo de Onda.

Além disso, percebeu-se que, diferente da HETP de referência, os três recheios apresentaram redução da HETP com o aumento da vazão de água e redução da vazão de gás (maiores valores de L/V). Esse comportamento também foi notado no trabalho de Linek, Moucha e Rejl (2001), o qual utilizou sistemas distintos e apresentou valores de HETP na faixa entre 0 m e 1,2 m. A explicação para a redução da HETP está diretamente associada à maior disponibilidade (área interfacial) de líquido para absorver acetona em altas vazões de água, melhorando a eficiência da separação. Paralelamente, a menor vazão de gás reduz o arraste de gotículas, minimizando riscos de inundação e ampliando o tempo de residência das fases, fatores esses que favorecem a eficiência do processo, conforme evidenciado por baixos valores de HETP. Do ponto de vista do processo, a redução de HETP significa uma coluna de menor tamanho e, consequentemente, um cenário mais econômico (Row; Lee, 1999).

Na Figura 43, para o modelo de Bravo-Fair, todos os recheios apresentaram um bom ajuste da HETP, sendo que o anel de Raschig apresentou uma melhor proximidade com a HETP de referência e foi o menor valor entre os recheios (melhor eficiência). Já a sela de Intalox apresentou o maior valor da HETP (menor eficiência), porém, de forma geral, todos os recheios apresentaram baixos valores, significando uma boa eficiência geral. Nesse modelo foi possível perceber uma ligeira variação da HETP dos recheios em relação somente à vazão de água, já que o coeficiente de difusividade do líquido depende do número Reynolds do líquido baseado na área superficial efetiva.

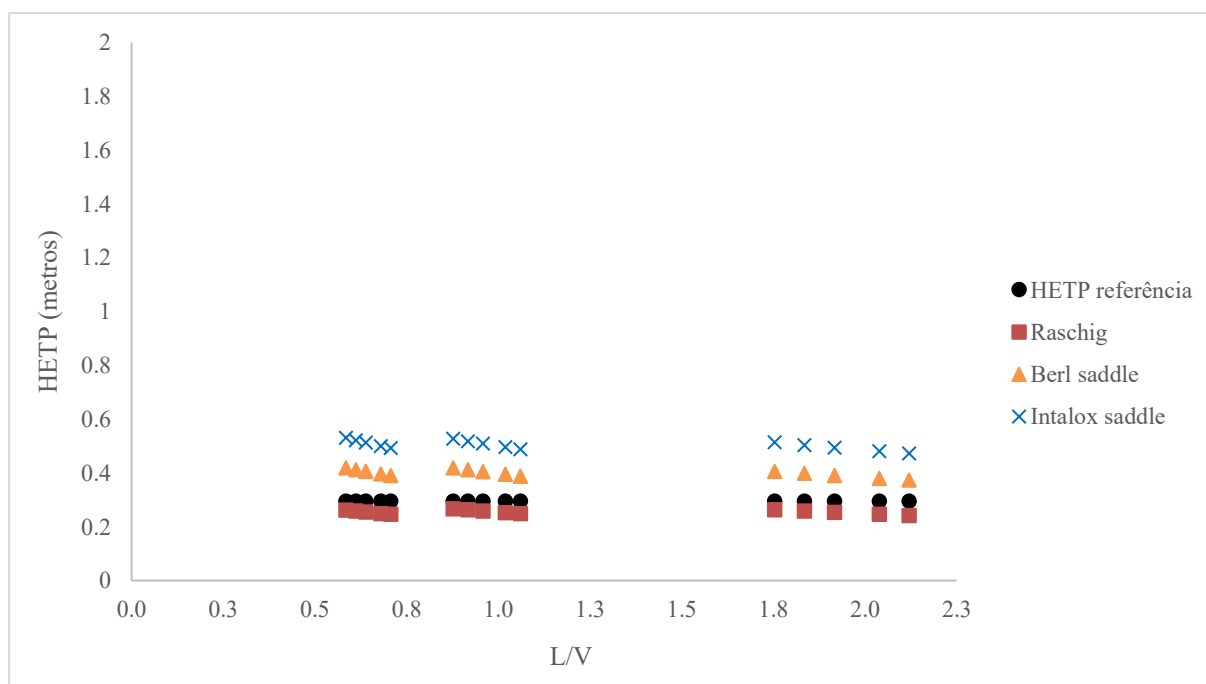


Figura 43 - HETP dos diferentes recheios selecionados para o modelo de Bravo-Fair.

Na Figura 44, para o modelo de Billet, o comportamento dos recheios foi diferente dos outros modelos. A sela de Intalox apresentou o maior ajuste da HETP em relação ao de referência, possuindo baixos valores, ou seja, a melhor eficiência. Posteriormente, o anel de Raschig e a sela de Berl apresentaram uma divergência da HETP em relação à referência, apresentando valores mais elevados e próximos entre si. Além disso, observou-se que, para os três recheios, foi apresentada uma redução de HETP diante do aumento da vazão de água e da redução da vazão de gás (maiores valores de L/V), sendo esse comportamento já observado e justificado anteriormente para o modelo de Onda.

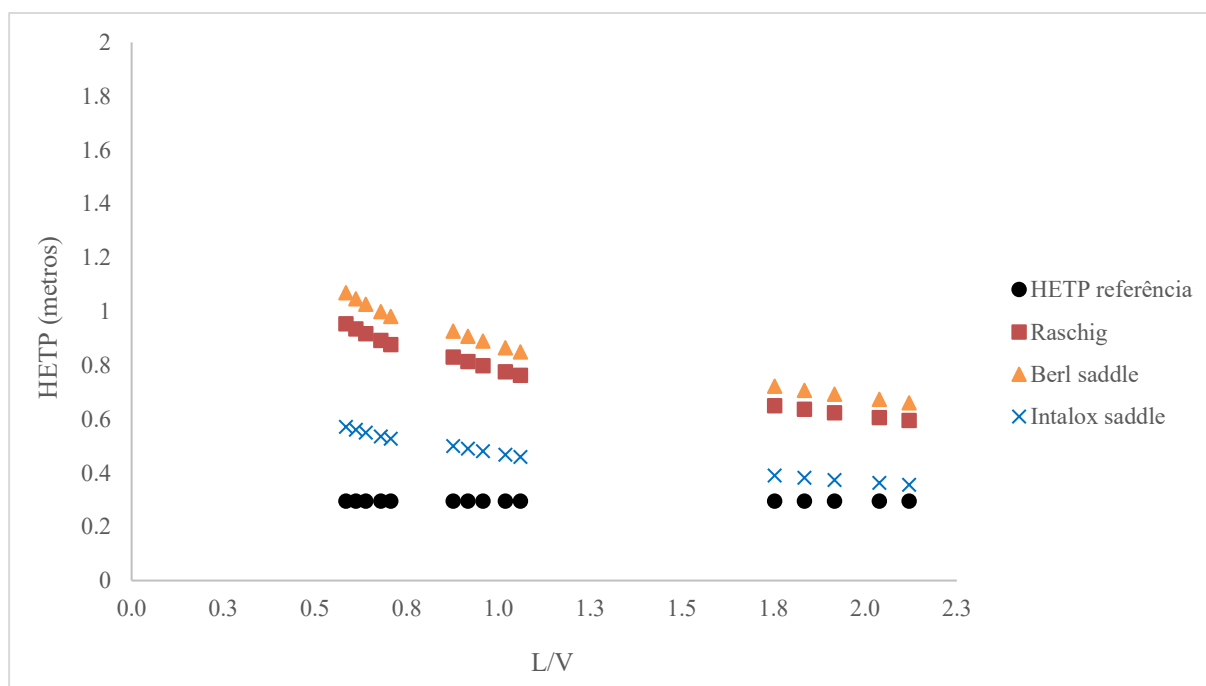


Figura 44 - HETP dos diferentes recheios selecionados para o modelo de Billet.

A partir da análise comparativa dos gráficos de cada modelo, verificou-se que, com base na teoria de transferência de massa, o modelo de Billet apresentou os resultados mais consistentes em relação ao modelo de Onda e Bravo-Fair. Essa adequação do modelo de Billet está ligada à geometria da sela Intalox, cuja superfície contornada proporciona maior área específica em comparação às selas de Berl e aos anéis Raschig, como já apresentada na Tabela 5. Essa característica favorece a transferência de massa, aumentando a difusividade do líquido e reduzindo a altura necessária da seção de recheio (menores valores de HETP). Outro diferencial do modelo de Billet está na inclusão do coeficiente " C_L " na sua equação, que considera a influência da forma e estrutura do recheio no coeficiente de transferência de massa da fase líquida.

Essas observações abordadas alinham-se às conclusões do trabalho de Furter e Newstead (1973), que destacaram a superioridade das selas Intalox em eficiência de transferência de massa, seguidas pelas selas Berl e anéis Raschig. Segundo os autores, o desempenho superior das Intalox deve-se à combinação

de baixa queda de pressão e capacidade de redistribuição uniforme do líquido, fatores essenciais para processos de absorção.

Embora o modelo de Billet apresente maior embasamento teórico e respaldo experimental, destaca-se que o modelo de Bravo-Fair exibiu menores desvios nos valores da HETP entre os recheios analisados. Assim, tendo em vista a divergência nos tamanhos dos recheios simulados, não foi possível assegurar uma conclusão definitiva sobre qual modelo ou qual recheio é mais adequado a partir das análises comparativas.

CAPÍTULO 5

Conclusões

5 CONCLUSÕES

A análise computacional foi realizada com propósito de validar os dados experimentais, abordados na literatura por Barbosa e Góis (2024), e simular novos fenômenos, de transferência de massa e hidrodinâmicos, para a coluna absorvedora do laboratório de processos de separação existente na Universidade Federal da Bahia, a qual é recheada com anéis de Raschig e foi operada com o sistema acetona-água.

Apesar desse sistema ser bastante empregado na comunidade científica por quesitos de facilidade, ainda é difícil encontrar na literatura esse sistema voltado para um estudo de modelagem computacional de uma coluna absorvedora com as mesmas variáveis da coluna em foco. Sendo que, neste presente estudo, foram variados o número de estágios teóricos da coluna de 2 a 4, e foram estudados três modelos de transferência de massa cadastrado no simulador Aspen Plus® (Onda, Bravo-Fair e Billet) para três vazões de gás (0,38 g/min, 0,62 g/min e 0,85 g/min), sendo que para cada uma dessas vazões de gás foram variadas cinco vazões de solvente (860 g/min, 900 g/min, 940 g/min, 1000 g/min e 1040 g/min).

Diante das simulações realizadas para o sistema em foco e da modelagem baseada nas taxas (*rate-based*), a qual é a melhor representação da realidade dos equipamentos, foi possível validar adequadamente os coeficientes volumétricos de transferência de massa da fase líquida ($K_L a$) diante do aumento da vazão de acetona. Assim, para a maior vazão de gás estudada (0,85 g/min de acetona), o modelo de Bravo-Fair foi o mais adequado para representar os dados experimentais. Vale ressaltar que a validação deste coeficiente sobressai à validação das frações mássicas absorvidas (X_n), já que é mais direta e específica para o processo de transferência de massa. Além disso, a validação experimental da queda de pressão foi melhor representada com aproximadamente 20% de desvio médio pelo modelo de Sherwood-Leva-Eckert (SLE).

Além dos fenômenos já abordados por Barbosa e Góis (2024), o simulador Aspen Plus® permitiu explorar novos comportamentos não verificados experimentalmente. Por meio da modelagem de Billet e Schultes (1993), confirmou-se computacionalmente que o fenômeno de inundação foi respeitado em toda a faixa de vazões analisada. Quanto ao *holdup*, os modelos baseados na transferência de massa de Stichlmair, Bravo e Fair (1989) e de Billet e Schultes (1993) apresentaram valores mais elevados e boa aderência aos dados, destacando-se a correlação de Engel, Stichlmair e Geipel (1997) como a mais ajustada ao sistema estudado. Outro destaque foi o modelo de Bravo-Fair, que registrou as maiores áreas interfaciais para transferência de massa e a menor HETP, o que justifica a melhor validação experimental do coeficiente de transferência de massa.

Assim, com base nos fenômenos hidrodinâmicos e de transferência de massa, foi possível concluir que o modelo *rate-based* de Bravo-Fair, o qual se sobressai ao modelo de equilíbrio, foi o mais adequado para o sistema e recheio da coluna neste estudo. Neste contexto, o aumento da vazão de gás esteve

associado diretamente a maiores quedas de pressão, chances de inundação, frações de acetona absorvida, área interfacial de transferência de massa e proximidade do coeficiente volumétrico de transferência de massa com a experimental. É crucial destacar que a escolha do modelo e seus ajustes influenciam diretamente a interpretação dos fenômenos.

Foi simulada também a eficiência do recheio de Raschig considerado até então, diante de outros recheios randômicos similares, a saber, selas de Berl e Intalox. A eficiência foi mensurada a partir da HETP e analisada para cada modelagem *rate-based* (Onda, Bravo-Fair e Billet). Os resultados indicaram que o modelo de Billet demonstrou maior embasamento teórico, com a sela de Intalox apresentando desempenho superior às selas Berl e aos anéis Raschig. Porém, as conclusões não foram definitivas, devido à variação nas dimensões dos recheios simulados, fator que pode distorcer comparações de eficiência.

Portanto, o uso da modelagem computacional para validar dados experimentais permitiu uma análise mais abrangente dos fenômenos estudados, sendo que, às vezes, podem não ser facilmente observados experimentalmente. Além disso, a modelagem computacional no Aspen Plus® ofereceu a capacidade de simular condições variadas, prevendo assim o comportamento do sistema em diversas situações que podem ser difíceis de se replicar em laboratório, reduzindo-se assim os custos, o tempo e os riscos operacionais. Assim, a combinação de dados experimentais com modelos computacionais também permitiu uma análise mais completa, o que facilita a otimização dos processos e análises adequadas.

Dessa forma, sintetizando os dados e análises referentes aos fenômenos de transferência de massa e da hidrodinâmica abordado na coluna absorvedora no presente estudo, ficou evidenciado a importância da modelagem computacional para representar o comportamento desse equipamento, apresentando informações significativas para o seguimento em estudos mais avançados como: análise da fluidodinâmica computacional (CFD), dispersão axial, diferentes faixas de vazões e fluidos, diferentes concentrações de acetona na alimentação, exploração de outros modelos *rate-based*, flexibilidade dos recheios (dimensão, tipos, materiais), impacto da variação de temperatura, diferentes faixas de estágios teóricos, entre outros.

REFERÊNCIAS

ASPEN PLUS . User guide Aspen Plus steady state simulation, v. 10. Aspen Technology Inc, 1999.

ABEDI, M.; SAHA, P.; TAN, X.; KLAUSNER, J. F.; BENARD, A. Evaluation of Mass Transfer and Interfacial Area Correlations in Direct Contact Packed-Bed: Comparison of Correlations. **Proceedings of the 2nd International Conference on Fluid Flow and Thermal Science (ICFFTS'21)**, n. 118, p. 1–7, 2021.

AHMADPOUR, A.; KAVIANI, R. Original Article: Minimization of Energy Consumption in the Condenser of Acetone Recovery Process from Air. v. 2, n. 3, p. 53–66, 2023.

AHMED, M. J.; HAMEED, B. H. Removal of emerging pharmaceutical contaminants by adsorption in a fixed-bed column: A review. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 149, p. 257–266, mar. 2018.

ALBRIGHT, L. et al. **Albright's Chemical Engineering Handbook**. [s.l.] CRC Press, 2008.

ALGRIM, L. B.; PAGONIS, D.; DE GOUW, J. A.; JIMENEZ, J. L.; ZIEMANN, P. J. Measurements and modeling of absorptive partitioning of volatile organic compounds to painted surfaces. **Indoor Air**, v. 30, n. 4, p. 745–756, 2020.

ALMOSLH, A.; ALOBAID, F.; HEINZE, C.; EPPLE, B. Comparison of equilibrium-stage and rate-based models of a packed column for tar absorption using vegetable oil. **Applied Sciences (Switzerland)**, v. 10, n. 7, p. 8–10, 2020.

Aspen plus input language guide. [s.l.: s.n.].

BARBIERI, C.; DE GUIDO, G.; MOIOLI, S. Vapor-liquid equilibrium data for the binary system isopropanol+water at 60 kPa and 80 kPa. **The Journal of Chemical Thermodynamics**, v. 198, p. 107342, nov. 2024.

BARBOSA, I. B; GOIS, L.M.N. Mass Transfer in An Absorption Column. **International Journal of Scientific Research in Science and Technology**, v. 11, n. 5, p. 150–156, 25 set. 2024.

BASHAR, A. Biogas Quality Improvement Using Water Wash and Phosphorus Recovery as Struvite in Jones Island Wwtp. n. August, p. 40–49, 2018.

BAZOOYAR, B.; ZHU, M.; MANOVIC, V.; NABAVI, S. A. Direct numerical simulation of packed and monolith syngas catalytic combustors for micro electrical mechanical systems. **Energy Conversion and Management: X**, v. 20, p. 100422, out. 2023.

BEMER GG, K. G. A new method to predict hold-up and pressure drop in packed columns. **Trans.I.Chem.Eng**, v. 56, 1978.

BIARD, P. F.; COUVERT, A.; GIRAUDET, S. Volatile organic compounds absorption in packed column: theoretical assessment of water, DEHA and PDMS 50 as absorbents. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, v. 59, p. 70–78, 2018.

BILLET, R.; SCHULTES, M. Predicting mass transfer in packed columns. **Chemical Engineering & Technology**, v. 16, n. 1, p. 1–9, 1993.

BILLET, R.; SCHULTES, M. Prediction of Mass Transfer Columns with Dumped and Arranged Packings. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 77, n. 6, p. 498–504, 1999.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. **Balances de momento em cascas e distribuição de velocidades em regime laminar**. [s.l: s.n.].

BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. Generalized Correlation for Mass Transfer in Packed Distillation Columns. **Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 21, n. 1, p. 162–170, 1982.

CALDAS, J. N.; LACERDA, A. I. DE; VELOSO, E.; PASCHOAL, L. C. M. **Internos de Torres: Pratos e Recheios**. 2. ed. [s.l.] Editora Interciência; 2ª edição, 2007.

CHEN, D.; LIU, R.; LIN, Q.; MA, S.; LI, G.; YU, Y.; ZHANG, C.; AN, T. Volatile organic compounds in an e-waste dismantling region: From spatial-seasonal variation to human health impact. **Chemosphere**, v. 275, p. 130022, 2021.

CHEW, K. R.; LEONG, H. Y.; KHOO, K. S.; VO, D. V. N.; ANJUM, H.; CHANG, C. K.; SHOW, P. L. Effects of anaerobic digestion of food waste on biogas production and environmental impacts: a review. **Environmental Chemistry Letters**, v. 19, n. 4, p. 2921–2939, 2021.

CHUANG, K. T.; NANDAKUMAR, K. DISTILLATION | Tray Columns: Design. In: **Encyclopedia of Separation Science**. [s.l: s.n.]. v. 1p. 1135–1140.

CREMASCO, M. A. **FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MASSA**. 3. ed. [s.l.] Blucher, 2016.

DELAHANTY, J. C.; HUGHES, M.; GARIMELLA, S. Desorber and rectifier geometries for ammonia-water absorption systems; Part II: Mass transfer, flooding, and component performance. **International Journal of Refrigeration**, v. 122, p. 245–255, 2021.

DEVKOTA, S.; POKHREL, R.; RAYAMAJHI, B.; UPRETY, B. Design and cost estimation of a CO₂ capture plant from cement flue gas for urea production in Nepal. **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 111, n. September, p. 103484, 2021.

DORAI, F.; MOURA TEIXEIRA, C.; ROLLAND, M.; CLIMENT, E.; MARCOUX, M.; WACHS, A. Fully resolved simulations of the flow through a packed bed of cylinders: Effect of size distribution. **Chemical Engineering Science**, v. 129, p. 180–192, jun. 2015.

ECHENIQUE, J. B. Caracterização Fluidodinâmica de Meios Porosos Formados com Recheios Industriais Projeto de Final de Curso. 2021.

ENGEL, V., STICHLMAIR, L. AND GEIPEL, W. New model to predict liquid hold-up in packed columns using data based on capacitance measurement technique. **Proc Symp on Distillation and Absorption, IChemE Symp Series**, 1997.

FERNANDES, M. HETP Evaluation of Structured and Randomic Packing Distillation Column.

In: **Mass Transfer in Chemical Engineering Processes**. [s.l.] InTech, 2011.

FILARSKY, F.; SCHMUCK, C.; SCHULTZ, H. J. Development of a gas hydrate absorption for energy storage and gas separation - Proof of Concept based on natural gas. **Energy Procedia**, v. 158, p. 5367–5373, 2019.

FOUST, A. S.; WENZEL, L. A.; CLUMP, C. W.; MAUS, L.; ANDERSEN, L. B. **Principles Of Unit Operations**. [s.l.] Rio de Janeiro: Editora Guanabara Dois, 1980.

FU, Y.; BAO, J.; SINGH, R.; WANG, C.; XU, Z. Investigation of countercurrent flow profile and liquid holdup in random packed column with local CFD data. **Chemical Engineering Science**, v. 221, p. 115693, 2020.

FURTER, W. F.; NEWSTEAD, W. T. Comparative performance of packings for gas-liquid contacting columns. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 51, n. 3, p. 326–331, 26 jun. 1973.

GAUTO, M. A.; ROSA, G. R. **Processos e Operações Unitárias da Indústria Química**. [s.l.] Ciência Moderna, 2011.

GEANKOPLIS, C. J. **Transport Processes and Unit Operations**. 3rd. ed. [s.l.] Pearson College Div, 1993.

GEANKOPLIS, C. J.; HERSEL, A.; LEPEK, D. H. **Transport Processes and Separation Process Principles**. 5th. ed. [s.l.] International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences..Pearson College Div., 2018.

HANUSCH, F.; REHFELDT, S.; KLEIN, H. Liquid Maldistribution in Random-Packed Columns: Experimental Investigation of Influencing Factors. **Chemical Engineering and Technology**, v. 41, n. 11, p. 2241–2249, 2018.

HAUSHOFER, G.; SCHLAGER, M.; WOLF-ZÖLLNER, V.; LEHNER, M. Automated detection of loading and flooding points in packed columns. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 196, p. 61–70, 2023.

HEGELY, L.; ROESLER, J.; ALIX, P.; ROUZINEAU, D.; MEYER, M. Absorption methods for the determination of mass transfer parameters of packing internals: A literature review. **AIChE Journal**, v. 63, n. 8, p. 3246–3275, 25 ago. 2017.

HEMMATI, A.; RASHIDI, H.; BEHRADFAR, K.; KAZEMI, A. A comparative study of different mass transfer and liquid hold-up correlations in modeling CO₂ absorption with MEA. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 62, n. November 2018, p. 92–100, 2018.

HEMMATI, A.; FARAHZAD, R.; SURENDAR, A.; AMINAHMADI, B. Validation of mass transfer and liquid holdup correlations for CO₂ absorption process with methyldiethanolamine Solvent and piperazine as an activator. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 126, p. 214–222, 2019.

HEYMES, F.; MANNO DEMOUSTIER, P.; CHARBIT, F.; LOUIS FANLO, J.; MOULIN, P. Hydrodynamics and mass transfer in a packed column: Case of toluene absorption with a viscous absorbent. **Chemical Engineering Science**, v. 61, n. 15, p. 5094–5106, 2006.

INCROPERA, F. P.; DEWITT, D. P.; BERGMAN, T. L.; LAVINE, A. S. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. [s.l.] LTC, 2008.

KAMAL I. M. AL-MALAH. **Aspen plus: chemical engineering applications**. 2nd. ed. [s.l.] John Wiley & Sons, 2022.

KANG, J. L.; CIOU, Y. C.; LIN, D. Y.; WONG, D. S. H.; JANG, S. S. Investigation of hydrodynamic behavior in random packing using CFD simulation. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 147, n. 2001, p. 43–54, 2019.

KHADANGA, S. P.; SAMAL, D. K.; PATNAIK, P. K.; ROY, G. K. Pressure-drop and mass transfer study in multi-stage PSRBC sparger bubble column-An experimental investigation. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 153, p. 107347, abr. 2024.

KISTER, H. Z. **Distillation Design**. [s.l.] McGraw-Hill, New York, USA, 1992.

KOHL, A. L.; NIELSEN, R. B. **Gas Purification**. [s.l.] Elsevier, 1997.

KOOIJMAN, H. A.; TAYLOR, R. **The ChemSep Book**. Second Edi ed. [s.l: s.n.].

LAMPREA PINEDA, P. A.; DEMEESTERE, K.; SABBE, M.; BRUNEEL, J.; VAN LANGENHOVE, H.; WALGRAEVE, C. Effect of (bio)surfactant type and concentration on the gas-liquid equilibrium partitioning of hydrophobic volatile organic compounds. **Journal of Hazardous Materials**, v. 443, n. PB, p. 130320, 2023.

LARACHI, F.; LÉVESQUE, S.; GRANDJEAN, B. P. A. Seamless Mass Transfer Correlations for Packed Beds Bridging Random and Structured Packings. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 47, n. 9, p. 3274–3284, 1 maio 2008.

LASO, MANUEL; VON STOCKAR, U. Absorption. **Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology**, 2000.

LAW, A. M. **Simulation Modeling and Analysis**. [s.l: s.n.].

LI, W.; YU, K.; YUAN, X.; LIU, B. An anisotropic turbulent mass transfer model for simulation of pilot-scale and industrial-scale packed columns for chemical absorption. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 88, p. 775–789, set. 2015.

LIMA, J. C. F.; COSTA, J. C. DA; MATTEDI, S.; GÓIS, L. M. N. DE. Avaliação da separação acetona-água em uma coluna de recheio. **Research, Society and Development**, v. 10, n. 10, p. e76101018592, 5 ago. 2021.

LINEK, V.; MOUCHA, T.; REJL, F. J. Hydraulic and Mass Transfer Characteristics of Packings for Absorption and Distillation Columns. Rauschert-Metall-Sattel-Rings. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 79, n. 7, p. 725–732, out. 2001.

MAĆKOWIAK, J. Progress in design of random packing for gas-liquid systems. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 99, p. 28–42, 2015.

MACKOWIAK, J.; HALL, C. **Fluid Dynamics of Packed Column: Principles of the Fluid Dynamic Design of Columns for Gas/Liquid and Liquid/Liquid Systems**. [s.l.] Springer, 2010.

MAHAMOUDOU, A.; LE PIERRÈS, N.; RAMOUSSE, J. Review of coupled heat and mass transfer studies in falling film absorbers: Modeling, experimental and thermodynamic approaches. **International Journal of Refrigeration**, v. 136, n. January, p. 229–244, 2022.

MEZIANE, I.; FENARD, Y.; DELORT, N.; HERBINET, O.; BOURGALAIS, J.; RAMALINGAM, A.; HEUFER, K. A.; BATTIN-LECLERC, F. Experimental and modeling study of acetone combustion. **Combustion and Flame**, v. 257, p. 112416, nov. 2023.

MONAKHOVA, Y. B.; POZHAROV, M. V.; ZAKHAROVA, T. V.; KHVOROSTOVA, E. K.; MARKIN, A. V.; LACHENMEIER, D. W.; KUBALLA, T.; MUSHTAKOVA, S. P. Association/Hydrogen Bonding of Acetone in Polar and Non-polar Solvents: NMR and NIR Spectroscopic Investigations with Chemometrics. **Journal of Solution Chemistry**, v. 43, n. 11, p. 1963–1980, 30 nov. 2014.

MORADI, H.; BAHMANYAR, H.; AZIZPOUR, H. Investigation of solvent extraction of acetic acid and acetone from water in the presence of SiO₂ nanoparticles using molecular dynamics simulation. **Journal of Molecular Graphics and Modelling**, v. 133, p. 108871, dez. 2024.

NETO, M. W. Simulação e otimização da absorção do CO₂ com água no tratamento do biogás. Simulation and optimization of CO₂ absorption with water in biogas treatment. Simulación y optimización de la absorción de CO₂ con agua en el tratamiento del biogás. v. 2022, p. 1–14, 2022.

NIEGODAJEW, P.; WILCZYŃSKI, M.; MAREK, M.; DROBNIAK, S.; ASENDRYCH, D.; ELSNER, W.; GNATOWSKA, R.; STEMPKA, J. A study of liquid spreading in laboratory scale random packing column with an optical method supplemented with liquid holdup characteristics. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 96, n. June 2017, p. 162–168, 2018.

OLIVEIRA, H. N. M. DE. **Determinação de dados de Equilíbrio Líquido- Vapor para Sistemas Hidrocarbonetos e Desenvolvimento de uma nova Célula Dinâmica**. [s.l.: s.n.].

ONDA, K.; SADA, E.; TAKEUCHI, H. Gas absorption with chemical reaction in packed columns. **Journal of Chemical Engineering of Japan**, v. 1, n. 1, p. 62–66, 1968.

OTHMER, D. F.; SCHEIBEL, E. G. Acetone absorption by water in a semicommercial packed tower. **Transactions of the American Institute of Chemical Engineers**, v. 37, 1941.

OTHMER, D. F.; SCHEIBEL, E. G. Gas absorption as a function of diffusivities and flow rates. **Transactions of the American Institute of Chemical Engineers**, v. 40, 1944.

Packed column Flood And Pressure Drop. Disponível em: <<https://www.brewiki.org/pressure-drop/packedcolumn-flood-and-pressure-drop.html>>.

PATUZZO, G. S.; FRARE, L. M. Otimização e análise do processo de absorção por water scrubbing no refino de biogás. 2019.

PERRY, R. H.; GREEN, D. W. **Perry's Chemical Engineers' Handbook**. [s.l.] The McGraw-Hill Companies, 2008.

PINHEIRO, J. Q.; CAVALCANTI, G. R. C.; BARROS, H. C. L. Global climate changes:

Perception bias, time and space. **Estudos de Psicologia**, v. 23, n. 3, p. 282–292, 2018.

PIROLA, C. Experimental and simulated operation of absorption column for the removal of VOC from air. **Chemical Engineering Transactions**, v. 74, n. February, p. 817–822, 2019.

PIROLA, C.; MATTIA, M. Purification of air from volatile organic compounds by countercurrent liquid gas mass transfer absorption process. **International Journal of Thermofluids**, v. 9, 2021.

PLUS, A. **User guide Aspen Plus steady state simulation**. [s.l.] Aspen Technology Inc, 1999.

PÖSCHMANN, R. et al. Will laboratory and pilot plant columns soon become superfluous? – A concept for the determination of structured packing characteristics in a measuring cell under distillation conditions. **Separation and Purification Technology**, v. 325, n. July, p. 124617, 2023.

QUAN, H. et al. Mass transfer mechanism and model of CO₂ absorption into a promising DEEA-HMDA solvent in a packed column. **Separation and Purification Technology**, v. 320, n. March, p. 124095, 2023.

RAHBAR, M. S.; KAGHAZCHI, T. Modeling of packed absorption tower for volatile organic compounds emission control. **International Journal of Environmental Science & Technology**, v. 2, n. 3, p. 207–215, 30 set. 2005.

REID, R. C.; PRAUSNITZ, J. M.; POLING, B. E. **II. Properties of Gases and Liquids**. 4th. ed. [s.l.] New York: McGraw-Hil, 1987.

RICHARDSON, J. F.; HARKER, J. H.; BACKHURST, J. R. **Coulson and Richardson's Chemical Engineering**. Particle T ed. [s.l.: s.n.].

ROCHA, J. A.; BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. Distillation columns containing structured packings: a comprehensive model for their performance. 1. Hydraulic models. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 32, n. 4, p. 641–651, 1 abr. 1993.

ROW, K. H.; LEE, C. H. Correlation of HETP and experimental variables in preparative liquid chromatography. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 16, n. 1, p. 22–27, jan. 1999.

SALTEN, A. H. J.; KENIG, E. Y. Model based random packing optimisation for absorption processes using the hydrodynamic analogy concept. **Chemical Engineering Science**, v. 242, p. 116670, 2021.

SANTOS, M. F. C.; ALBUQUERQUE, É. L. DE. **Transferência de massa entre fases**.

SCHLESINGER, S. Terminology for model credibility. **SIMULATION**, v. 32, n. 3, p. 103–104, 1 mar. 1979.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J.; ROPER, D. K. **Separation Process Principles- Chemical and Biochemical Operations**. 3ed. ed. [s.l.] John Wiley & Sons, 2010.

SHEKHAR, S. **SIMULATION OF AN ADSORPTION COLUMN FOR THE REMOVAL OF ETHYL ACETATE FROM AIR**. [s.l.] National Institute Of Technology Rourkela, 2015.

SHERWOOD, T. K. **Absorption and Extraction**. [s.l.] New York:McGraw-Hill book company, 1937.

SHIBATA, F. S. **Biogás Utilizando Carbonatos Em Coluna Recheada**. [s.l: s.n.].

SHINNAR, R. Chemical Reactor Modeling—The Desirable and the Achievable. In: [s.l: s.n.]. p. 1–36.

SILVA, C. D. S. **EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR DO SISTEMA TERNÁRIO ETANOL + ÁGUA + 1-ETIL-3-METIL IMIDAZÓLIO CLORETO: EXPERIMENTAL E MODELAGEM TERMODINÂMICA**. [s.l.] UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO, 2016.

SIRVINSKAS, L. P. **Manual do Direito Ambiental**. [s.l: s.n.].

SOBOLL, S.; HAGEMANN, I.; KOCKMANN, N. Performance of Laboratory-Scale Stirred-Pulsed Extraction Columns with Different Diameters. **Chemie Ingenieur Technik**, v. 89, n. 12, p. 1611–1618, 14 dez. 2017.

SON, Y.; WON, W. Liquid holdup and pressure drop in packed column with structured packing under offshore conditions. **Chemical Engineering Science**, v. 195, p. 894–903, fev. 2019.

STARRANTINO, A.; MCCARLEY, K.; MOHAMMAD, S.; CAI, T.; AICHELE, C. The influence of physical properties on structured packing HETP correlations. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 192, p. 468–476, 2023.

STICHLMAIR, J.; BRAVO, J. L.; FAIR, J. R. General model for prediction of pressure drop and capacity of countercurrent gas/liquid packed columns. **Gas Separation & Purification**, v. 3, n. 1, p. 19–28, mar. 1989.

STRIGLE, R. F. Packed Tower Design and Applications: Random Structured Packings. p. 340, 1994.

TREYBAL, R. E. **Mass transfer operations**. [s.l.] McGraw-Hill, 1980.

VAN DUC LONG, N.; LEE, D. Y.; PARK, S. Y.; HWANG, B. B.; LEE, M. HETP measurement using industrial-scale batch distillation. **Chemical Engineering and Processing - Process Intensification**, v. 148, n. October 2019, p. 107800, 2020.

VAN NESS, H. C.; SMITH, J. M.; ABBOTT, M. M. **Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química**. [s.l.] 5ª edição. Rio de Janeiro: LTC editora, 2000.

VELO, A. F.; CARVALHO, D. V. S.; HAMADA, M. M. Liquid distribution and holdup in the random packed column. **Flow Measurement and Instrumentation**, v. 62, n. May 2017, p. 176–185, 2018.

WALLIS, G. B. **One-Dimensional Two-Phase Flow**. [s.l.] McGraw-Hill, New York, USA, 1969.

WANG, C. **Mass transfer coefficients and effective area of packing**. [s.l.] The University of Texas at Austin, 2015.

WANKAT, P. C. **Separation Process Engineering Includes Mass Transfer Analysis**. [s.l.] Prentice Hall, 2017. v. 7

WHITE, R. E.; OTHMER, D. F. Gas absorption in Stedman packed column. **Transactions of the American Institute of Chemical Engineers**, v. 38, 1942.

WHITMAN, W. G. **A preliminary experimental confirmation of the two-film theory of gas adsorption**. [s.l.] Chem. Metall. Eng. v. 29, p. 146, 1923.

WILKE, C. R.; CHANG, P. Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. **AIChE Journal**, v. 1, n. 2, p. 264–270, 17 jun. 1955.

WOLF-ZÖLLNER, V.; SEIBERT, F.; LEHNER, M. Extended performance comparison of different pressure drop, hold-up and flooding point correlations for packed columns. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 147, p. 699–708, 2019.

XIAO, J. Q.; LEVIN, S. M. The diagnosis and management of solvent-related disorders. **American Journal of Industrial Medicine**, v. 37, n. 1, p. 44–61, jan. 2000.

YORK, R.; HOLMES, R. C. Vapor-Liquid Equilibria of the System Acetone-Acetic Acid-Water. p. 345–350, 1942.

ZAWADZKI, D.; BLATKIEWICZ, M. Pressure drop model for rotating packed bed structural internals. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 196, p. 89–100, ago. 2023.

ZHANG, X.; ZHAO, W.; NIE, L.; SHAO, X.; DANG, H.; ZHANG, W.; WANG, D. A new classification approach to enhance future VOCs emission policies: Taking solvent-consuming industry as an example. **Environmental Pollution**, v. 268, p. 115868, 2021.

ZIELINSKI, J. M.; HANLEY, B. F. Practical friction-based approach to modeling multicomponent diffusion. **AIChE Journal**, v. 45, n. 1, p. 1–12, 16 jan. 1999.

ANEXOS

Anexo A: Principais equacionamentos e correlações

Modelos	Características	Equações
(ONDA; SADA; TAKEUCHI, 1968)	Número de Weber da fase líquida	$We_L = \frac{\rho_t^L \cdot (U_s^L)^2}{a_p \cdot \sigma}$
	Número de Schmidt da fase líquida	$Sc_L = \frac{\mu^L}{\rho_t^L \cdot D_{i,k}^L}$
	Número de Froude da fase líquida	$Fr_L = \frac{a_p \cdot (U_s^L)^2}{g}$
	Número de Reynolds da fase líquida	$Re_L = \frac{\rho_t^L \cdot U_s^L}{a_p \cdot \mu^L}$
	Área superficial molhada por unidade de volume da coluna (m ² /m ³)	$a_w = a_p \left[1 - \exp \left(-1,45 \left(\frac{\sigma_c}{\sigma} \right)^{0,75} \right) Re_L^{0,1} Fr_L^{-0,05} We_L^{0,2} \right]$
	Número de Reynolds da fase líquida baseada na área superficial molhada	$Re'_L = \frac{\rho_t^L \cdot U_s^L}{a_w \cdot \mu^L}$
	Área interfacial total para transferência de massa (m ²)	$a^I = a_w A_t h_p$
	Coefficiente de transferência de massa para fase líquida (m/s)	$k_{i,k}^L = 0,0051 (Re'_L)^{0,667} Sc_{L,i,k}^{-0,5} (a_p d_p)^{0,4} \left(\frac{\mu^L g}{\rho_t^L} \right)^{0,333}$
	Altura equivalente a um prato teórico (HETP)	$HETP = \frac{H}{NETS_{\text{médio}}}$
Bemer e Kalis (1978)	Holdup total da fase líquida	$h_L = 0,34 a_p^{1/3} U_L^{2/3}$
(BRAVO; FAIR, 1982)	Número de Schmidt da	$Sc_L = \frac{\mu^L}{\rho_t^L \cdot D_{i,k}^L}$

	fase líquida	
	Número de Reynolds da fase vapor	$Re_L = \frac{\rho_t^V \cdot U_s^V}{a_p \cdot \mu^V}$
	Número de capilaridade	$Ca_L = \frac{U_s^L \mu^L}{\sigma}$
	Área superficial efetiva por unidade de volume da coluna (m ² /m ³)	$a_e = \frac{19,78 a_p (Ca_L Re_V)^{0,392} \sigma^{0,5}}{h_p^{0,4}}$
	Número de Reynolds da fase líquida baseada na área superficial efetiva	$Re'_L = \frac{\rho_t^L \cdot U_s^L}{a_e \cdot \mu^L}$
	Área interfacial total para transferência de massa (m ²)	$a^I = a_e A_t h_p$
	Coefficiente de transferência de massa para fase líquida (m/s)	$k_{i,k}^L = 0,0051 (Re'_L)^{0,667} Sc_{L,i,k}^{-0,5} (a_p d_p)^{0,4} \left(\frac{\mu^L g}{\rho_t^L} \right)^{0,333}$
	Altura equivalente a um prato teórico (HETP)	$HETP = \frac{H}{NETS_{médio}}$
Wilke-Chang (REID; PRAUSNITZ; POLING, 1987)	Coefficiente de difusão da fase líquida de um componente na mistura	$D_i^L = 1,17282 \times 10^{-16} \cdot \frac{(\phi M)^{\frac{1}{2}} \cdot T}{n^L \cdot (V^{*,L}_{bi})^{0,6}}$ $\phi M = \frac{\sum_{j \neq i} x_j \phi_j M_j}{\sum_{j \neq i} x_j}$
Stichlmair, Bravo e Fair (1989)	Holdup fracionário	$h_{T,Ld} = 0,555 \cdot \left(\frac{a_T U_L^2}{g \cdot \epsilon^{4,65}} \right)^{\frac{1}{3}}$
	Holdup total da fase líquida	$h_L = h_t h_p A_t$
(BILLET; SCHULTES,	Diâmetro hidráulico	$d_h = 4 \cdot \frac{\epsilon}{a_p}$

1993)		
	Holdup fracionário	$h_t = \left(\frac{12 \mu^L a_p^2 U_s^L}{\rho_t^L g} \right)^{\frac{1}{3}}$
	Holdup total da fase líquida	$h_L = h_t h_p A_t$
	Área superficial efetiva por unidade de volume da coluna (m ² /m ³)	$a_e = a_p \frac{1,5}{\sqrt{a_p d_h}} \left(\frac{u_s^L d_h \rho_t^L}{\mu^L} \right)^{-0,2} \left(\frac{(u_s^L)^2 d_h \rho_t^L}{\sigma} \right)^{0,75} \left(\frac{(u_s^L)^2}{g d_h} \right)^{-0,45}$
	Área interfacial total para transferência de massa (m ²)	$a^I = a_e A_t h_p$
	Coeficiente de transferência de massa para fase líquida (m/s)	$k_{i,k}^L = C_L \left(\frac{g \rho_t^L}{\mu^L} \right)^{0,167} \sqrt{\frac{D_{i,k}^L}{d_h}} \left(\frac{u_s^L}{a_p} \right)^{0,333}$
	Altura equivalente a um prato teórico (HETP)	$HETP = \frac{H}{NETS_{\text{médio}}}$
Engel, Stichlmair e Geipel (1997)	Holdup fracionário	$h_{T,Ld} = 0,93 \cdot \left(\frac{U_s^L a_T}{g} \right)^{\frac{1}{6}} \left(\frac{\mu_L^2 a_T^3}{\rho_L^2 g} \right)^{\frac{1}{10}} \left(\frac{a_T^2 \sigma_L}{\rho_L g} \right)^{\frac{1}{8}}$
	Holdup total da fase líquida	$h_L = h_t h_p A_t$
(BILLET; SCHULTES, 1999)	Termos parciais (ponto de carga)	$\left(\frac{a_h}{a} \right) = 0,85 * C_h * \left(\frac{(U_{\{L,Lo\}} * \rho_L)}{(a * \mu_L)} \right)^{0,25}$ $* \left(\frac{(U_{\{L,Lo\}}^2 * a)}{g} \right)^{0,1} \quad se \left(\frac{(U_{\{L,Lo\}} * \rho_L)}{(a * \mu_L)} \right) \geq 5$ $h_{\{L,Lo\}} = \left(\frac{(12 * \mu_L)}{(g * \rho_L)} * a^2 * U_{\{L,Lo\}} \right)^{\frac{1}{3}} * \left(\frac{a_h}{a} \right)^{\frac{2}{3}}$

		$\text{para } \left(\frac{L}{V}\right) * \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \leq 0.4 : n_{FI} = -0.194$ $\text{para } \left(\frac{L}{V}\right) * \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \geq 0.4: n_{FI} = -0.708$
	Coeficiente de resistência para o ponto de carga	$\psi_{\{LO\}} = \left[\frac{g}{\left(0.695 * C_{\{LO\}} * \left(\frac{\mu_L}{\mu_G}\right)^{\{0.1588\}}\right)^2} \right] * \left[\left(\frac{L}{G}\right) * \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} * \left(\frac{\mu_L}{\mu_G}\right)^{\{0.4\}} \right]^{\{1.46\}} \text{ se } \left(\frac{L}{G}\right) * \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} > 0.4$
	Velocidade do gás no ponto de carga (m/s)	$U_{\{G,LO\}} = \sqrt{\frac{g}{\psi_{\{LO\}}}} * (\varepsilon - h_{\{L,LO\}}) * \sqrt{\frac{h_{\{L,LO\}}}{a}} * \sqrt{\frac{\rho_L}{\rho_G}}$
	Termos parciais (ponto de inundação)	$Re_L = \frac{(u_L * \rho_L)}{(a * n_L)} < 5: \left(\frac{a_h}{a}\right) = C_h * \left[\frac{u_L * \rho_L}{a * n_L}\right]^{\{0.15\}} * \left[\frac{u_L^2 * a}{g}\right]^{\{0.1\}}$ $Re_L = \frac{(u_L * \rho_L)}{(a * n_L)} \geq 5: \left(\frac{a_h}{a}\right) = C_h * 0.85 * \left[\frac{u_L * \rho_L}{a * n_L}\right]^{\{0.25\}} * \left[\frac{u_L^2 * a}{g}\right]^{\{0.1\}}$ $h_L = \left[12 * \left(\frac{1}{g}\right) * \left(\frac{\eta_L}{\rho_L}\right) * u_L * a^2\right]^{\left\{\frac{1}{3}\right\}} * \left(\frac{a_h}{a}\right)^{\left\{\frac{2}{3}\right\}}$ $h_{\{L,FL\}} = 2.2 * h_L * \left[\frac{\eta_L * \rho_W}{\eta_W * \rho_L}\right]^{\{0.05\}}$ $C_{\{FI\}} = 0.6244 * C_{\{FI\}} * \left(\frac{\eta_L}{\eta_V}\right)^{\{0.1028\}}$ $\text{para } \left(\frac{L}{V}\right) * \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \leq 0.4 : n_{FI} = -0.194$ $\text{para } \left(\frac{L}{V}\right) * \sqrt{\frac{\rho_v}{\rho_L}} \geq 0.4: n_{FI} = -0.708$

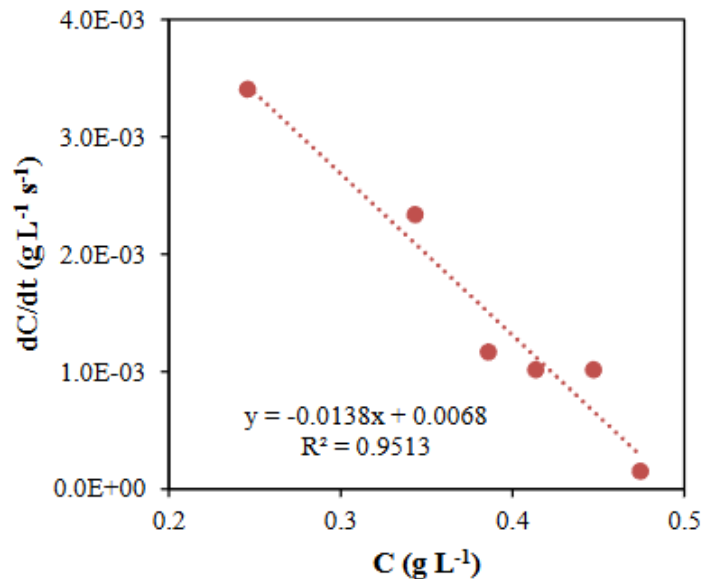
	Coeficiente de resistência para o ponto de inundação	$\Psi_{\{FI\}} = \frac{g}{(C_{\{FI\}}^2)} * \left[\left(\frac{L}{V} \right) * \sqrt{\left(\frac{\rho_V}{\rho_L} * \left(\frac{\eta_L}{\eta_V} \right)^{\{0.2\}} \right)} \right]^{\{-2n_{FI}\}}$
	Velocidade do gás no ponto de inundação (m/s)	$u_{\{V,FI\}} = \sqrt{2} * \sqrt{\left(\frac{g}{\psi_{\{FI\}}} \right)} * \left[\frac{(\varepsilon - h_{\{L,FI\}})^{\{\frac{3}{2}\}}}{\varepsilon^{\{\frac{1}{2}\}}} \right] * \sqrt{\left(\frac{h_{\{L,FI\}}}{a} \right)} * \sqrt{\left(\frac{\rho_L}{\rho_V} \right)}$
(MACKOWIAK; HALL, 2010)	Holdup total da fase líquida	$h_L = \left(\frac{3}{4} \right) * \left(\frac{3}{g} \right)^{\{\frac{1}{3}\}} * a_p^{\{\frac{2}{3}\}} * \left(\frac{\mu_L}{\rho_L} \right)^{\{\frac{1}{3}\}} * u_L^{\{\frac{1}{3}\}}$

Anexo B: Resultados do trabalho de Barbosa e Góis (2024)

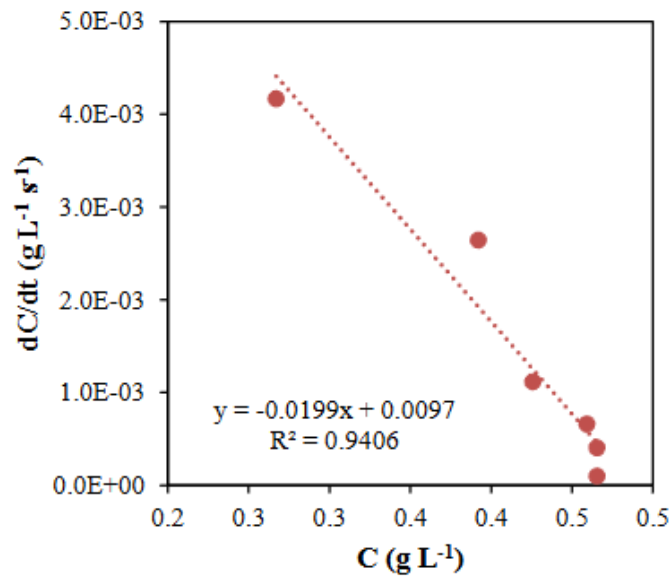
- Dados do coeficiente de transferência de massa:

Liquid flow($V_{\text{água}}$) (L min ⁻¹)	Gas Flow (V_{ar}) (Lmin ⁻¹)		
	0,4	0,8	1,2
	Mass Transfer Coefficient, $K_L a$ (s ⁻¹)		
0,86	0,0074	0,0198	0,0154
0,90	0,0093	0,0138	0,0277
0,94	0,0087	0,0164	0,0143
1,00	0,0043	0,0199	0,0206
1,04	0,0059	0,0166	0,0138

- Gráfico, dC/dt versus C , para uma vazão de líquido de 0,8 L/min e uma vazão de ar de 0,9 L/min:



- Gráfico, dC/dt versus C , para uma vazão de líquido de 1,00 L/min e uma vazão de ar de 0,8 L/min:



- Valores do coeficiente de transferência de massa (K_{La}) versus vazão de líquido (V_{liq}) para diferentes vazões de gás (V_{air}):

